

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

Fredagen den 28 mars 2008 kl 8:30-13:30 i V

Examinator: Derek Creaser

Derek Creaser (0703-239289) kommer att besöka tentamenslokalen ca. 9:30 och 11:00.
Granskning av tentamensrättningen kan ske tidigast den 11 april 2008.

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

Man får svara på svenska eller engelska!

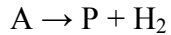
Betygskala:

Poäng	Betyg
15-19	3
19.5-24	4
24.5-30	5



Uppgift 1 (7 poäng)

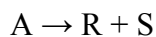
Produkten P framställs kontinuerligt i en tubreaktor genom katalytisk dehydrering av reaktanten A vid 700°C, 1 bar.



Reaktionen är ett förlopp av första ordningen och hastighetsekvationen kan skrivas:

$$-r_{A1} = k_1 C_A, \text{ där } k_1 = 5 \times 10^{-4} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1} (\text{kg katalysator})^{-1}$$

Med denna katalysator sker även bireaktionen



För denna gäller hastighetsekvationen

$$-r_{A2} = k_2 C_A^2, \text{ där } k_2 = 6 \times 10^{-5} \text{ m}^6 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1} (\text{kg katalysator})^{-1}$$

Inflödes hastigheten är 2 mol s^{-1} och består of ren A. Omsättningen av A över reaktorn är 60%.

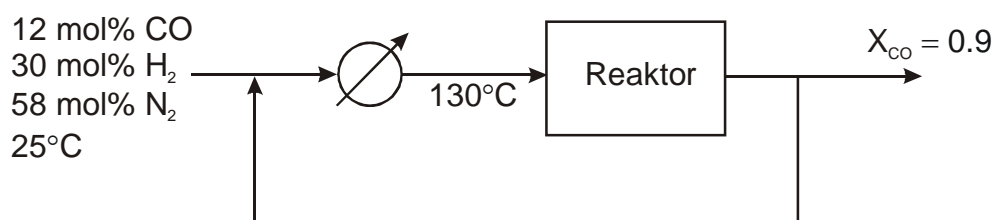
- Beräkna katalysatormassan i reaktorn om transportbegränsningar försummas.
 - Om reaktionen genomföres i en ideal tankreaktor med samma inflödes hastighet och omsättning av A, blir produktionen av P högre. Förklara varför. (Väl grundad diskussion är tillräcklig)
 - Vilken reaktor är att föredraga, tub eller tank? Motivera svaret.
-

Uppgift 2 (5 poäng)

I en anläggning för framställning av metanol önskar man 90 % omsättningsgrad m a p CO. Reaktionen sker i en adiabatisk tubreaktor.



Utflödet uppnår jämvikt och färska inflödet har temperaturen 25°C och har sammansättningen 12 mol% CO, 30 mol% H_2 och 58 mol% N_2 . En del av utflödet recirkuleras och blandas med det färska inflödet. Blandningen förvärmes sedan till 130°C före reaktorinläppet. Reaktionen utföres vid 500 atm.



- Beräkna värmebehovet i förvärmaren före reaktorinläppet.
- Beräkna andelen av reaktorutflödet som recirkuleras.

DATA:

Man kan anta att idealgaslagen gäller.

Jämviktskonstantens temperaturberoende:

$${}^{10}\log(K) = \frac{5304}{T} - 12.89, \quad (K \text{ i } \text{atm}^{-2}, T \text{ i Kelvin})$$

Medelmolvärmen (kan anses konstanta i aktuellt temperaturintervall) :

	$\text{J mol}^{-1} \text{K}^{-1}$
H_2	29
N_2	29
CO	30
CH_3OH	53

Uppgift 3 (7 poäng)

För genomförandet av reaktionen



i homogen vätskefas, används en liggande cylindrisk reaktor försedd med bafflar. Halten A i ingående lösning är 8 mol dm^{-3} . Vid temperaturen 40°C har hastighetskonstanten (k) värdet $0.125 \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ min}^{-1}$.

