

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

Tisdag den 18 december 2012 kl 8:30-13:30 i V

Examinator: Bitr. Prof. Louise Olsson

Louise Olsson (031-722 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).

Kinetiken för reaktionen $A \rightarrow B$ studerades i vätskefas en (ideal) tubreaktor.

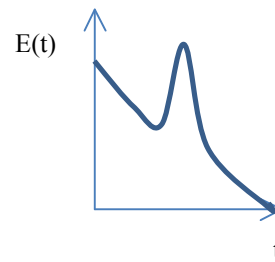
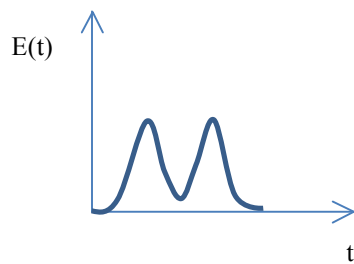
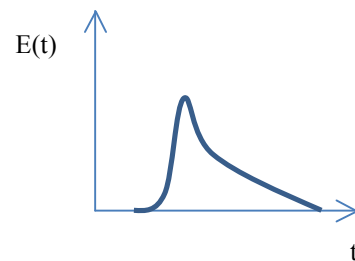
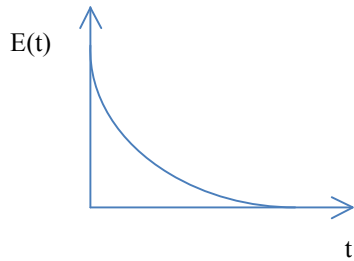
Tube var 2 m lång och hade en diameter av 4 cm. Koncentrationen av A i inflödet var $0,1 \text{ mol/m}^3$.

Flödes hastighet (cm^3/s)	Omsättningsgraden
1	0,04
0,5	0,07
0,2	0,17

- Bestäm reaktionsordning och hastighetskonstant i hastighetsuttrycket $r = k \cdot c_A^\alpha$.
- Vilken typ av reaktor bör man välja för denna reaktion om man vill minimera reaktorvolymen och hur stor volym behövs det för att uppnå 50% omsättning vid ett inflöde av $1 \text{ cm}^3/\text{s}$.

Uppgift 2 (5 poäng).

a. Ange typ av reaktor/reaktorer för följande frekvensfunktioner av uppehållstiden:



- b. Exotermer jämviktsreaktioner utförs ofta i flera seriekopplade tubreaktorer med mellankylning. Varför blir omsättningsgraden högre när man recirkulerar en andel av utflödet från sista reaktorn och blandar in den innan sista mellankylningen?
- c. Industriellt genomförs hydreringen av olja i satsreaktorer. Vilka orsaker kan det finnas till att välja satsreaktorer istället för tubreaktorer?
- d. Interna transportbegränsningar kan orsaka att man mäter en falsk kinetik. Vilka parametrar i Arrheniusekvationen stämmer inte överens med verkligheten och varför?

Uppgift 3 (7 poäng).

Ett företag vill utföra följande reaktioner i vätskefas.

r1: A -> B och

r2: A -> C

De har en oanvänd reaktor och funderar om den är lämplig att använda här. För att karakterisera reaktorn utförs först ett spårämnesförsök. Tabellen nedan visar den uppmätta koncentrationen vid olika tidpunkter.

tid (min)	Koncentration
0	0
3	0
6	9
9	30
12	23
15	18
18	9
21	7
24	6
27	5
30	2
33	0

Den ansvarige ingenjören bestämmer sig att använda sig av tank-serie-modellen för att beräkna den förväntade omsättningsgraden av C_A efter reaktorn. Det yttre mass-transportmotståndet kring katalysatorpartiklarna i reaktorn är viktiga.

Följande uppgifter är givna:

$$C_{A,\text{inflödet}} = 4 \text{ mol/L}$$

$$q = 5 \text{ L/min}$$

$$r_1 = k_1 * c_A \text{ med } k_1 = 1.70 \text{ s}^{-1}$$

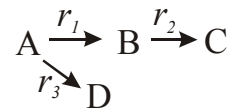
$$r_2 = k_2 \quad \text{med } k_2 = 7.48 \cdot 10^{-04} \text{ mol/s/m}^3$$

$$V = 400 \text{ L}$$

$$kc = 0.251 \text{ m}^3/\text{s}$$

Hur stor är omsättningsgraden X_A efter reaktorn?

