

## **Tentamen i Kemisk reaktionsteknik för Kf3, K3 (KKR 100)**

**Onsdagen den 18 augusti 2010 kl 8:30-13:30 i VV-salarna**

**Examinator:** Docent Louise Olsson, tel. 031-772 4390

### **Tillåtna hjälpmedel**

Valfri räknare  
Formelsamlingar utgiven av institutionen  
TEFYMA  
Standard Mathematics Handbook  
beta Mathematics Handbook  
Physics Handbook  
Handbook of Chemistry and Physics

### **Ej tillåtna hjälpmedel**

Kursbok, "Elements of Chemical Reaction Engineering"  
Kompendium I KRT  
KRT övningsbok  
Lösta exempel



Uppgift 1 (6 poäng)

En vätskefas reaktion  $A+B \rightarrow C$  utföres i en semisats reaktor. Reaktionen är första ordningen med avseende på A. Den följer Arrhenius lagen för hastighetskonstanter och är kraftigt exoterm. Ämne B finns i reaktorn från start och är i mycket stort överskott. Ämne A hålls i med ett konstant flöde tills reaktorn är full. Sätt upp balanser för att beskriva hur **koncentrationen av ämne A ändras och temperaturen i satsreaktorn ändras** under tiden för fyllning.

Alla införda beteckningar skall förklaras. Alla ekvationer tydligt motiveras och lösningsgången beskrivas i detalj. De slutliga differentialekvationerna behöver ej lösas.

Uppgift 2 (6 poäng)

För att undersöka idealiteten hos en cylindrisk tubreaktor utförs ett spårämnesförsök, som finns i tabellen nedan. Reaktionen ( $A \rightarrow B$ ) är av första ordningen map A.

t (min)	c (mol/m <sup>3</sup> )
1	0
2	3
5	10
6	15
9	12
11	5
14	0

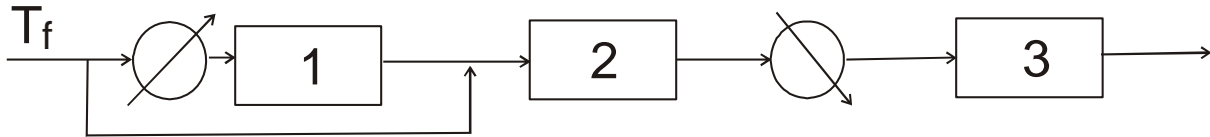
Följande data gäller:

Tubens längd	0.3 m
Tubens diameter	0.1 m
Flöde	3 l/min
Reaktionshastigheten, $r=kC_A$	

- Vad är dispersionskoefficienten i en dispersionsmodell om man antar att ingen dispersion skedde i inloppet och utloppet till tuben ?
- Om en tankseriemodell används. Hur många tankar skall användas?

### Uppgift 3 (6 poäng)

Reaktionen  $A \rightarrow B$  är en exoterm jämviktsprocess. För att öka omsättningsgraden utförs reaktionen i en serie av tre reaktorer. Före den andra reaktorn införs en cold-shot och före den tredje reaktorn en mellankylning. Nedan är reaktorkombinationen och locus of maximum rates kurvan utritad (man vill utnyttja "maximum rates" i denna anläggning). Temperaturen på vätskeinflödet är  $180^\circ\text{C}$ . Detta flöde värms till  $300^\circ\text{C}$  in till första reaktorn. Inflödet består av 25% A och 75% inert material, I. Inflödet av det inerta materialet är  $2.5 \text{ mol/s}$  till hela systemet. 30% av flödet förs förbi reaktor 1. Temperaturen in till den tredje reaktorn kyls till  $350^\circ\text{C}$ .



