

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

Tisdag den 2 april 2013 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

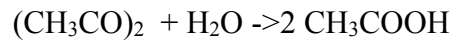
Betygskala:

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



Uppgift 1 (6 poäng).

En tankreaktor används för följande reaktion, vilken sker i vätskefas



Vatten finns i stort överskott varför reaktionen beror endast av $(\text{CH}_3\text{CO})_2$ (första ordningens reaktion). Initialt är reaktorn tom, sedan börjar inflödet med hastigheten $0.3 \text{ m}^3/\text{min}$. När reaktorn är full börjar produkten strömma ut. Vad blir koncentrationen av $(\text{CH}_3\text{CO})_2$ i reaktorn efter 25 min?

Följande data gäller:

Temperatur: 25°C

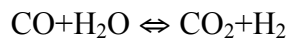
Volym: 5 m^3

Hastighetskonstant vid 25°C : $2.45 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$

Koncentrationen av $(\text{CH}_3\text{CO})_2$ i inflödet: 5 kmol/m^3

Uppgift 2 (7 poäng).

Vätgas kan produceras med den så kallade water gas shift-reaktionen



I en reaktor flödas gas in med sammansättningen 71% H₂O, 12%CO, 3%CO₂ och 14% H₂. Processen består av två reaktorer med mellanliggande kylning. I varje reaktor uppnås 90% av den adiabatiska jämviktsomsättningsgraden. Vätehalten ut från hela anläggningen är 23%.

- Om temperaturen till första reaktorn är 820°C, till vilken temperatur måste då inflödet till den andra reaktorn kylas?
- Ta fram ekvationerna för att generera jämviktsdiagrammet (som finns bifogat i denna uppgift). OBS: Ekvationerna behöver ej lösas, men lösningsgången skall beskrivas.

Jämviktskonstanten kan beräknas från

$$\Delta G = -RT \ln(K_p)$$

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

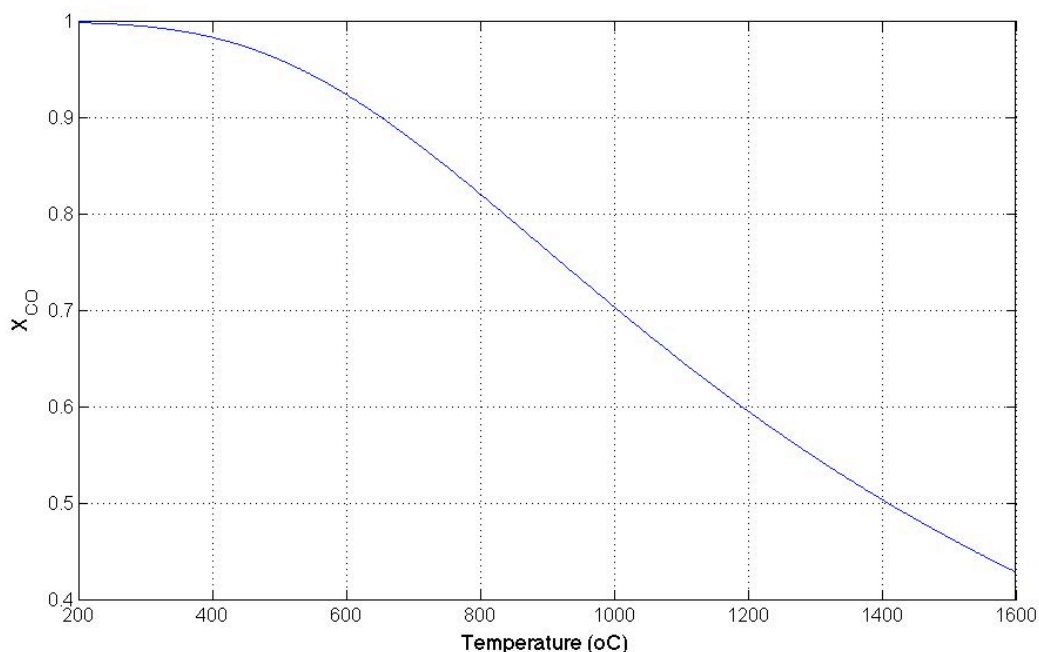
där $\Delta S = -30.2 \text{ J}/(\text{mol K})$, $-40 \text{ kJ}/\text{mol}$.

$$C_{p,\text{H}_2\text{O}} = 34 \text{ J}/(\text{mol K})$$

$$C_{p,\text{CO}} = 29 \text{ J}/(\text{mol K})$$

$$C_{p,\text{CO}_2} = 37 \text{ J}/(\text{mol K})$$

$$C_{p,\text{H}_2} = 29 \text{ J}/(\text{mol K})$$



Ifall diagrammet anv. för lösningen, bifoga den isåfall och märk den med sidnummer och er tentamenskod.

