

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

Onsdagen den 17 augusti 2011 kl 8:30-13:30 i V

Examinator: Docent Louise Olsson

Louise Olsson (031-772 4390) kommer att besöka tentamenslokalen på förmiddagen.

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

Betygskala:

Poäng	Betyg
15-19.5	3
20-24.5	4
25-30	5



Uppgift 1 (6 poäng)

I en oideal reaktor utfördes följande spårämnesförsök:

t (min)	c(t) (mol/m ³)
0	0
1	5
4	9
7	11
9	7
11	3
14	1

Vätskefasreaktionen sker på sfäriska katalysatorpartiklar (diameter $50 \cdot 10^{-6} \text{m}$), där den inre mass-transportmotståndet är viktigt. Reaktionen är av första ordningen. Vad är omsättningsgraden ut från reaktorn.

Följande data gäller:

Hastighetskonstanten, k	0.50 min^{-1}
Koncentration av A i inflöde, c_{Af}	300 mol/m^3
Effektiva diffusiviteten	$2 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$

Uppgift 2 (7 poäng)

En första ordningens reaktion sker i gasfas, där $A \Rightarrow B$. Reaktionen sker i en tubreaktor, där det katalytiska materialet finns belagt på väggen, och det yttre mass-transportmotståndet är viktigt. Vilken katalysatormassa behövs för att uppnå omsättningsgraden 90% ut från reaktorn?

Följande data gäller:

Hastighetskonstanten	$0.040 \text{ m}^3 / (\text{s kg katalysator})$
Koncentration av A i inflöde	350 mol/m^3
Masstransport koeff.	$0.3 \text{ m}^3 / (\text{s kg katalysator})$
Tubens diameter	4 cm
Tubens längd	60 cm
Flöde	3000 ml/min

Uppgift 3 (6 poäng)

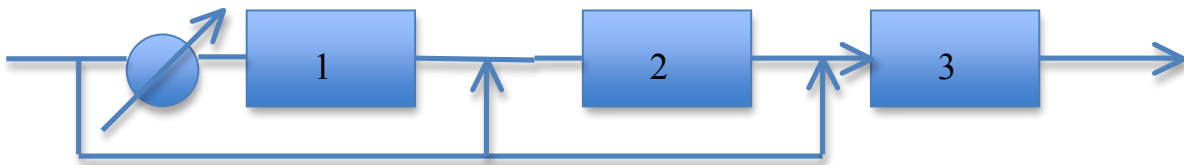
En semisatsreaktor används för att producera produkten P.
Reaktionerna som sker är enligt nedanstående:



Ta fram ekvationer och beskriv i detalj hur du skall göra för att bestämma hur lång tid reaktorn skall köras för att optimera produktionen av P. Vid tiden $t=0$ börjar A och B hällas i reaktorn. Temperaturen är konstant vid $T=T_{\text{reak}}$.

Uppgift 4 (7 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 och tredje reaktorn införs cold-shot, se bilden nedan. Nedan är också locus of maximum rates kurvan utritad. Temperaturen på vätskeinflödet är 180°C . Detta flöde värms till 320°C in till första reaktorn. Inflödet består av 35% A och 65% inert material, I. Inflödet av det inerta materialet är 3.5 mol/s till hela systemet. 50% av flödet förs förbi reaktor 1. Detta flöde delar sedan upp sig i 2 lika delar, där en av delarna går in i reaktor 2 och den andra delen in i reaktor 3. Vad blir omsättningsgraden ut ur den 3:e reaktorn?