Värmekapaciteten för ämne A:  $70 \text{ J}/(\text{mol K})$

Värmekapaciteten för ämne B:  $82 \text{ J}/(\text{mol K})$

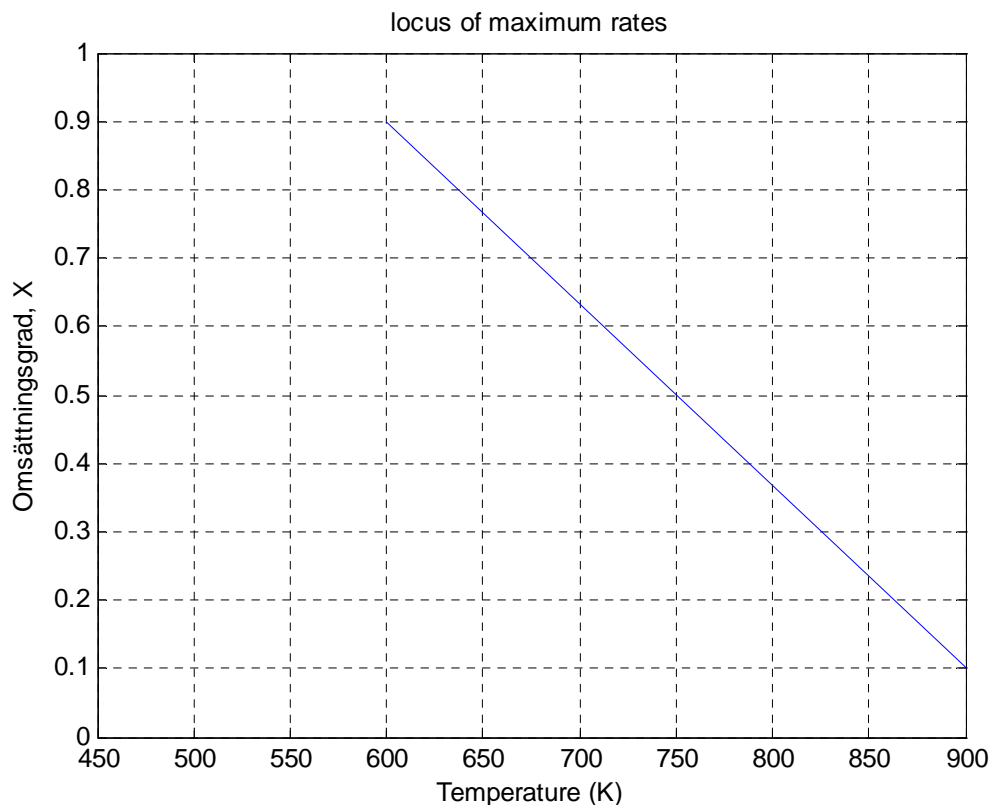
Värmekapaciteten för ämne I:  $71 \text{ J}/(\text{mol K})$

Reaktionsvärmets  $\Delta H = -130 \text{ kJ/mol}$

$C_p$  och  $\Delta H$  kan antas konstant i det givna temperaturintervallet.

Vad blir omsättningsgraden efter den tredje reaktorn?

**Om diagrammet används i lösningen skall det bifogas lösningen och sidnumreras och tentamenskod läggas till!**



Uppgift 4 (6 poäng)

En första ordningens reaktion  $A \rightarrow B$  sker i en tankreaktor. A och B är vätskor och reaktionen sker över sfäriska katalysatorpartiklar (2 mm i radie). Det yttre mass-transportmotståndet tros vara viktigt, men det inre motståndet kan försummas. Hur stor katalysatormassa behövs?

Inflödet består av  $200 \text{ mol/m}^3$  A och resten inert, med det totala flödet är  $0.003 \text{ m}^3/\text{s}$ . Omsättningsgraden är 70%.

$$k = 4.28 \times 10^{-2} \text{ m}^3/(\text{s kg katalysator})$$

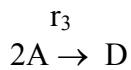
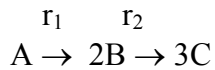
$$Sh = 3 \text{ (för betingelserna i reaktorn)}$$