Uppgift 3 (6 poäng).

Följande reaktioner sker i vätskefas i en tubreaktor

$A+2B \rightarrow C$ (reaktionen av första ordningen m.p B, beror ej av A pga stort överskott)

$B + E \rightarrow D$ (reaktionen av första ordningen m.p B, beror ej av E pga stort överskott)

Sätt upp alla ekvationer och beskriv lösningsgången i detalj för att beräkna koncentrationen av D i utflödet för följande två fall:

- a) Inre masstransportmotstånd mycket viktigt, men yttre masstransportmotstånd kan försummas
- b) Yttre masstransportmotstånd och inre masstransportmotstånd mycket viktigt

Följande parametrar är kända:

Koncentrationen av A, B, C och D i inflödet

Totala vätskeflödet

Hastighetskonstanterna för båda reaktionerna

Sh-tal

Katalysatorpartikeldiametern

Effektiva diffusiviteten

Reaktorvolymen

Dispersionskoefficienten, D_A

Uppgift 4 (6 poäng)

- a) Vilken reaktor eller reaktorkombination skall väljas, om hänsyn skall tagas till kapacitet, för en kontinuerlig enzymatisk process? Processen är autokatalytisk, dvs hastigheten har ett maximum när omsättningsgraden ändras. Tydlig motivering krävs.
- b) Varför skall en referenstemperatur användas i värmebalanser? Hur påverkar valet av Tref temperaturen i utflödet? Tydlig motivering krävs.
- c) Seriereaktionen
 $A \rightarrow B \rightarrow C$
Sker i en reaktor och B är den önskade produkten. Ur kapacitetshänsyn skall man då välja en tank eller tubreaktor? Tydlig motivering krävs.

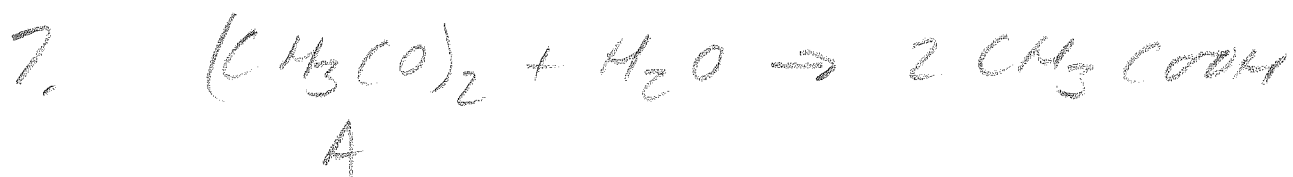
Uppgift 5 (5 poäng)

- a) Härled fram en ekvation för hur omsättningsgraden beräknas mha segregationsmodellen.
- b) Nedanstående spårämnesförsök utfördes. Vad är den axiella dispersionskoefficienten?

Tid (min)	Spårämneskoncentration (mol/m ³)
0	0
1	0
2	1
4	1
6	10
8	15
10	30
12	16
15	10
16	2
18	0
22	0
25	0

Reaktionen är första ordningen map A (A->B). Reaktorenlängen 0.8m, reaktordiametern 0.4m och flödeslilstigheten är 0.4 m³/min.

Tenta KKB100, 2 april 2013



$$C_{AF} = 5 \text{ kmol/m}^3$$

$$r = k \cdot C_A \quad k = 2,45 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$$

$$V = 5 \text{ m}^3$$

$$q = 0,3 \text{ m}^3/\text{min} = 0,005 \text{ m}^3/\text{s}$$



Fram till fyllning:

$$q = \frac{V}{t_{\text{fyllning}}} \quad t_{\text{fyllning}} = \frac{V}{q} = 1000 \text{ s}$$

MB:

$$q \cdot C_{AF} - k \cdot \underbrace{C_A \cdot V(t)}_{N_A} = \frac{dN_A}{dt}$$

$$q \cdot C_{AF} - k \cdot N_A = \frac{dN_A}{dt}$$

$$\int_0^{N_A} \frac{dN_A}{q \cdot C_{AF} - k \cdot N_A} = \int_0^{t_{\text{fyllning}}} dt$$

$$\left[-\frac{1}{k} \ln(q C_{AF} - k N_A) \right]_0^{N_A} = t_{\text{fyllning}}$$

$$\underbrace{-\frac{1}{k} \ln(q C_{AF} - k N_A)}_{\alpha 1} + \underbrace{\frac{1}{k} \ln(q C_{AF})}_{\alpha 2} = t_{\text{fyllning}}$$