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

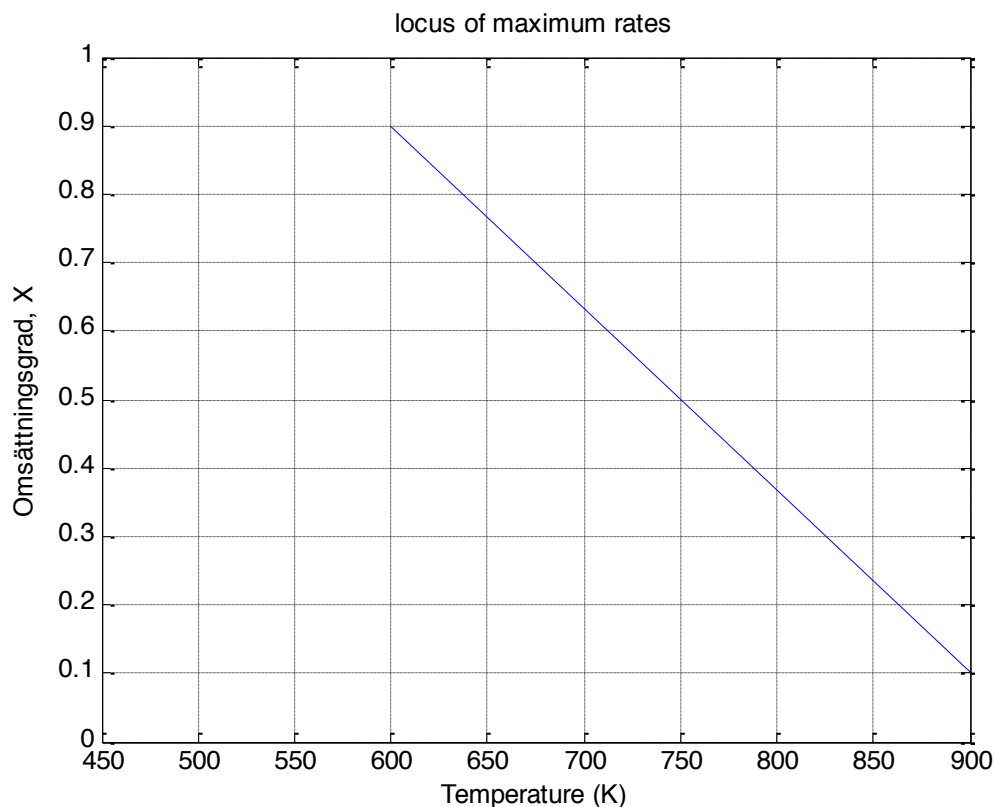
Värmekapaciteten för ämne B: $83 \text{ J}/(\text{mol K})$

Värmekapaciteten för ämne I: $72 \text{ J}/(\text{mol K})$

Reaktionsvärmets $\Delta H = -140 \text{ kJ/mol}$

C_p och ΔH kan antas konstant i det givna temperaturintervallet.

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



Uppgift 5 (4 poäng)

Reaktionen $A \rightarrow B$, $r = kc_A^2$, sker i en reaktorkombination (en eller flera reaktorer). Vilken/vilka reaktorkombination/er skall du välja för att minimera den totala reaktorvolymen om reaktionen är:

- a) Endoterm
- b) Exoterm

Motivera tydligt. Förtydliga gärna med grafiska illustrationer.

KKR100, 2011-08-17

7. Segregationsmodellen

$$\bar{x} = \int_0^{\infty} x(t) E(t) dt$$

$$E(t) = \frac{c(t)}{\int_0^{\infty} c(t) dt}$$

$$N_{A0} \frac{dx}{dt} = \eta k N_{A0} (1-x)$$

$$\frac{dx}{dt} = k\eta(1-x)$$

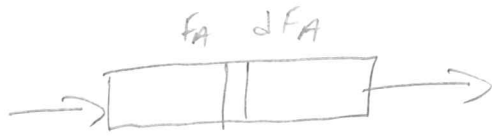
$$x(t) = 1 - e^{-\eta k t}$$

$$\bar{x} = \int_0^{\infty} (1 - e^{-\eta k t}) \cdot \frac{c(t)}{\int_0^{\infty} c(t) dt} dt = \underline{\underline{0,85}}$$

$$\theta = r_p \sqrt{\frac{k}{D_{eff}}} = 1,614$$

$$\eta = \frac{3}{\theta} \left(\frac{1}{\tanh \theta} - \frac{1}{\theta} \right) = 0,86$$

2.



$$\alpha = 0,9$$

A → B

Sökt: W

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

$$\text{MB: } F_A - (F_A + dF_A) - k_c \cdot C_{A,S} \cdot dW = 0$$

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

$$-dF_A = k_c C_{A,S} dW$$

Ingen motståndning: $F_A = q \cdot C_A$ $dF_A = q dC_A$

↑ konst.

$$\textcircled{1} -q dC_A = k_c C_{A,S} dW$$

$$k_c (C_{A,B} - C_{A,S}) = k_c \cdot C_{A,S}$$

← samma enhet

$$k_c C_{A,B} - k_c \cdot C_{A,S} = k_c C_{A,S}$$

$$C_{A,S} (k_c + k_c) = k_c C_{A,B}$$

$$\textcircled{2} C_{A,S} = \frac{k_c}{k_c + k_c} \cdot C_{A,B}$$

$$\textcircled{1} + \textcircled{2}: -q dC_A = k_c \cdot \frac{k_c}{k_c + k_c} \cdot C_{A,B} \cdot dW$$