$$D = 1 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$$

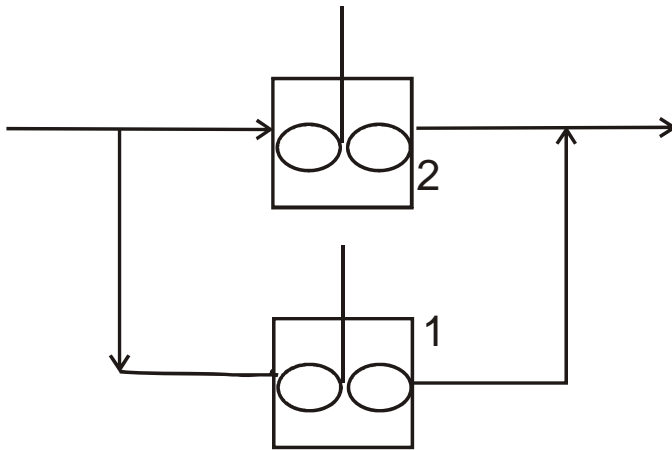
$$\rho_p = 3500 \text{ kg/m}^3 \text{ (katalysatorpartikelns densitet)}$$

## Uppgift 5 (6 poäng)

I en process reagerar ämnet A och bildar både ämne B och D i en parallell reaktion. Vidare reagerar ämne B vidare till ämne C enligt:



Ämne B är den önskade produkten. Reaktionerna sker i två parallellkopplad tankar. Alla reaktionerna är av första ordningen och ämnena är i vätskefas. 30 % av flödet går via tank 1.



Vilken är omsättningsgraden av A ut från hela systemet? Hur stor andel av A in till systemet har bildat B?

Data

Hastigetskonstanten , $k_1$	$0.5 \text{ s}^{-1}$
Hastigetskonstanten , $k_2$	$0.08 \text{ s}^{-1}$
Hastigetskonstanten , $k_3$	$0.1 \text{ s}^{-1}$
Volym, tank 1, $V_{\text{tank, 1}}$	$0.3 \text{ m}^3$
Volym, tank 2, $V_{\text{tank, 2}}$	$0.6 \text{ m}^3$
Molflöde A i inflödet till hela systemet, $F_{Af}$	$20 \text{ mol/s}$
Flöde i inflödet till hela systemet, $q$	$0.05 \text{ m}^3/\text{s}$

Tenta 2010-08-18

⑦

$$2. a) \frac{\sigma^2}{\tau^2} = \frac{2}{Pe} - \frac{2}{Pe^2} (1 - \exp(-Pe)) \quad (7)$$

$$\tau = \int_0^{\infty} t E(t) dt = \int_0^{\infty} t \cdot \frac{C(t)}{\int_0^{\infty} C(t) dt} dt$$

$$\int_0^{\infty} C(t) dt = 98,5$$

$$\tau = 7,1 s$$

$$\sigma^2 = \int_0^{\infty} (t - \tau)^2 E(t) dt = 5,88$$

$$\frac{\sigma^2}{\tau^2} = 0,12 \quad (7) \Rightarrow Pe = 16,1$$

$$Pe = \frac{UL}{D}$$

$$D = \frac{UL}{Pe}$$

$$q = U \cdot A = U \cdot \frac{\pi d^2}{4}$$

$$U = \frac{q}{\frac{\pi d^2}{4}} = 0,0064 m/s$$

$\frac{3 \cdot 10^{-3}}{60} = 5,0 \cdot 10^{-5} m^3/s$

$$D = \frac{0,0064 \cdot 0,3}{16,1} = \underline{\underline{1,19 \cdot 10^{-4} m^2/s}}$$

b) Tankserie

(2)

$$n = \frac{\sigma^2}{\delta^2} = \frac{1}{0,12} = \underline{\underline{9}}$$

---



### 3. Värmebalans

(3)

$$\sum F_{if} \int_{T_{ref}}^{T_{if}} c_{pi} dT - \sum F_i \int_{T_{ref}}^{T_i} c_{pi} dT +$$

$$+ F_{Af} x_A (-\Delta M) = 0$$

$$T_{ref} = T_1$$

$$\begin{aligned} F_{if} &= 2,5 \text{ mol/s} \\ 0,75 \cdot F_f &= 2,5 \Rightarrow \\ F_f &= 3,33 \text{ mol/s} \\ F_{Af} &= 0,25 \cdot F_f = 0,83 \text{ mol/s} \end{aligned}$$