För framtagning av reaktorns uppehållstidsfördelning injicerades momentant ett radioaktivt spårämne på ingångssidan och radioaktiviteten som funktion av tiden uppmättes genom prover på utgångsflödet. Därvid erhållna resultat har omräknats till följande frekvensfunktion:

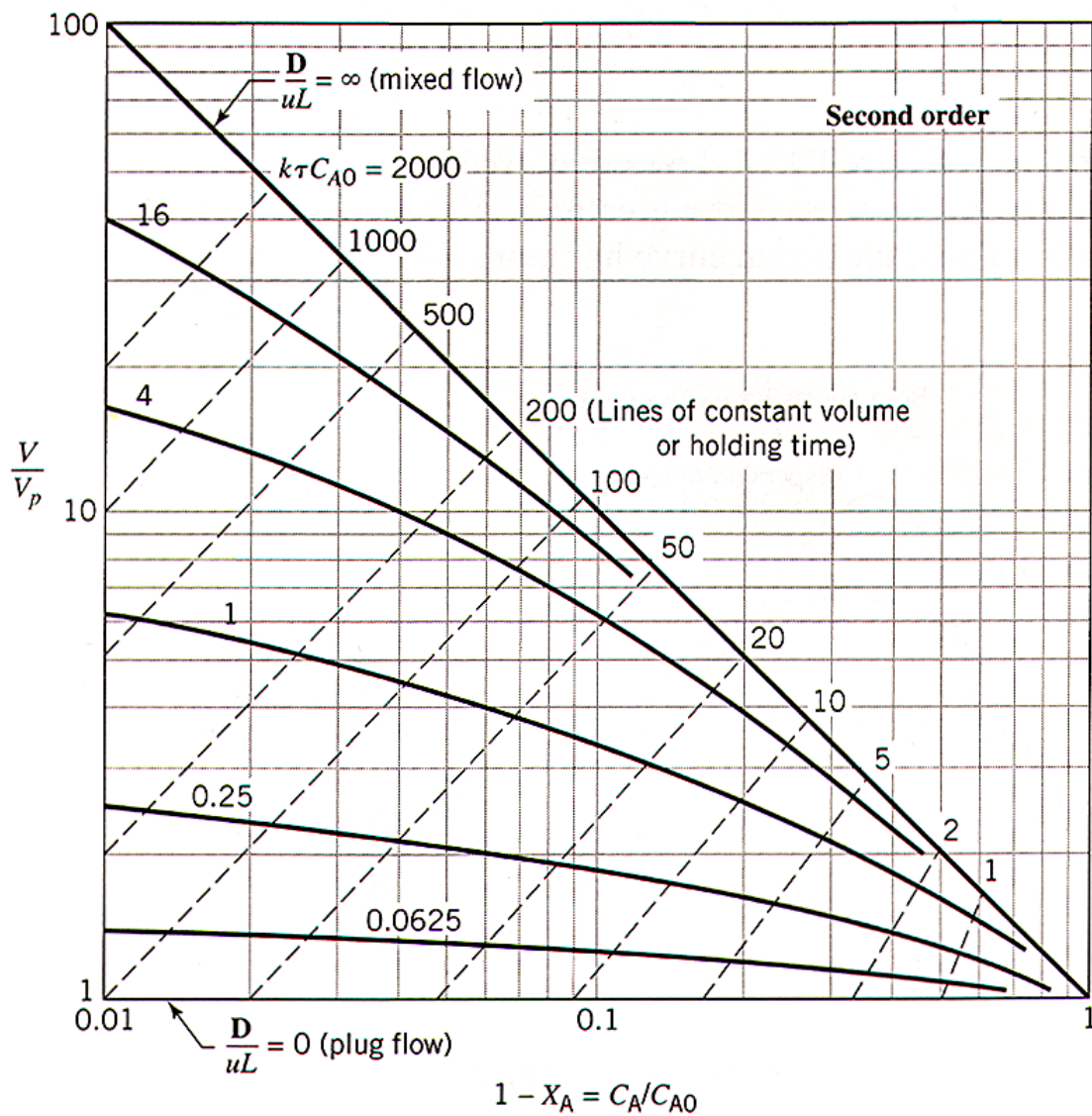
t (min)	$E(t) \times 10^4$	t (min)	$E(t) \times 10^4$
0	0	26	314.5
2	6.6	28	264.8
4	16.5	30	215.2
6	33.1	32	182.1
8	82.8	34	145.7
10	165.5	36	105.9
12	364.1	38	76.13
14	480.0	40	46.34
16	529.6	42	23.17
18	546.2	44	9.39
20	529.6	46	4.97
22	463.4	48	2.32
24	390.6	50	0.99