$$-q \frac{dC_A}{C_A} = \alpha \cdot dW$$

$$-q \int_{C_{A,F}}^{C_{A,W}} \frac{dC_A}{C_A} = \alpha \int_0^W dW$$

$$\alpha = 0,0353$$

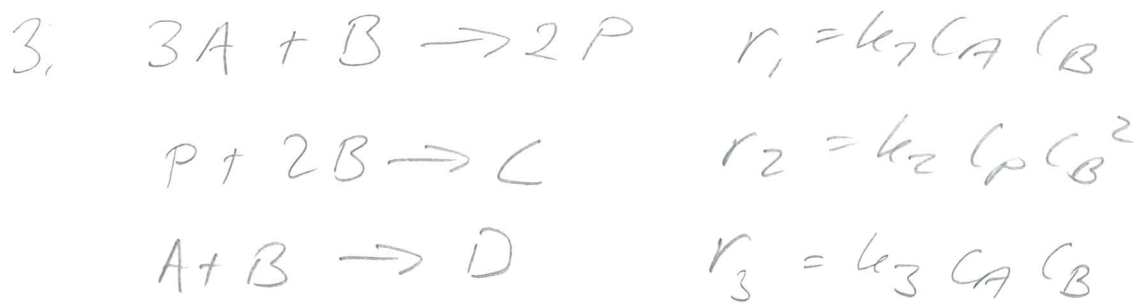
$$-g \left[\ln C_A \right]_{C_{AF}}^{C_{A,wt}} = \alpha \cdot W$$

$$-g \cdot \ln \frac{C_{A,wt}}{C_{AF}} = \alpha \cdot W$$

$$C_{A,wt} = C_{AF} (1-x)$$

$$-g \ln(1-x) = \alpha \cdot W$$

$$W = -\frac{g}{\alpha} \cdot \ln(1-x) = 0,0033 \text{ kg} = 3,3 \text{ g}$$



Fyllning: $V = V_0 + q t = q t$

MB A: $q C_{Af} - 0 - 3r_1 \cdot V(t) - r_3 \cdot V(t) = \frac{dN_A}{dt}$

$$\frac{dN_A}{dt} = \frac{d(C_A \cdot V)}{dt} = \frac{dC_A}{dt} \cdot V + \underbrace{\frac{dV}{dt}}_q \cdot C_A$$

$$(1) \quad q C_{Af} + (-3r_1 - r_3) \cdot (V_0 + q t) = \frac{dC_A}{dt} (V_0 + q t) + q \cdot C_A$$

$$(2) \quad q C_{Bf} + (-r_1 - 2r_2 - r_3) \cdot (V_0 + q t) = \frac{dC_B}{dt} (V_0 + q t) + q \cdot C_B$$

$$(3) \quad (2r_1 - r_2) \cdot (q t) = \frac{dC_P}{dt} (q \cdot t) + q \cdot C_P$$

3 ekv. Sobekanta (C_A, C_B, C_P) . Integrera från

$C_{A,i}$ till $C_{A,full}$, 0 till t_{full}

$C_{B,i}$ till $C_{B,full}$ - " -

$C_{P,i} = 0$ $C_{P,full}$ - " -

$$\text{Där } t_{\text{full}} = \frac{V_{\text{full}}}{q}$$

Från t_{full} till t .

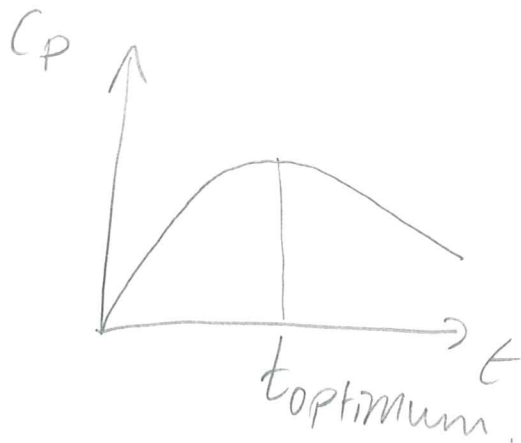
Inflödet 0.

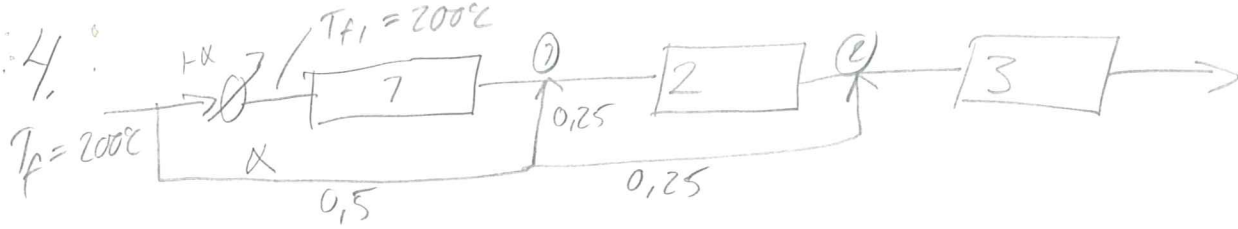
$$(4) (-3r_1, -r_3) \cdot V_{\text{full}} = V_{\text{full}} \cdot \frac{dC_A}{dt}$$

$$(5) (-r_1, -r_3) \cdot V_{\text{full}} = V_{\text{full}} \cdot \frac{dC_B}{dt}$$

$$(6) (2r_1, -r_2) \cdot V_{\text{full}} = V_{\text{full}} \frac{dC_P}{dt}$$

Plotta $C_P(t)$ och läs av maximum.