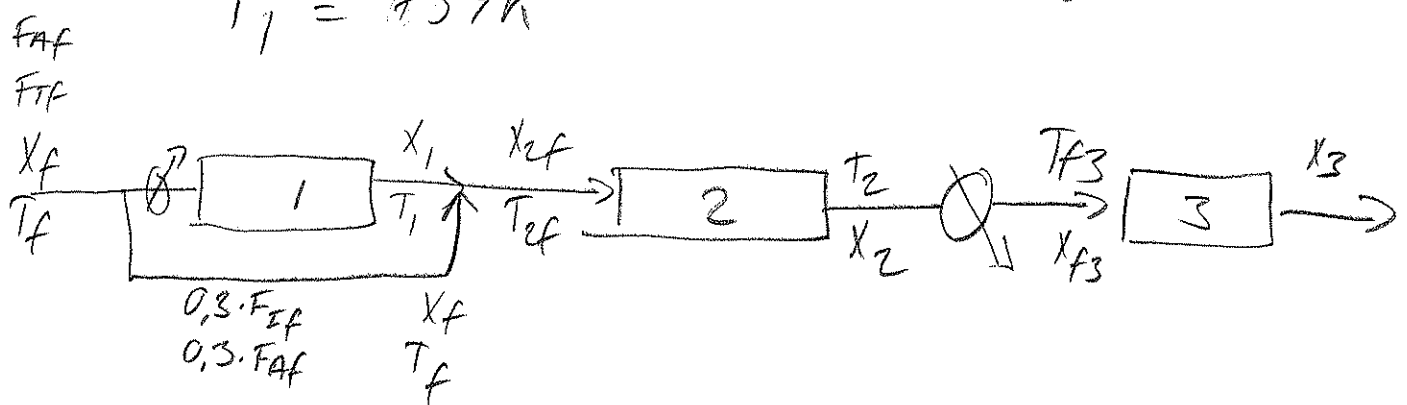
$$\sum F_{if} c_{pi} (T_{if} - T_1) + F_{Af} x_A (-\Delta M) = 0$$

$$x_A = \frac{\sum F_{if} c_{pi} (T_1 - T_{if})}{\alpha F_{Af} \cdot (-\Delta M)}$$

$\alpha = 0,3$   
(1- $\alpha$ ) förkortas bort

$$\Rightarrow x_1 = 0,38 \quad \text{gradvis lösning}$$

$$T_1 = 754 \text{ K}$$



Blandningspunkt:

$$0,3 F_{Af} + 0,7 \cdot F_{Af} \cdot (1 - x_1) = F_{Af} \cdot (1 - x_{2f})$$

$$1 - x_{2f} = 0,3 + 0,7(1 - x_1)$$

$$x_{2f} = 1 - (0,3 + 0,7(1 - x_1)) = \underline{\underline{0,266}}$$

VB:

(3)

$$\sum F_{i1} \cdot c_{p,i} \cdot (T_1 - T_{ref}) + \sum_{O3} F_{i2} \cdot c_{p,i} \cdot (T_2 - T_{ref}) =$$
$$= \sum F_{2if} \cdot c_{p,i} \cdot (T_2 - T_{ref})$$

$$T_{ref} = T_1$$

$$\sum_{O3} F_{i2} \cdot c_{p,i} \cdot (T_2 - T_1) = \sum F_{2if} \cdot c_{p,i} \cdot (T_{2f} - T_1)$$

$$F_{2AF} = F_{AF} \cdot (1 - X_{2f}) = 0,61$$

$$F_{2BF} = F_{AF} \cdot X_{2f} = 0,22$$

$$F_{2IF} = F_{IF} = 2,5$$

$$T_{2f} - T_1 = -89,2$$

$$T_{2f} = -89,2 + 754 = \underline{\underline{665 \text{ K}}}$$

Reaktor 2:

$$T_{ref} = T_2 \quad (\text{UT termen} = 0)$$

$$\sum F_{2fi} \cdot c_{p,i} \cdot (T_{2f} - T_2) + F_{AF} \cdot (X_2 - X_{2f}) \cdot (-\Delta H) = 0$$

$$X_2 - X_{2f} = \frac{-\sum F_{2fi} \cdot c_{p,i} \cdot (T_{2f} - T_2)}{F_{AF} \cdot (-\Delta H)}$$