Vidare har ur samma frekvensfunktion medeluppehållstiden bestämts till 21.06 min samt variansen i uppehållstiden till 58.43 min^2 . Reaktorn antas ur dispersionssynpunkt vara sluten. Beräkna omsättningen av komponent A för följande blandningsmodeller:

- Segregationsmodellen
- Dispersionsmodellen
- Skulle omsättningsgraderna beräknade med modellerna i (a) och (b) vara lika? Förklara varför eller varför inte.

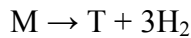
För beräkningen kan figuren nedan användas.

Figuren jämför volymen av en icke-ideal reaktor (V) och volymen av en ideal reaktor (V_P) för andra ordningens reaktion med försumbar densitetsändring och slutna randvillkor.



Uppgift 4 (5 poäng)

Gasfasdehydreringen av metylcyklohexan (M) till toluen (T):



utförs över en Pt - baserad katalysator i en fluidiserad bäddreaktor, vilken kan anses fungera som en ideal tank. Reaktionshastigheten är en funktion av partialtrycket för metylcyklohexan (P_M):

$$r = \frac{kbP_M}{1 + bP_M}$$

Det färiska inflödet till reaktorn består av 10 mol% metylcyklohexan i ånga och inflödes hastigheten av metylcyklohexan är 2 mol s^{-1} . Reaktorn körs vid konstant temperatur och tryck av 372°C resp. 1.5 atm . Omsättningen av metylcyklohexan över reaktorn är 20 %. De fasta och sfäriska katalysatorpartiklarna är icke-porösa och har en diameter av 1 mm. Beräkna erforderlig katalysatormängd i reaktorn.

Då inflödeskoncentration av reaktant och omsättning i reaktorn är låga, kan gasens densitetsvariation försummas och ekvimolär motdiffusion anses råda runt katalysatorpartiklarna.

DATA:

$$k = 4.28 \times 10^{-2} \text{ mol s}^{-1} (\text{kg katalysator})^{-1}$$

$$b = 3 \text{ atm}^{-1}$$

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

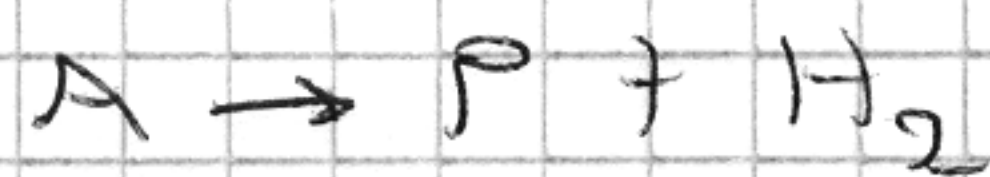
$$D_M = 1 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$$

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

Uppgift 5 (6 poäng)

