

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

Onsdag den 22 augusti 2012 kl 8:30-13:30 i V

Examinator: Bitr. Prof. Louise Olsson

Louise Olsson (031-722 4390) kommer att besöka tentamenslokalen på förmiddagen.
Granskning av tentamensrättningen kan ske tidigast den 10 september 2012.

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 reaktor är den initiala temperaturen 80°C . Volymen av reaktorn är 1.7m^3 . Lösningsmedel av temperaturen 10°C börjar då hållas i reaktorn (inget utflöde). Lösningsmedlet reagerar ej. Flödet av lösningsmedel är $0.004\text{m}^3/\text{min}$. Vad är temperaturen i reaktorn efter 5 minuter?

Indata:

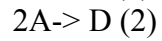
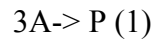
Densitet för lösning och lösningsmedel, oberoende av temp. och konc.: $\rho=1000\text{ kg/m}^3$

Värmekapacitet för lösning och lösningsmedel, oberoende av temp. och konc: $3.8\text{ KJ}/(\text{kg K})$

Värme för utspädning per volym lösningsmedel: $\Delta H_{\text{dilution}}=-4\cdot 10^4\text{ kJ/m}^3$

Uppgift 2 (5 poäng)

A kan reagera och bilda P eller D enligt följande reaktioner



Reaktionsordningen för den första reaktionen är tredje ordningen mot A och för den andra reaktionen är den andra ordningen. Aktiveringsenergien för de två reaktionerna är $E_1=83\text{kJ/mol}$ och $E_2=102\text{kJ/mol}$.

Den önskade produkten är P.

- a) vilken reaktortyp bör du välja?
- b) Vilka driftbetingelser bör du välja?

Uppgift 3 (7 poäng)

I en anläggning har man en ickeideal reaktor som karakteriseras med följande spårämnesförsök

Tid (min)	Spårämneskoncentration (g/cm ³)
0	0
1	3
3	6
5	12
7	12
9	8
11	4

I reaktorn sker reaktionen $A \rightarrow R$ som är första ordningens reaktion mot A. Reaktionen sker i vätskefas och hastighetskonstanten är 0.0005 s^{-1} . Flödet är $0.02 \text{ m}^3/\text{min}$.

a) Vad blir omsättningsgraden ut från reaktorn?

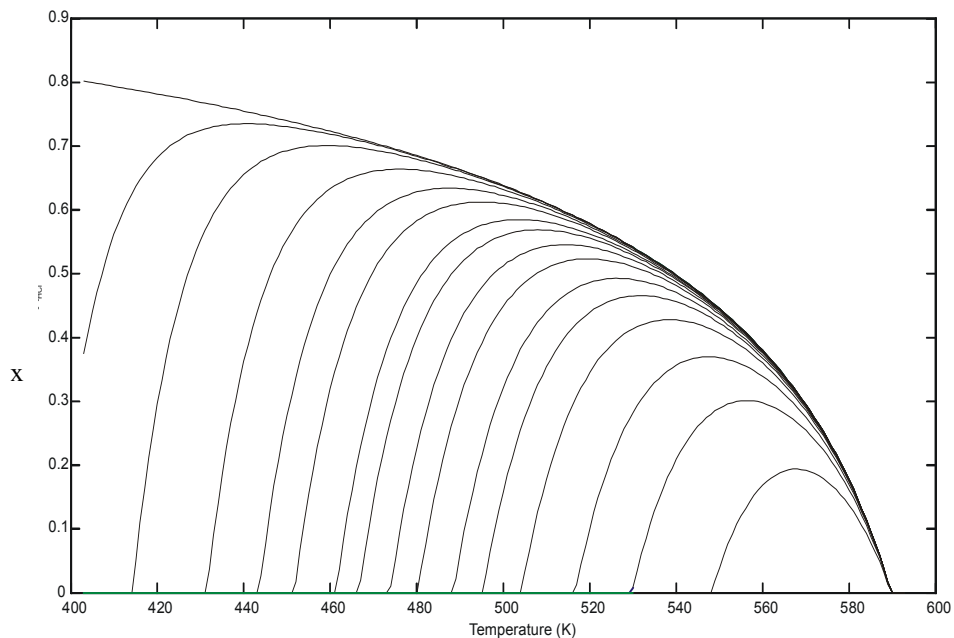
b) För att öka produktiviteten från anläggningen parallellkopplas en tubreaktor. Denna reaktor kan betraktas som ideal och den har dimensionen 60 cm i diameter och 3m lång. Flödet i denna reaktor är $0.03 \text{ m}^3/\text{min}$. Denna reaktor körs vid en högre temperatur varvid k ökar till 0.001 s^{-1} . Vad blir omsättningsgraden ut från **hela** anläggningen?