35% A, 65% I

$$F_{I,f} = 3,5 \text{ mol/s}$$

$$F_{I,f} = 0,65 \cdot F_{\text{tot},f} \Rightarrow F_{\text{tot},f} = \frac{3,5}{0,65} =$$

$$F_{A,f} = 0,35 \cdot F_{\text{tot},f} =$$

$$\sum (1-\alpha) F_{i,f} \int_{T_{ref}}^{T_1} c_{p,i} dT - \sum (1-\alpha) \cdot F_{i,e} \int_{T_{ref}}^{T_1} c_{p,i} dT +$$

$$+ (1-\alpha) \cdot F_{A,f} \cdot X_A (-\Delta H) = 0$$

$$T_{ref} = T_1 \rightarrow$$

$$X_A = \frac{\sum F_{i,f} \cdot c_{p,i} (T_1 - T_{1,f})}{F_{A,f} (-\Delta H)}$$

lös av skärning med locus of max. rates

$$\begin{cases} T_1 = 816 \text{ K} \\ X_1 = 0,32 \end{cases}$$

Blandningspunkt ⑦:

$$0,25 \cdot F_{A,f} + 0,5 \cdot F_{A,f} (1 - X_1) = 0,75 \cdot F_{A,f} (1 - X_{2f})$$

$$\underline{\underline{X_{2f} = 0,21}}$$

$$\underline{VB:} \quad \overbrace{\sum 0,25 \cdot F_f \cdot C_p \cdot (T_f - T_1)}^{\text{term 1}} = \overbrace{\sum 0,75 \cdot F_{2,if} \cdot C_{pf} \cdot (T_2 - T_1)}^{\text{term 2}}$$

\uparrow
 $T_{ref} = T_1 \rightarrow$ term at train reactor forsummer

$$F_{2Af} = F_{Af} \cdot 0,75 \cdot (1 - 0,19) = 1,14$$

$$F_{2Bf} = F_{Af} \cdot 0,75 \cdot 0,19 = 0,30$$

$$F_{2If} = 0,75 \cdot F_{If} = 2,625$$

$$\text{term 1} = -3,50 \cdot 10^4$$

$$\text{term 2} = 293,0$$

$$T_2 - T_1 = \frac{\text{term 1}}{\text{term 2}}$$

$$T_2 = \underline{\underline{696,5K}}$$

Reaktor 2:

$$X_2 = X_{A2f} + \frac{\sum F_{2f} C_p \cdot (T_2 - T_{2f})}{F_{Af} (-\Delta H)}$$

Graphische Lösung. ger: $\begin{cases} X_2 = 0,34 \\ T_2 = 810K \end{cases}$

Bl. punkt 2:

$$0,25 \cdot F_{Af} + 0,75 \cdot F_{Af} (1 - X_2) = F_{Af} (1 - X_{3f})$$

$$\Rightarrow X_{3f} = 0,255$$

$$F_{A3f} = 1,40$$

$$F_{B3f} = 0,48$$

$$F_{I3f} = F_{If} = 3,5$$

UB: $T_{ref} = T_2 \Rightarrow$ term ut från ② försummar

$$\underbrace{\sum 0,25 \cdot F_f \cdot C_p (T_f - T_7)}_{\text{term 1}} = \underbrace{\sum F_{3,f} \cdot C_{p,i} (T_{3f} - T_2)}_{\text{term 2}}$$

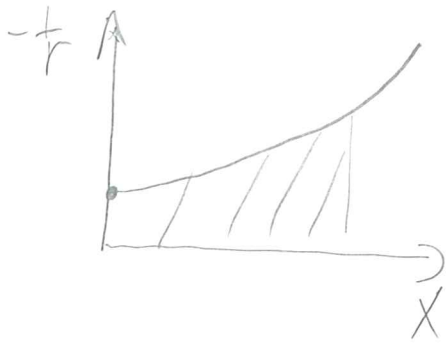
$$T_{3f} = 720,6K$$

Reaktor 3:

På samma sätt som ovan \Rightarrow

$$\underline{\underline{X_3 = 0,39}}$$

5. $r = k C_A^2 = k C_{Af}^2 (1-x)^2$



$\frac{1}{r} = \text{konst.} \frac{1}{(1-x)^2}$

Vid isoterm tub bäst för minst area.

a) Endoterm



tanke ej bra för lag temp



tub tub, bättre, för hög temp i början i alla fall. Alltså tub eller sats bäst.

b) Exoterm



tanke har bättre tempprofil än tub, för hög temp hela tiden



det för lång tanke vara bättre än tuben trots samma konc. potsl.