- Förklara varför exoterma och endoterma reaktioner som är jämviktsbegränsade, ofta utföres i en serie av reaktorer med mellankylning/värmning.
 - Definiera för en exoterm jämviktsbegränsad reaktion, den så kallade "locus of maximum rates" (Γ). Förklara dess betydelse för att utforma en effektiv process för genomförandet av denna typ reaktion.
 - Beskriv utformningen av en "cold-shot cooling" process. Vilka fördelar erbjuder denna processkonstruktion och under vilka förhållanden är dess användning gynnsam?
-

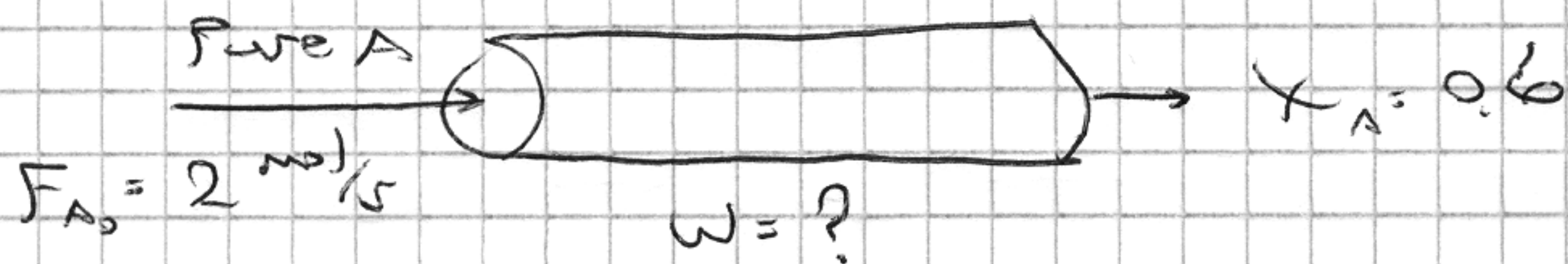
Uppgift 1



$$r_{A1} = -k_1 C_A$$



$$r_{A2} = -k_2 C_A^2$$



$$P = 1 \text{ bar}$$
$$T = 973 \text{ K}$$

$$\frac{P}{RT} = 12.36 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3} = C_{T0}$$

$$F_A = F_{A0} - x F_{A0}$$

$$F_{\text{tot}} = F_{A0} - x F_{A0} + 2x F_{A0} = F_{A0} + x F_{A0}$$

both reactions produce 2 moles of products per mole of A consumed!

$$C_A = \frac{F_{A0} - x F_{A0}}{F_{A0} + x F_{A0}} \left(\frac{P}{RT} \right) = \frac{1-x}{1+x} \frac{P}{RT}$$