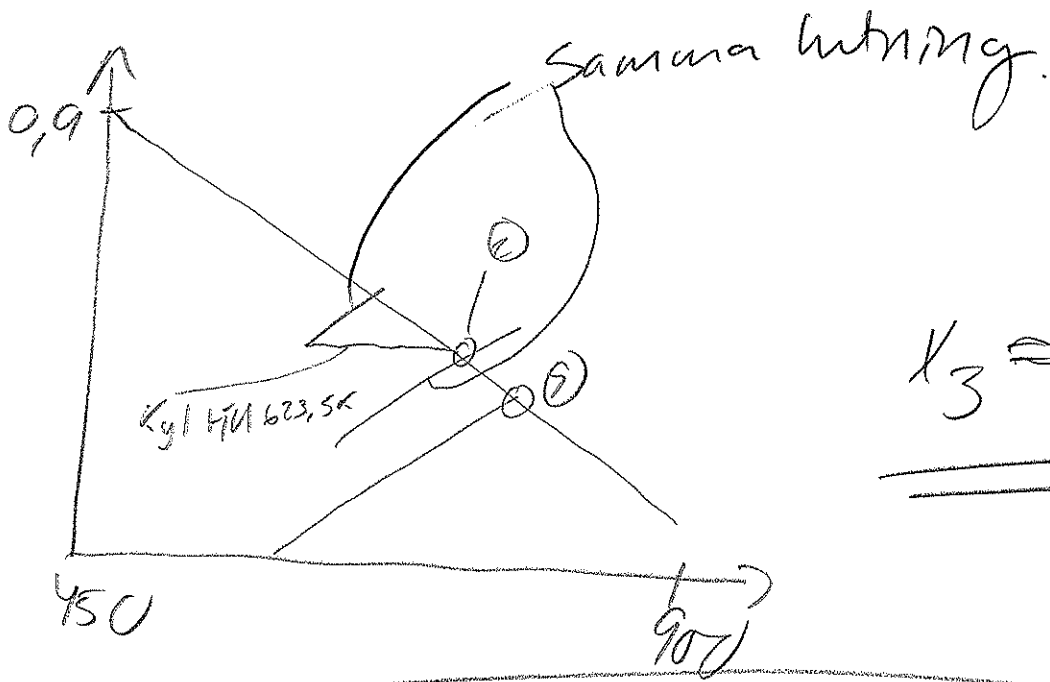
$$X_2 = X_{2f} + \frac{\sum F_{2fi} \cdot c_{p,i} \cdot (T_{2f} - T_2)}{F_{AF} \cdot (-\Delta H)}$$

(5)

$$x_2 = 0,41$$

$$T_2 = 728K$$

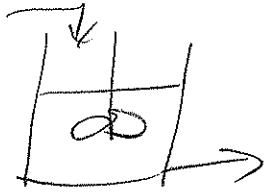
$$K_{gl} \text{ H}_2\text{O } 623,15K$$



$$\underline{\underline{x_3 \approx 0,52}}$$



(6)



$$MB: \quad q \cdot C_{AF} - q \cdot C_{AB} - k \cdot C_{AS} \cdot W = 0$$

Filmmodell:

$$Sh = \frac{k_c \cdot d_p}{D_A}$$

$$k_c = \frac{Sh \cdot D_A}{d_p} = 0,0075 \text{ m/s}$$

$$a_c \cdot k_c \cdot (C_{AB} - C_{AS}) = k \cdot C_{AS}$$

$$\frac{\text{m}^2}{\text{kg}} \cdot \frac{\text{m}}{\text{s}} \cdot \frac{\text{mol}}{\text{m}^3} = \frac{\text{mol}}{\text{s} \cdot \text{kg}} \quad \frac{\text{m}^3}{\text{s} \cdot \text{kg} \cdot \text{m}^3} \cdot \frac{\text{mol}}{\text{m}^3} = \frac{\text{mol}}{\text{s} \cdot \text{kg} \cdot \text{m}^3}$$