Uppgift 4 (6 poäng)



För ovanstående katalytiska schema gäller följande:

	Reaktions- ordning (n)	Aktiveringsenergi, E_a (kJ mol ⁻¹)	Reaktions Entalpi, ΔH_R (kJ mol ⁻¹)
r_1	1	80	-110
r_2	1	120	-140
r_3	0.5	150	-30

- Om den önskade produkten är B vilken reaktor och reaktionsbetingelser bör väljas? Motivera noggrant.
- Om yttre masstransport är signifikant, är det gynnsamt för att producera B? Motivera noggrant.
- Om yttre värmetransport är signifikant, är det gynnsamt för att producera B? Motivera noggrant.

Uppgift 5 (6 poäng)

Produkten R bildas från A och B. Reaktionerna sker i vätskefas.



Processen sker i en satsreaktor vid konstant temperatur (80°C). Vid denna temperatur är hastighetskonstanten; $k_1 = 0.04 \text{ min}^{-1}$. Initial koncentrationerna av A och B är 0.85 kmol m^{-3} av A och 15 kmol m^{-3} av B, men ingen R eller S. Tiden för att tömma och fylla satsreaktorn är 30 min. Produktionshastigheten av R är 80 kg h^{-1} och koncentrationen av R i produkten är 0.5 kmol m^{-3} . Vilken reaktorvolym krävs och vilken tid krävs?

DATA:

Molekylvikt av A och B:

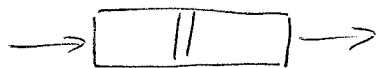
$$M_A = 80 \text{ g mol}^{-1}$$

$$M_B = 18 \text{ g mol}^{-1}$$

Uppgift 1

KK R 100 ¹ , 2012-12-18

$$V = L \cdot A = L \cdot \pi \left(\frac{d}{2}\right)^2 = 2.5 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3$$



NB:

$$F_A - (F_A + dF_A) - r dV = 0$$

$$F_A = q \cdot C_A$$

$$\Rightarrow -q dC_A = r dV$$

antar $r = k \cdot C_A^0$ $\alpha = 0$

$$\Rightarrow -q dC_A = k dV$$

$$-C_A + C_{A,0} = k \cdot V$$

$$X = \frac{C_{A,0} - C_A}{C_{A,0}} = \frac{k \cdot V}{C_{A,0}}$$

$$\Rightarrow k = \frac{X \cdot C_{A,0}}{V}$$

testa för alla 3 försök:

$$k_1 = 1.59 \frac{\text{mol}}{\text{m}^6}$$

$$k_2 = 2.79 \frac{\text{mol}}{\text{m}^6}$$

$$k_3 = 6.76 \frac{\text{mol}}{\text{m}^6}$$

testar $r = k \cdot C_A$ $\alpha = 1$

$$\Rightarrow -q dC_A = k \cdot C_A \cdot dV$$

$$\int_{C_{A,0}}^{C_A} \frac{dC_A}{C_A} = -\frac{k}{q} \int_0^V dV$$

$$\ln \frac{C_A}{C_{A,0}} = -\frac{k}{q} \cdot V$$

$$\ln(1-X) = -\frac{k}{q} \cdot V$$

$$* k = - \frac{\ln(1-x)}{qV} \cdot q \quad \Rightarrow \quad \begin{aligned} k_1 &= 1,64 \cdot 10^{-5} \text{ 1/s} \\ k_2 &= 1,44 \cdot 10^{-5} \text{ 1/s} \\ k_3 &= 1,48 \cdot 10^{-5} \text{ 1/s} \end{aligned}$$