$$\frac{dF_A}{dW} = -k_1 C_A - k_2 C_A^2$$

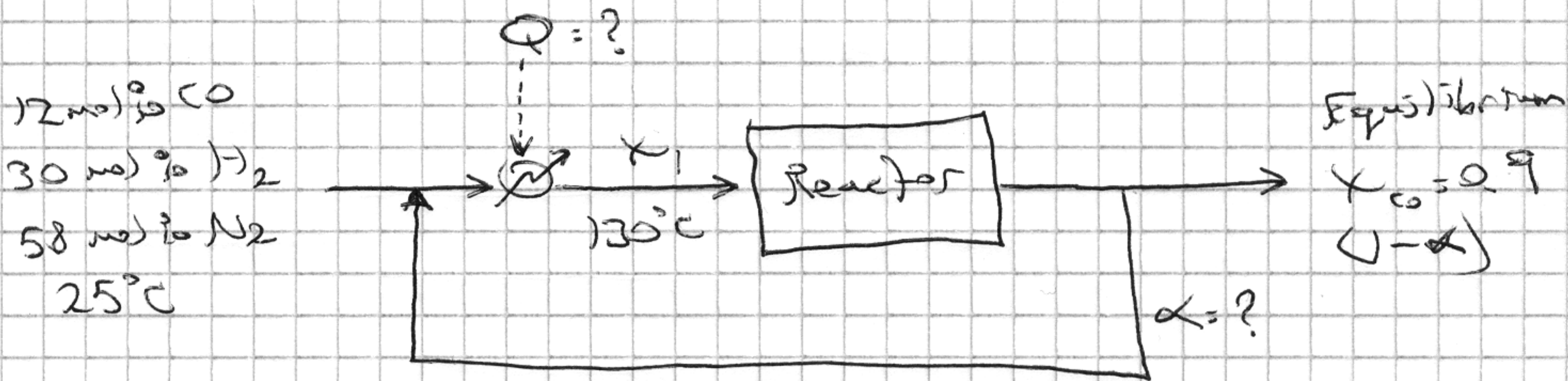
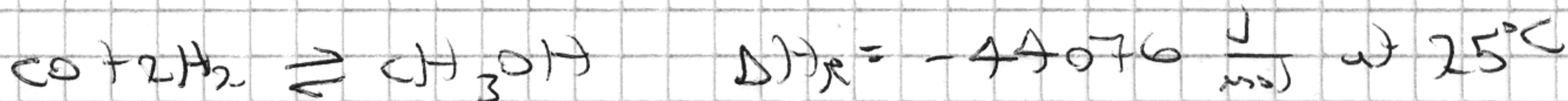
$$F_{A0} \frac{dx}{dW} = k_1 \left(\frac{1-x}{1+x} \right) \frac{P}{RT} + k_2 \left(\frac{1-x}{1+x} \right)^2 \left(\frac{P}{RT} \right)^2$$

$$W = \frac{F_{A0}}{C_{T0}} \int_0^{0.6} \frac{dx}{k_1 \left(\frac{1-x}{1+x} \right) + k_2 C_{T0} \left(\frac{1-x}{1+x} \right)^2}$$

$$W = \frac{F_{A0}}{C_{T0}} I \quad I = 1470 \frac{\text{kg} \cdot \text{s}}{\text{m}^3} \quad (\text{solved numerically})$$

$$W = \frac{2 \text{ mol/s}}{12.36 \text{ mol/m}^3} \cdot 1470 \frac{\text{kg} \cdot \text{s}}{\text{m}^3} = 237.8 \text{ kg}$$

Üppgift 2



$$P_{\text{tot}} = 500 \text{ atm}$$

$$k = 10 \left(\frac{5304}{T} - 12.89 \right) \text{ atm}^{-2}$$

$$k = \frac{P_{\text{CH}_3\text{OH}}}{P_{\text{CO}} P_{\text{H}_2}^2} = \frac{Y_{\text{CH}_3\text{OH}}}{Y_{\text{CO}} Y_{\text{H}_2}^2} \frac{1}{P_{\text{tot}}^2}$$

$$F_{\text{CO}} = F_{\text{CO}_0} - x F_{\text{CO}_0}$$

$$F_{\text{tot}_0} = F_{\text{CO}_0} + F_{\text{H}_2_0} + F_{\text{N}_2_0}$$

$$F_{\text{H}_2} = F_{\text{H}_2_0} - 2x F_{\text{CO}_0}$$

$$\frac{F_{\text{tot}_0}}{F_{\text{CO}_0}} = 1 + \frac{Y_{\text{H}_2_0}}{Y_{\text{CO}_0}} + \frac{Y_{\text{N}_2_0}}{Y_{\text{CO}_0}}$$

$$F_{\text{CH}_3\text{OH}} = x F_{\text{CO}_0}$$

$$= 1 + \frac{0.3}{0.12} + \frac{0.58}{0.12}$$

$$F_{\text{N}_2} = F_{\text{N}_2_0}$$

$$\frac{F_{\text{tot}_0}}{F_{\text{CO}_0}} = 8.33$$

$$F_{\text{tot}} = F_{\text{tot}_0} - 2x F_{\text{CO}_0}$$

$$Y_{\text{CH}_3\text{OH}} = \frac{x F_{\text{CO}_0}}{F_{\text{tot}_0} - 2x F_{\text{CO}_0}} = \frac{x}{8.33 - 2x}$$