$$\alpha 1 = t_{\text{fyllning}} - \alpha 2 =$$

$$\alpha 1 = -\frac{1}{k} \ln(q C_{AF} - k N_A)$$

$$-\alpha 1 k = \ln(q C_{AF} - k N_A)$$

$$q C_{AF} - k N_A = e^{-\alpha 1 k}$$

$$k N_A = q C_{AF} - e^{-\alpha 1 k}$$

$$N_A = \frac{1}{k} (q C_{AF} - e^{-\alpha 1 k}) =$$

$$C_{A1} = \frac{N_A}{V} = 1,865 \cdot 10^3 \text{ mol/m}^3$$

Efter fyllning: $1000 \text{ s} \Rightarrow 25 \cdot 60 = 1500 \text{ s}$

$$q \cdot C_{AF} - q \cdot C_{A2} - k \cdot C_{A2} \cdot V = \frac{dN_A}{dt}$$

$$q C_{AF} - q C_{A2} - k C_{A2} \cdot V = V \frac{dC_{A2}}{dt}$$

$$q C_{AF} - C_{A2} (q + kV) = V \frac{dC_{A2}}{dt}$$

$$\int_{C_{A1}}^{C_{A2}} \frac{V dC_{A2}}{q C_{AF} - C_{A2}(q + kV)} = \int_{t_{\text{fyllning}}}^{t_{\text{saut}}} dt$$

$$\underbrace{V \frac{1}{-(q+kV)}}_{\alpha_4} \ln \left(\underbrace{\frac{q C_{AF} - C_{A2}(q+kV)}{q C_{AF} - C_{A1}(q+kV)}}_{\alpha_3} \right) = t_{\text{saut}} - t_{\text{fyllning}}$$

$$\alpha_4 = -289,855$$

$$\alpha_3 = \frac{t_{\text{saut}} - t_{\text{fyllning}}}{\alpha_4} = -1,725$$

$$\frac{q C_{AF} - C_{A2}(q+kV)^{\alpha_6}}{q C_{AF} - C_{A1}(q+kV)^{\alpha_5}} = \exp(\alpha_3)$$

$$C_{A2}(q+kV) = q C_{AF} - \alpha_6$$

$$C_{A2} = \frac{q C_{AF} - \alpha_6}{q+kV} = \underline{\underline{1,5 \text{ kmol/m}^3}}$$



$$r = k c_{\text{CO}} \cdot c_{\text{H}_2\text{O}} - \frac{k}{K_{\text{eq}}} \cdot c_{\text{CO}_2} \cdot c_{\text{H}_2}$$

Jamvikt: $r = 0$

$$c_{\text{CO},e} \cdot c_{\text{H}_2\text{O},e} = \frac{1}{K_{\text{eq}}} c_{\text{CO}_2,e} \cdot c_{\text{H}_2,e}$$

$$c_{\text{CO},e} = c_{\text{CO},0} (1 - X_{\text{eq,CO}})$$

$$c_{\text{H}_2\text{O},e} = c_{\text{H}_2\text{O},0} - c_{\text{CO},0} \cdot X_{\text{eq,CO}}$$

$$c_{\text{H}_2,e} = c_{\text{H}_2,0} + c_{\text{CO},0} \cdot X_{\text{eq,CO}}$$

$$c_{\text{CO}_2,e} = c_{\text{CO}_2,0} + c_{\text{CO},0} \cdot X_{\text{eq,CO}}$$

$$\begin{aligned} & \overset{A}{\downarrow} c_{\text{CO},0} (1 - X_{\text{eq,CO}}) \cdot \left(c_{\text{H}_2\text{O},0} - \overset{B}{\downarrow} c_{\text{CO},0} \cdot \overset{D}{\downarrow} X_{\text{eq,CO}} \right) = \\ & = \frac{1}{K_{\text{eq}}} \left(c_{\text{CO}_2,0} + \overset{C}{\downarrow} c_{\text{CO},0} \cdot X_{\text{eq,CO}} \right) \left(c_{\text{H}_2,0} + \overset{D}{\downarrow} c_{\text{CO},0} \cdot X_{\text{eq,CO}} \right) \end{aligned}$$

$$A(1-X)(B-A \cdot X) = \frac{1}{K_{\text{eq}}} (C + A \cdot X)(D + A \cdot X)$$

$$A(B - AX - BX + AX^2) = \frac{1}{K_{\text{eq}}} (CD + ACX + ADX + AX^2)$$

$$-RT \ln(K_p) = \Delta H - T \Delta S$$

$$\ln(K_p) = \frac{T \Delta S}{RT} - \frac{\Delta H}{RT} = \frac{\Delta S}{R} - \frac{\Delta H}{RT}$$

$$K_p = \exp\left(\frac{\Delta S}{R} - \frac{\Delta H}{RT}\right)$$

$$\sum F_{ef} \int_{T_{ref}}^{T_2} C_{pe} dT - \sum F_e \int_{T_{ref}}^{T_1} C_{pe} dT + F_{AF} y_A (-\Delta H) = 0$$

$$T_{ref} = T_1$$

$$X_A = \frac{\sum F_{ef} C_{pe} (T_1 - T_{ref})}{F_{AF} (-\Delta H)} = \frac{\sum F_{tot,ef} \cdot y_{ef} C_{pe} (T_1 - T_{ref})}{F_{tot,ef} \cdot y_{A,m} \cdot (-\Delta H)}$$