antar $r = k \cdot C_A^2 \quad \alpha = 2$

$$\Rightarrow -q \, dC_A = k \cdot C_A^2 \cdot dV$$

$$\int_{C_{A,0}}^{C_A} \frac{dC_A}{C_A^2} = -\frac{k}{q} \int_0^V dV$$

$$-\left[\frac{1}{C_A} \right]_{C_{A,0}}^{C_A} = -\frac{k}{q} \cdot V$$

$$-\frac{1}{C_A} + \frac{1}{C_{A,0}} = -\frac{k}{q} \cdot V$$

$$1 - \frac{C_A}{C_{A,0}} = +\frac{k}{q} \cdot V \cdot C_A$$

$$x = \frac{k}{q} \cdot V \cdot C_{A,0} \cdot (1-x)$$

$$k = \frac{x \cdot q}{(1-x) \cdot V \cdot C_{A,0}}$$

$$k_1 = 1,66 \cdot 10^{-4} \frac{\text{m}^3}{\text{s} \cdot \text{mol}}$$

$$k_2 = 1,50 \cdot 10^{-4} \text{ — } \text{—}$$

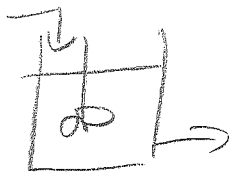
$$k_3 = 1,63 \cdot 10^{-4} \text{ — } \text{—}$$

$\alpha = 2$ passar Säbst, $k = 1,60 \cdot 10^{-4} \frac{\text{m}^3}{\text{s} \cdot \text{mol}}$

6.) $\alpha > 0 \Rightarrow$ tub har minst volym

$$V = \frac{x \cdot q}{(1-x) \cdot k \cdot C_{A,0}} = 0,063 \text{ m}^3$$

3.



$$q C_{A0} - q C_{A1} - k_1 C_{A1,s} \cdot V - k_2 \cdot V_1 = 0$$

$\frac{1}{s} \cdot \frac{\text{mol}}{\text{m}^3} \cdot \text{m}^3$
 $\frac{\text{mol}}{s}$

$$k_c \cdot (C_{A6} - C_{A5}) = k_1 C_{A1,s} \cdot V_1 - k_2 \cdot V_1$$

$\frac{\text{mol}^3}{s} \quad \frac{\text{mol}}{\text{m}^3} = \frac{\text{mol}}{s} \quad \frac{1}{s} \cdot \frac{\text{mol}}{\text{m}^3} \cdot \text{m}^3 = \frac{\text{mol}}{s \cdot \text{m}^3} \cdot \text{m}^3 = \frac{\text{mol}}{s}$

$$C_{A5} (k_1 \cdot V_1 + k_c) = k_c C_{A6} + k_2 \cdot V_1$$

$$C_{A5} = \frac{k_c C_{A6} + k_2 \cdot V_1}{k_1 \cdot V_1 + k_c}$$

$$q C_{A0} - q C_{A1} - k_1 \cdot V_1 \cdot \frac{k_c C_{A1} + k_2 V_1}{k_1 V_1 + k_c} - k_2 V_1 = 0$$

$$q C_{A0} - q C_{A1} - \frac{k_1 \cdot V_1}{k_1 V_1 + k_c} \cdot k_c C_{A1} + \frac{-\alpha k_2 \cdot V_1 - k_2 \cdot V_1}{\beta} = 0$$