Uppgift 4 (6 poäng)

Om denna sida används i svaren lägg med den med sidnummer och tentamenskod.

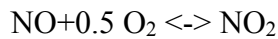
Nedanstående är ett X-T diagram för en reaktion.

- Markera locus of maximum rates i diagrammet och skriv också upp det matematiska samband som gäller för locus of maximum rates.
- Om mer inert ämne tillsätts hur påverkar det omsättningsgraden? Tydlig motivering med ekvationer krävs.
- Tre tubreaktorer med mellanliggande kylning används. Hur optimeras detta system? Tydlig motivering krävs, gärna med grafisk illustration. Hur skiljer sig detta fallet mot om tre tankreaktorer istället hade använts?
- Du skall designa en anläggning med cold-shot. Diskutera vilka komponenter som skall ingå och hur du väljer processbetingelser.



Uppgift 5 (6 poäng)

NO oxideras på en bilavgaskatalysator enligt



Denna reaktion är en reversibel gasfasreaktion och reaktionsordningarna är enligt de stökiometriska koefficienterna (men alla har positivt tecken). Temperaturen är 350°C och hastighetskonstanterna följer Arrhenius ekvation. Trycket är 1 atmosfär. Reaktionen sker i en tubreaktor, där katalysatorpartiklarna finns i en wash-coat vid ytan av tuben. Det är stort syreöverskott och även kväveöverskott från luften. Yttre mass-transport är viktig

Ytterligare känd indata

Pre-exponentiell faktor för framåt reaktionen

Pre-exponentiell faktor för bakåt reaktionen

Aktiveringsenergin för framåt reaktionen

Aktiveringsenergin för bakåt reaktionen

Vindlingsfaktorn

Pordiamtern

Partikeldiameter

Diffusiviteten i gasbulken

Diametern på tubreaktorn

Porositeten i partikeln

”Constriction” faktor

Sherwoods tal

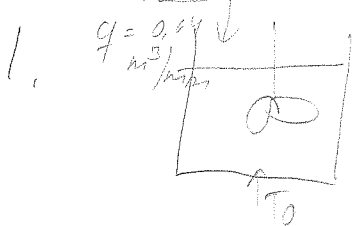
Reaktorvolym

Molflödet av NO, NO₂, O₂ och N₂ in till reaktorn

- a) Molflödet av NO och NO₂ skall bestämmas. Ta fram **alla ekvationer** som krävs och beskriv **lösningsgången i detalj**. Använd given information i uppgiften.
- b) För låga temperaturer kan bakåtreaktionen försummas. Ta fram motsvarande ekvationer, men för detta fall måste hänsyn tas till masstransporten inuti partiklarna. Yttre mass-transport kan försummas. Använd given information i uppgiften. I detta fall är temperaturen T_{low} .

KRT 2012-08-22

$T_f = 10^\circ\text{C}$



Värmebalans

$\frac{\text{m}^3}{\text{s}}$ $\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$ $\frac{\text{kJ}}{\text{kg}\cdot\text{K}}$ $T_{ref} = T$
 \downarrow \downarrow \downarrow \downarrow

$$V \cdot \rho C_p \cdot \frac{dT}{dt} = q \cdot \rho C_p \cdot (T_f - T) + q(-\Delta H_{dilatation})$$

$$\frac{\text{m}^3 \cdot \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \cdot \frac{\text{kJ}}{\text{kg}\cdot\text{K}} \cdot \frac{\text{K}}{\text{s}} = \frac{\text{kJ}}{\text{s}} \quad \ln$$

$$a = q \rho C_p \quad b = q \cdot (-\Delta H_{dilatation})$$

$$V = V_0 + q \cdot t \quad C = V_0 \cdot \rho C_p$$

$$(\rho C_p q t + C) \cdot \frac{dT}{dt} = a(T_f - T) + b$$

$$\frac{dT}{a \cdot T_f - a \cdot T + b} = \frac{dt}{\rho C_p q t + C}$$

$$\int_{T_0}^T \frac{dT}{b + a \cdot T_f - a \cdot T} = \int_0^t \frac{dt}{\rho C_p q t + C}$$

$$C \cdot \left[\ln(b + a \cdot T_f - a \cdot T) \cdot \frac{1}{-a} \right]_{T_0}^T = \ln \left(\frac{\rho C_p q t + C}{C} \right)$$

$$-\frac{a}{C} \cdot \ln \left(\frac{\rho C_p q t + C}{C} \right) = \frac{\ln(b + a \cdot T_f - a \cdot T)}{\ln(b + a \cdot T_f - a \cdot T_0)}$$

form!