$$Y_{\text{CO}} = \frac{1-x}{8.33-2x}$$

$$Y_{\text{H}_2} = \frac{2.5-2x}{8.33-2x}$$

$$k = \frac{x (8.33 - 2x)^2}{(1-x) (2.5 - 2x)^2 P_{\text{tot}}^2} = 10 \frac{5304}{T} - 12.89$$

$$\text{at } x = 0.9 \quad \log k = -2.503 = \frac{5304}{T} - 12.89$$

$$T = 510.7 \text{ K} = 237.7^\circ \text{C}$$

Basit: 100 mol/s feed.

Overall heat balance: $T_{\text{ref}} = 298 \text{ K}$

$$\sum F_{i0} c_{p,i} (T_0 - T_{\text{ref}}) - \sum F_i c_{p,i} (T - T_{\text{ref}}) + \gamma F_{O_2} (-\Delta H_R(T_{\text{ref}})) + Q = 0$$

$$Q_{\text{in}} = 0$$

$$F_{O_2} = F_{O_2_0} (1 - \gamma) = 1.2 \text{ mol/s}$$

$$F_{H_2} = F_{H_2_0} - 2\gamma F_{O_2_0} = 30 - 2(0.9)(12) = 8.4$$

$$F_{CH_3OH} = \gamma F_{O_2_0} = 0.9(12) = 10.8$$

$$F_{N_2} = F_{N_2_0} = 58 \text{ mol/s}$$

$$Q_{\text{out}} = (F_{O_2} c_{p,O_2} + F_{H_2} c_{p,H_2} + F_{CH_3OH} c_{p,CH_3OH} + F_{N_2} c_{p,N_2}) (T - T_{\text{ref}})$$

$$= 5.3898 \cdot 10^5 \text{ J/s}$$

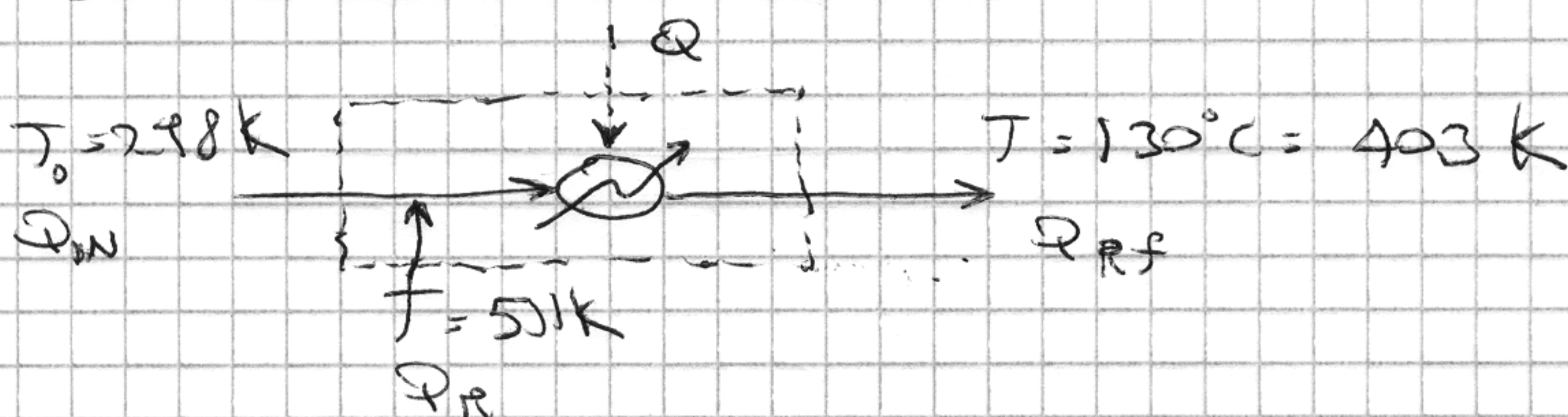
$$Q_R = 0.9(12)(44076) = 4.7602 \cdot 10^5 \text{ J/s}$$

$$Q = Q_{\text{out}} - Q_R$$

$$Q = 62960 \text{ J/s} = 62.9 \text{ kW (a)}$$

per 100 mol/s feed.
or 0.629 kJ/mol feed.