$$q C_{A0} - C_{A1} (q + \alpha k_c) + \beta = 0$$

$$C_{A1} (q + \alpha k_c) = q C_{A0} + \beta$$

$$C_{A1} = \frac{q C_{A0} + \beta}{q + \alpha k_c}$$

Antal tankar

$$\int_0^{\infty} C(t) dt = 313,5$$

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

$$\tau = \int_0^{\infty} t E(t) dt = 14,27 \text{ s}$$

$$\sigma^2 = \int_0^{\infty} (t - \tau)^2 E(t) dt = 34,30$$

$$n = \frac{\tau^2}{\sigma^2} = 5,93 \approx \underline{\underline{6}}$$

$$\alpha = 3,11 \cdot 10^{-1}$$

$$\beta = -6,54 \cdot 10^{-5}$$

$$C_{A1} = 3,00 \cdot 10^{-3}$$

$$C_{A2} = 2,21 \cdot 10^{-3}$$

$$C_{A3} = 1,58 \cdot 10^{-3}$$

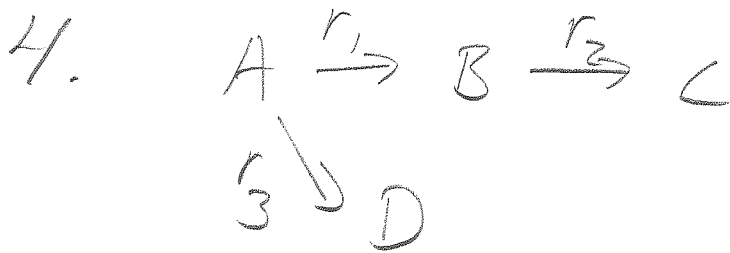
$$C_{A4} = 1,08 \cdot 10^{-3}$$

$$C_{A5} = 6,84 \cdot 10^{-4}$$

$$C_{A6} = 3,70 \cdot 10^{-4}$$

$$X = \frac{(C_{A0} - C_{A6})}{C_{A0}} = \underline{\underline{0,91}}$$

KKR 100 2012-12-8



$$r_1 = k_1 C_A \quad E_1 = 80 \text{ kJ/mol} \quad \Delta H = -110 \text{ kJ/mol}$$

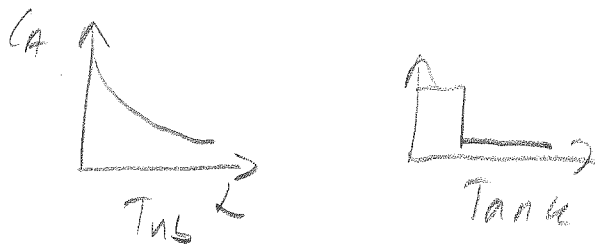
$$r_2 = k_2 C_B \quad E_2 = 120 \text{ kJ/mol} \quad \Delta H = -140 \text{ kJ/mol}$$

$$r_3 = k_3 C_A^{0,5} \quad E_3 = 150 \text{ kJ/mol} \quad \Delta H = -30 \text{ kJ/mol}$$

a) Önskad produkt är B.

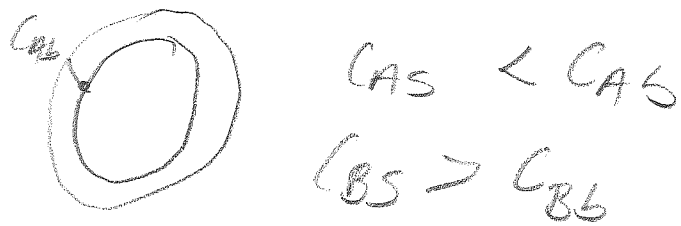
Eftersom r_3 har lägre beroende på CA gynnas den anv. lägst CA om man jämför med r_1 . För selektiviteten av B är det därför bättre med hög CA.

Välj tubreaktor eller satsreaktor



Reaktionsbetingelser: Lite inert ämne.
Om det är gasfas högt P.

b) Yttre masstransport signifikant, är det gynnsamt för B produktion?

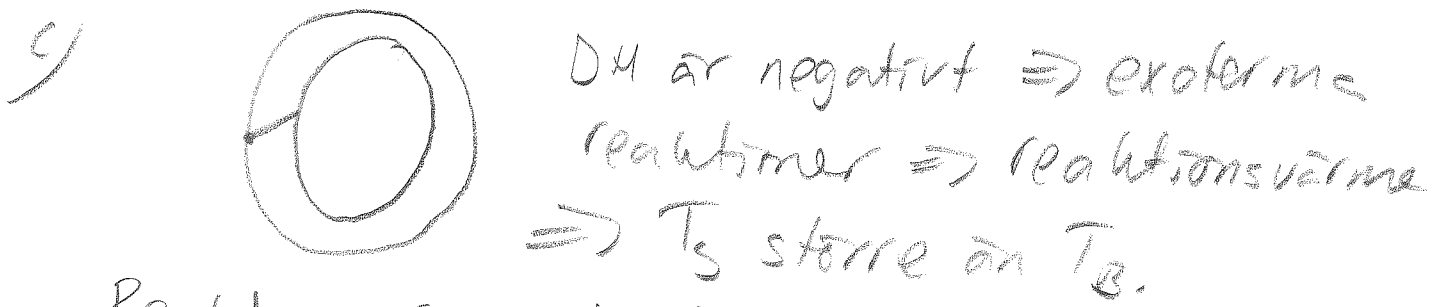


r_2 kommer att öka pga C_{AS} är större.
Negativt för S_B .