$$a_c = \frac{6}{d_p} = 0,4286$$

$$a_c k_c C_{AB} - a_c k_c C_{AS} = k C_{AS}$$

$$C_{AS} (k + k_c a_c) = k_c a_c \cdot C_{AB}$$

$$C_{AS} = \frac{k_c a_c C_{AB}}{k + k_c a_c}$$

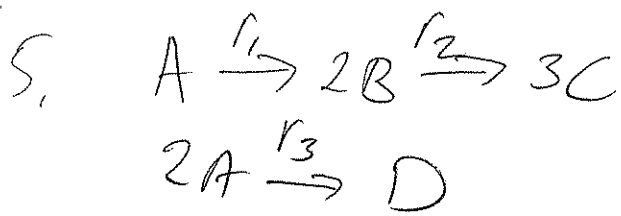
7

$$q_{CAF} - q_{CAB} - \underbrace{k \cdot \frac{k_c a_c C_{AB}}{k + k_c \cdot a_c}}_{\text{term 1}} \cdot W = 0$$

$$\text{term 1} = q_{CAF} - q_{CAB} = q_{CAF} - q \cdot C_{AF}(1-x) = 0,42$$

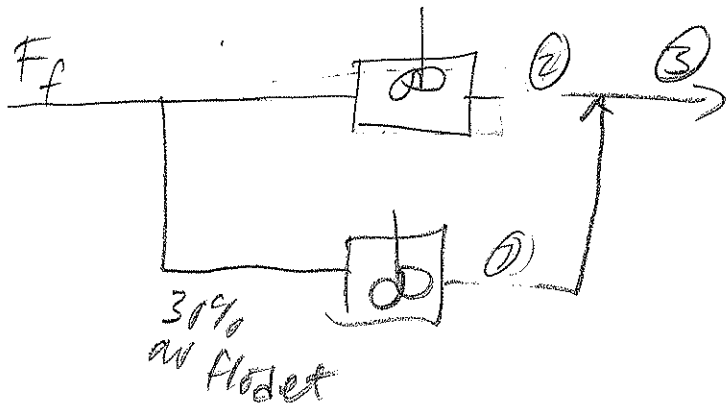
$$W = \frac{\text{term 1}}{\left( k \cdot \frac{k_c a_c \cdot C_{AF}(1-x)}{k + k_c \cdot a_c} \right)} = \underline{\underline{2,34 \text{ kg}}}$$

---



(8)

B onskad produkt



$$F_{Af} = q \cdot C_{Af}$$

$$C_{Af} = \frac{F_{Af}}{q} = 400 \text{ mol/m}^3$$

Tank 1.

$$\text{MB: } q \cdot C_{Af} \cdot 0,3 - 0,3 \cdot q \cdot C_{A1} - k_1 \cdot C_{A1} V_{\text{tank}} -$$

$$- 2k_3 \cdot C_{A1} V_{\text{tank},1} = 0$$

$$0,3 q C_{Af} = C_{A1} (0,3 q + k_1 \cdot V_{\text{tank}} + 2k_3 V_{\text{tank},1})$$

$$C_{A1} = \frac{0,3 \cdot q C_{Af}}{(0,3 q + k_1 V_{\text{tank},1} + 2k_3 \cdot V_{\text{tank},1})} = \underline{\underline{26,7 \text{ mol/m}^3}}$$

MB map B:

$$0 - 0,3 q C_{B1} + 2k_1 C_{A1} V_{\text{tank},1} - 2k_2 \cdot C_{B1} V_{\text{tank},1} = 0$$

$$2k_2 C_{B1} V_{\text{tank},1} + 0,3 q C_{B1} = 2k_1 C_{A1} V_{\text{tank},1}$$

$$C_{B1} (2k_2 V_{\text{tank},1} + 0,3 q) = 2k_1 C_{A1} V_{\text{tank},1}$$

(9)

$$C_{B1} = \frac{2k_1 \cdot C_{A1} \cdot V_{\text{tank},1}}{2k_2 \cdot V_{\text{tank},1} + 0,3q} = \underline{127 \text{ mol/m}^3}$$