Heat Balance over mixing:



Recycle stream = $\frac{x}{1-x}$ Outlet stream

$$Q_{IN} + Q_R + Q - Q_{REF} = 0$$

$$Q_{IN} + \frac{x}{1-x} Q_{OUT} + Q - Q_{REF} = 0$$

set $T_{ref} = 130^\circ\text{C} = 403\text{K}$ then $Q_{REF} = 0$

$$Q_{IN} = (12 C_{pO} + 30 C_{pH_2} + 58 C_{pN_2}) (298 - 403)$$

$$Q_{IN} = -305760 \text{ J/s}$$

$$Q_{OUT} = \sum F_i C_{p_i} (510.7 - 403)$$

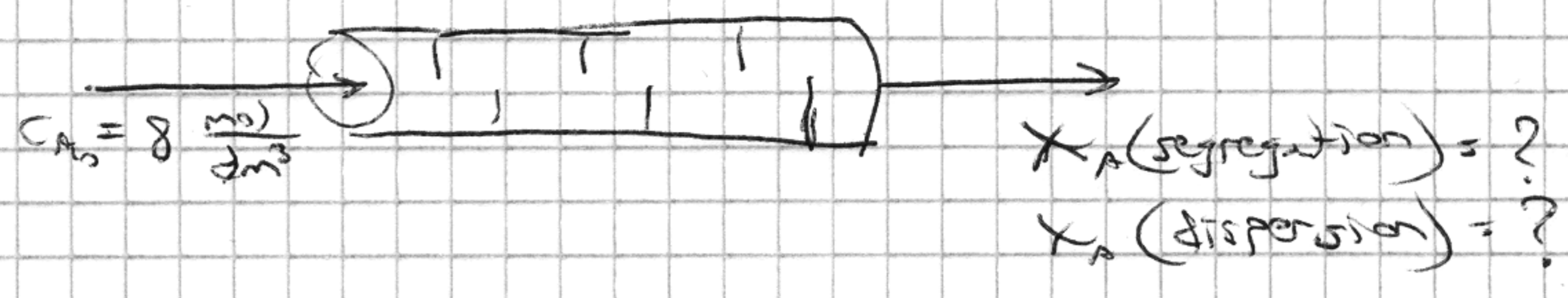
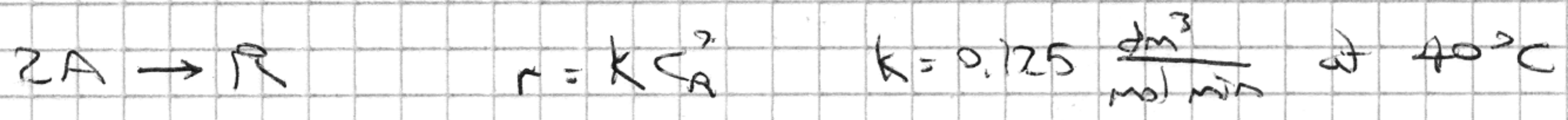
$$= 2.7291 \cdot 10^5 \text{ J/s}$$

$$\frac{x}{1-x} = \frac{-Q_{IN} - Q}{Q_{OUT}}$$

$$x = \frac{Q_{IN} + Q}{Q_{IN} + Q - Q_{OUT}}$$

$$x = 0.471 \quad (b)$$

Uppgift 3



from pulse injection of tracer: $\bar{t} = 21.06 \text{ min}$
 $\sigma^2 = 58.43 \text{ min}^2$

also $E(t)$ given.