↓ 820°C

$$F_{ef} = F_{tot} \cdot y_{ef}$$

$$X_{1,eq} = 0,745 \quad X_1 = 0,9 \cdot 0,745$$

$$(X_2 - X_1) = \frac{\sum y_{e1} C_{pe} (T_2 - T_{ref})}{y_{A,m} (-\Delta H)}$$

$$C_{H_2,in} = C_{tot,m} \cdot y_{H_2,m}$$

$$C_{H_2,out} = C_{tot,m} \cdot y_{H_2,m} + C_{CO,m} \cdot X_{CO}$$

$$C_{tot} \cdot y_{H_2,out} = C_{tot} \cdot y_{H_2,m} + C_{tot} \cdot y_{CO,m} \cdot X_{CO}$$

C_{tot} konst. pga mgen molanding

$$0,23 = 0,14 + 0,12 \cdot X_{CO}$$

$$\Rightarrow X_{CO} = \frac{0,23 - 0,14}{0,12} = 0,75 = X_2$$

$$DT = (T_2 - T_{2f}) = (x_2 - x_7) \cdot \frac{y_{A2}(-DM)}{\sum y_{if}(p_i)}$$

Jämviktsomsättn. graden:

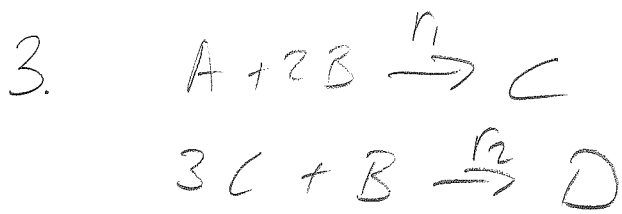
$$x_2 = 0,9 \cdot x_{2,eq} \Rightarrow x_{2,eq} = \frac{0,75}{0,9} = 0,83$$

$$T_{2,eq} = 780^\circ\text{C} \text{ (från graf)}$$

Anv. jämv. punkten i elv. ovan

$$(780 - T_{2f}) = (0,83 - x_7) \dots \dots$$

$$\Rightarrow \underline{\underline{T_{2f} = 756^\circ\text{C}}}$$



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

a) Inre masstransport motstånd

$$B: \quad q c_B - q \cdot (c_B + dc_B) - 2\eta_1 k_1 c_B dV - \eta_2 k_2 c_B dV = 0$$

$$\left\{ -q dc_B - (2\eta_1 k_1 c_B + \eta_2 k_2 c_B) dV = 0 \right. \textcircled{1}$$

$$D: \left\{ q c_D - q (c_D + dc_D) + \eta_2 k_2 c_B dV = 0 \right. \textcircled{2}$$

$$\eta_1 = \frac{3}{\phi_1} \left(\frac{1}{\tanh \phi} - \frac{1}{\phi} \right)$$

$$\phi_1 = r_p \sqrt{\frac{k_1}{D_{eff}}}$$

$$\phi_2 = r_p \sqrt{\frac{k_2}{D_{eff}}}$$

$$\eta_2 = \frac{3}{\phi_2} \left(\frac{1}{\tanh \phi} - \frac{1}{\phi} \right)$$

Lösa $\textcircled{1}$ och $\textcircled{2}$ tillsammans

b) Ytre + inre

$$-q dC_B - (2\eta_1 k_1 + \eta_2 k_2) C_{B,S} dV = 0 \quad (3)$$

$$-q C_D + \eta_2 k_2 C_{B,S} dV = 0 \quad (4)$$

$\eta_1 = \eta_2$ ent. oppg a)

Filmteori

$$k_c (C_{B,b} - C_{B,s}) = -2\eta_1 k_1 C_{B,S} - \eta_2 k_2 C_{B,S} \quad (5)$$

(3) + (4) + (5) tilsummas.

5b)

$$\eta = \frac{\tau^2}{\sigma^2}$$

$$\tau = \int_0^{\infty} t E(t) dt = 10,12$$

$$\sigma^2 = \int_0^{\infty} (t - \tau)^2 E(t) dt = 8,29$$

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

↑ 85

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

$$Pe_r = \frac{UL}{D_a}$$

$$D_a = \frac{UL}{Pe_r}$$

$$U = \frac{q}{A} = 0,0531 \text{ m/s}$$

$$D_a = \underline{\underline{0,0018 \text{ m}^2/\text{s}}}$$