C_{AS} lägre än C_{AB} gynnar r_3 framför
 r_1 , pga lägre reaktionsordning.

Negativt för S_B .

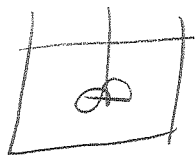
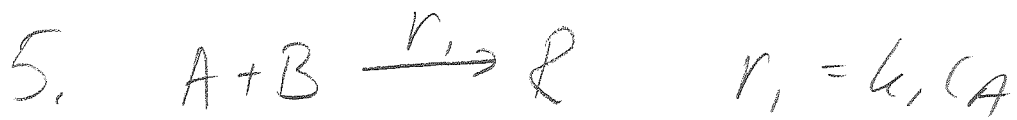
∴ EJ gynnsamt.



Reaktioner med hög E_a gynnas mer
av högre temp.

r_3 ökar mer än r_1 pga högre E_a
negativt för S_B .

r_2 ökar mer än r_1 .
 \Rightarrow Negativt för S_B . ∴ EJ gynnsamt.



$$T = 80^\circ\text{C}$$

$$k_1 = 0,04 \text{ min}^{-1}$$

Tid för att fylla en tomma är 30 min.

$$Q' = 80 \text{ kg/h}$$

$$C_{AR} = 0,5 \text{ kmol/m}^3$$

Vilken reaktor volym & tid krävs?

MB map A:

$$-k_1 C_A \cdot V = V \cdot \frac{dC_A}{dt}$$

$$\frac{1}{s} \cdot \frac{\text{mol}}{\text{m}^3} \cdot \text{m}^3 \quad \cancel{\text{m}^3} \cdot \frac{\text{mol}}{\text{m}^3 \cdot \text{s}} = \frac{\text{mol}}{s}$$

$$= \frac{\text{mol}}{s}$$

$$-k_1 C_A = \frac{dC_A}{dt}$$

$C_{A,ut}$

$$\int_{C_{Af}}^{C_{A,ut}} \frac{dC_A}{C_A} = -k_1 \cdot t$$

$$\ln \frac{C_{A,ut}}{C_{Af}} = -k_1 \cdot t$$

$$C_{A,R,ut} = C_{A,f} - C_{A,ut}$$

$$C_{A,ut} = C_{A,f} - C_{A,R,ut}$$

$$\ln \frac{C_{A,f} - C_{A,R,ut}}{C_{A,f}} = -k_r \cdot t$$

$$t = -\frac{1}{k_r} \cdot \ln \frac{C_{A,f} - C_{A,R,ut}}{C_{A,f}} = \underline{\underline{22,2 \text{ min}}}$$

$$\text{Total } t_{\text{td}} : 22,2 + 30 = \underline{\underline{52,2 \text{ min}}}$$

$$M_R = M_A + M_B = 80 + 18 = 98 \text{ g/mol}$$

$$Q_R = 80 \text{ kg/h}$$

$$n_R = \frac{80 \cdot 10^3}{98 \cdot 3600} \frac{\text{mol}}{\text{s}} = 0,2267 \text{ mol/s}$$

$$t_{\text{total}} = 52,2 \cdot 60 \text{ s}$$

$$n_{\text{total}, R} = 0,2267 \cdot 52,2 \cdot 60 = 710 \text{ mol}$$

$$C_R = \frac{n_{R, \text{total}}}{V}$$

$$V = \frac{n_{R, \text{total}}}{C_R} = \underline{\underline{1,4 \text{ m}^3}}$$