$$\ln \left(\frac{b + a \cdot T_f - a \cdot T}{b + a \cdot T_f - a \cdot T_0} \right) = -0,532$$

$$0,587 = \frac{b + a \cdot T_f - a \cdot T}{-54240}$$

$$b + a \cdot T_f - a \cdot T = -54240 \cdot 0,587$$

$$a \cdot T = b + a \cdot T_f + 54240 \cdot 0,587$$

$$T = \frac{b + a \cdot T_f + 54240 \cdot 0,587}{a} = 328,6 \text{ K} = \underline{\underline{55,5^\circ \text{C}}}$$

$$3. \quad E(t) = \frac{C(t)}{\int_0^{\infty} C(t) dt}$$

(7)

$$\int_0^{\infty} C(t) dt = 0,5 \cdot (3 \cdot 1 + 9 \cdot 2 + 18 \cdot 2 + 24 \cdot 2 + 20 \cdot 2 + 12 \cdot 2) =$$

$$= \underline{\underline{84,5}}$$

$$t_m = \int_0^{\infty} t \cdot E(t) dt = 6,11$$

$$\sigma^2 = \int_0^{\infty} (t - t_m)^2 E(t) dt = 6,05$$

$$N = \frac{\tau^2}{\sigma^2} = \frac{6,023^2}{6,39} = \underline{\underline{6 \text{ tanks}}}$$

$$q \cdot C_{A0} - q \cdot C_{A1} - k \cdot C_{A1} \cdot V = 0$$

$$q \cdot C_{A0} = (q + kV) \cdot C_{A1}$$

$$\frac{C_{A1}}{C_{A0}} = \frac{q}{q + kV} = \left\{ \frac{q}{\frac{q}{\text{tonne}} + \frac{1}{\text{tonne}} \cdot 9} \right\} = \underline{\underline{\frac{1}{1 + k\tau}}}$$

Tank 2: $q \cdot C_{A1} - q \cdot C_{A2} - k \cdot C_{A2} \cdot V = 0$

$$\frac{C_{A2}}{C_{A1}} = \frac{1}{1 + k\tau_{\text{tank}}}$$

②

$$\text{Tank 3: } \frac{C_{A3}}{C_{A2}} = \frac{1}{1+k\tau_{\text{tank}}}$$

For 3 tanks

$$\frac{C_{A3}}{C_{A0}} = \frac{C_{A3}}{C_{A2}} \cdot \frac{C_{A2}}{C_{A1}} \cdot \frac{C_{A1}}{C_{A0}} = \left(\frac{1}{1+k\tau_{\text{tank}}} \right) \cdot \left(\frac{1}{1+k\tau_{\text{tank}}} \right) \cdot \left(\frac{1}{1+k\tau_{\text{tank}}} \right)$$

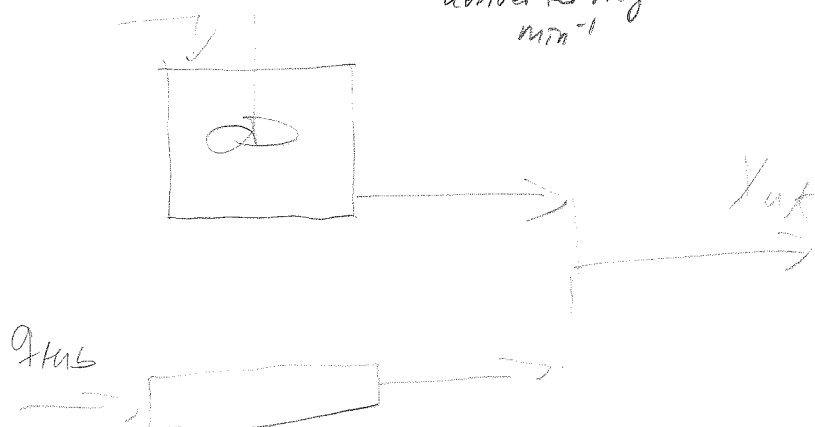
For n tanks

$$\frac{C_{An}}{C_{A0}} = \left(\frac{1}{1+k\tau_{\text{tank}}} \right)^n$$

$$X = 1 - \frac{C_{An}}{C_{A0}} = 1 - \left(\frac{1}{1+k\tau_{\text{tank}}} \right)^n =$$

$$= 1 - \left(\frac{1}{1 + \underset{\substack{\uparrow \\ \text{cm}}}{0,0005} \cdot 60 \cdot \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Umverförmung}}}{6} \cdot 0,05}} \right)^6 = \underline{\underline{0,16}}$$