Tank 2:

$$C_{A2} = \frac{0,7q \cdot C_{AF}}{0,7q + k_1 \cdot V_{\text{tank},2} + 2k_3 \cdot V_{\text{tank},2}} = \underline{31 \text{ mol/m}^3}$$

$$C_{B2} = \frac{2k_1 \cdot C_{A2} \cdot V_{\text{tank},2}}{2k_2 \cdot V_{\text{tank},2} + 0,7q} = \underline{141 \text{ mol/m}^3}$$

Blandningspunkt:

A:  $0,3 \cdot q \cdot C_{A1} + 0,7q \cdot C_{A2} = F_{A3}$

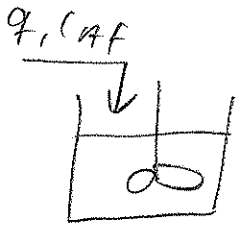
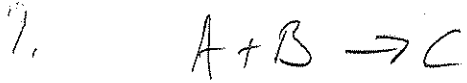
$$F_{A3} = 1,48 \text{ mol/s}$$

B:  $0,3 \cdot q \cdot C_{B1} + 0,7q \cdot C_{B2} = F_{B3} = 6,9 \text{ mol/s}$

$$X = 1 - \frac{F_{A3}}{F_{AF}} = 1 - \frac{F_{A3}}{q \cdot C_{AF}} = \underline{\underline{0,93}}$$

$$\text{Andel B} = \frac{F_{B3}}{F_{AF}} = \frac{F_{B3}}{q \cdot C_{AF}} = \underline{\underline{0,34}}$$

Tenta 2010-08-18



$$r = k \cdot C_A$$

$$k = A \cdot e^{-E_A/RT}$$

(1)

$$q \cdot C_{Af} - 0 - k \cdot C_A \cdot V(t) = \frac{dN_A}{dt} \quad (7)$$

In ut reaction Ackumulation

$$N_A = C_A \cdot V$$

$$\frac{dN_A}{dt} = V \cdot \frac{dC_A}{dt} + C_A \cdot \frac{dV}{dt} \quad (2)$$

↑  
q

$$V = V_0 + q t \quad (3)$$

$$(2) + (3) : \frac{dN_A}{dt} = (V_0 + q t) \frac{dC_A}{dt} + C_A \cdot q$$

$$(2) + (3) + (1) : q C_{Af} - A \cdot e^{-E_A/RT(t)} \cdot C_A \cdot (V_0 + q t) =$$

$$= (V_0 + q t) \frac{dC_A}{dt} + C_A \cdot q \quad (4)$$

Temp. ändras med tiden. Möjligt ha en  
VB.



$$\sum_j F_{j0} \cdot c_{pj} \cdot (T_m - T_{ref}) - 0 + k \cdot C_A \cdot V (-\Delta H) = \quad (2)$$

$\downarrow A \cdot e^{-E_A/RT}$

$$= \sum N_i c_{pi} \frac{dT}{dt}$$

Välj  $T_{ref} = T_m \quad \dot{m} = 0$

$$A \cdot e^{-E_A/RT} \cdot C_A \cdot (V_0 + qt) \cdot (-\Delta H) =$$

$$= \frac{dT}{dt} (N_A c_{pA} + N_B c_{pB} + N_C c_{pC} + N_I c_{pI}) =$$

$$= \frac{dT}{dt} \underbrace{(V_0 + qt)}_V (C_A c_{pA} + C_B c_{pB} + C_C c_{pC} + \dots) \quad (5)$$

Måste ha MB för ämne B, C och också.

$$C_B = C_{B0} \quad (6) \text{ (start överskott)}$$

MB C:  $0 - 0 + k C_A \cdot V = \frac{dN_C}{dt}$

$\downarrow \quad \downarrow$   
 $\dot{m} \quad \dot{m}$

$$A \cdot e^{-E_A/RT} \cdot C_A \cdot (V_0 + qt) = V \cdot \frac{dC_C}{dt} + C_C \cdot \frac{dV}{dt} =$$

$$= (V_0 + qt) \cdot \frac{dC_C}{dt} + C_C \cdot q \quad (7)$$

(4), (5), (6), (7) för att lösa  $C_A, C_B, C_C$ , och temp.