b/



$$\dot{F}_A - (F_A + dF_A) - k C_A dV = 0$$

$$dF_A = -k C_A dV$$

3

$$F_A = q C_{Af} (1-x)$$

$$dF_A = q C_{Af} (-dx)$$

$$-q C_{Af} dx = -k C_{Af} (1-x) dV$$

$$-q dx = -k (1-x) dV$$

$$q \int_0^{x_{\text{aus}}} \frac{dx}{1-x} = k \cdot V$$

$$-q (\ln(1-x_{\text{aus}})) = k \cdot V$$

$$\ln(1-x_{\text{aus}}) = -\frac{kV}{q} \quad 1-x_{\text{aus}} = \exp\left(-\frac{kV}{q}\right)$$

$$x_{\text{aus}} = 1 - e^{-\frac{kV}{q}} = 0,92$$

2. Landmispunkt

$$q_1 C_{Af} (1-x_1) + q_2 C_{Af} (1-x_2) = q_{\text{total}} C_{Af} (1-x_{\text{out}})$$

$$1-x_{\text{out}} = \frac{1}{q_{\text{total}}} (q_1 (1-x_1) + q_2 (1-x_2))$$

$$x_{\text{out}} = \underline{\underline{0,55}}$$

5. Tubreaktor



$$r_f = k_f \cdot C_{\text{NO}} \cdot C_{\text{O}_2}^{1/2}$$

$$r_b = k_b \cdot C_{\text{NO}_2}$$

$$k = A \cdot e^{-\frac{E}{RT}}$$

Tubreaktor: Molendring

$$F_{\text{NO}} - (F_{\text{NO}} + dF_{\text{NO}}) + (-k_f \cdot C_{\text{NO},s} \cdot C_{\text{O}_2}^{1/2} + k_b \cdot C_{\text{NO}_2,s}) dV = 0$$

↑
konst.

$$-dF_{\text{NO}} = (k_f C_{\text{NO},s} C_{\text{O}_2}^{1/2} - k_b \cdot C_{\text{NO}_2,s}) dV \quad (7)$$

$$C = y \cdot C_{\text{tot}} = y \cdot \frac{P}{RT}$$

$$C_{\text{NO},s} = y_{\text{NO}} \cdot \frac{P}{RT} \quad (2) \quad C_{\text{NO}_2,s} = y_{\text{NO}_2} \cdot \frac{P}{RT} \quad (3)$$

$$y_{\text{NO}} = \frac{F_{\text{NO}}}{F_{\text{tot}}} = \frac{F_{\text{NO}}}{F_{\text{NO}} + F_{\text{NO}_2} + F_{\text{O}_2} + F_{\text{N}_2}} \quad (4)$$

$$y_{\text{NO}_2} = \frac{F_{\text{NO}_2}}{F_{\text{tot}}} \quad (5)$$

↑
↑
↑
konstant
F_{tot}

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

$$k_c \cdot (C_{NO_2,S} - C_{NO_2,s}) = k C_{NO_2,s}$$

$$k_c (C_{NO_2,S} - C_{NO_2,s}) = k C_{NO_2,s} \quad C_{NO_2,S} (k_c + k) = k_c C_{NO_2,s}$$

$$\boxed{C_{NO_2,s} = \frac{k_c}{k_c + k} C_{NO_2,S}}$$

$$C_{NO_2,s} = \frac{k_c}{k_c + k} C_{NO_2,b}$$

$$-dF_{NO} = \left(k_f \cdot \frac{k_c}{k_c + k} \cdot C_{NO,b} \cdot C_{O_2}^{1/2} - \right.$$

$$\left. - k_b \cdot \frac{k_c}{k_c + k} C_{NO_2,b} \right) dV \quad (6)$$

$$-dF_{NO_2} = \left(-k_f \frac{k_c}{k_c + k} C_{NO,b} \cdot C_{O_2}^{1/2} - \right.$$

$$\left. + k_b \cdot \frac{k_c}{k_c + k} C_{NO_2,b} \right) dV \quad (7)$$

① - ⑦ ger F_{NO_2} och F_{NO} .

$$b) \quad -dF_{NO} = \eta k_f C_{NO} \cdot C_{O_2}^{1/2} dV$$

$$F_{NO_2} = F_{NO_2, in} + (F_{NO, in} - F_{NO, out})$$

P.S.S. $C_{NO} = y_{NO} \cdot \frac{P}{RT}$

$$y_{NO} = \dots$$

$$y_{NO_2} = \dots$$

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

$$\theta = r_p \sqrt{\frac{k}{D_{eff}}} \uparrow \frac{d_p}{2}$$

$$D_{eff} = \frac{D_{Knudsen} \cdot \epsilon_p \tau}{\tau}$$

$$D_{Knudsen} = \frac{1}{3} d_{por} \sqrt{\frac{8RT}{\pi M}} \uparrow NO$$