Batch reactor balance:

$$\frac{dN_A}{dt} = r_A V = -2k C_A^2 V$$

$$C_{A0} \frac{dX}{dt} = 2k C_{A0}^2 (1-X)^2$$

$$\int_0^t dt = \frac{1}{2k C_{A0}} \int_0^X \frac{dX}{(1-X)^2}$$

$$t = \frac{1}{2k C_{A0}} \left(\frac{X}{1-X} \right)$$

$$X = \frac{2k C_{A0} t}{1 + 2k C_{A0} t} = X(t)_{\text{batch}}$$

Segregation model:

$$\bar{X} = \int X(t)_{\text{batch}} E(t) dt$$

Intermediate calculations shown on table below.

Integral calculated by trapezoidal rule.

$$\bar{X} = 0.973 \text{ (segregation)} \quad \text{ca)}$$

t	E(t)x1e4	E(t)	X(t)	E(t)*X(t)	Int
0	0	0	0	0	0
2	6.6	0.00066	0.8	0.000528	0.000528
4	16.5	0.00165	0.888889	0.001467	0.001995
6	33.1	0.00331	0.923077	0.003055	0.004522
8	82.8	0.00828	0.941176	0.007793	0.010848
10	165.5	0.01655	0.952381	0.015762	0.023555
12	364.1	0.03641	0.96	0.034954	0.050716
14	480	0.048	0.965517	0.046345	0.081298
16	529.6	0.05296	0.969697	0.051355	0.0977
18	546.2	0.05462	0.972973	0.053144	0.104499
20	529.6	0.05296	0.97561	0.051668	0.104812
22	463.4	0.04634	0.977778	0.04531	0.096979
24	390.6	0.03906	0.979592	0.038263	0.083573
26	314.5	0.03145	0.981132	0.030857	0.069119
28	264.8	0.02648	0.982456	0.026015	0.056872
30	215.2	0.02152	0.983607	0.021167	0.047183
32	182.1	0.01821	0.984615	0.01793	0.039097
34	145.7	0.01457	0.985507	0.014359	0.032289
36	105.9	0.01059	0.986301	0.010445	0.024804
38	76.13	0.007613	0.987013	0.007514	0.017959
40	46.34	0.004634	0.987654	0.004577	0.012091
42	23.17	0.002317	0.988235	0.00229	0.006867
44	9.39	0.000939	0.988764	0.000928	0.003218
46	4.97	0.000497	0.989247	0.000492	0.00142
48	2.32	0.000232	0.989691	0.00023	0.000721
50	0.99	0.000099	0.990099	9.8E-05	0.000328
				Sum	0.972992

Dispersion model

$$2kT C_{A0} = 2.12$$

In plot provided for 2nd order reactions $(2kT C_{A0})$ corresponds to $(kT C_{A0})$.

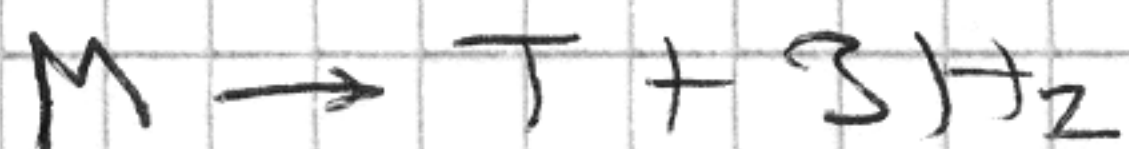
$$\frac{\sigma^2}{\tau_m^2} = \frac{2}{Pe} - \frac{2}{Pe^2} (1 - \exp(-Pe)) = 0.1317$$

solving $Pe = 14.10$

then $\frac{D}{uL} = \frac{1}{Pe} = 0.0709$

Using values of $2kT C_{A0}$ and $\frac{D}{uL}$

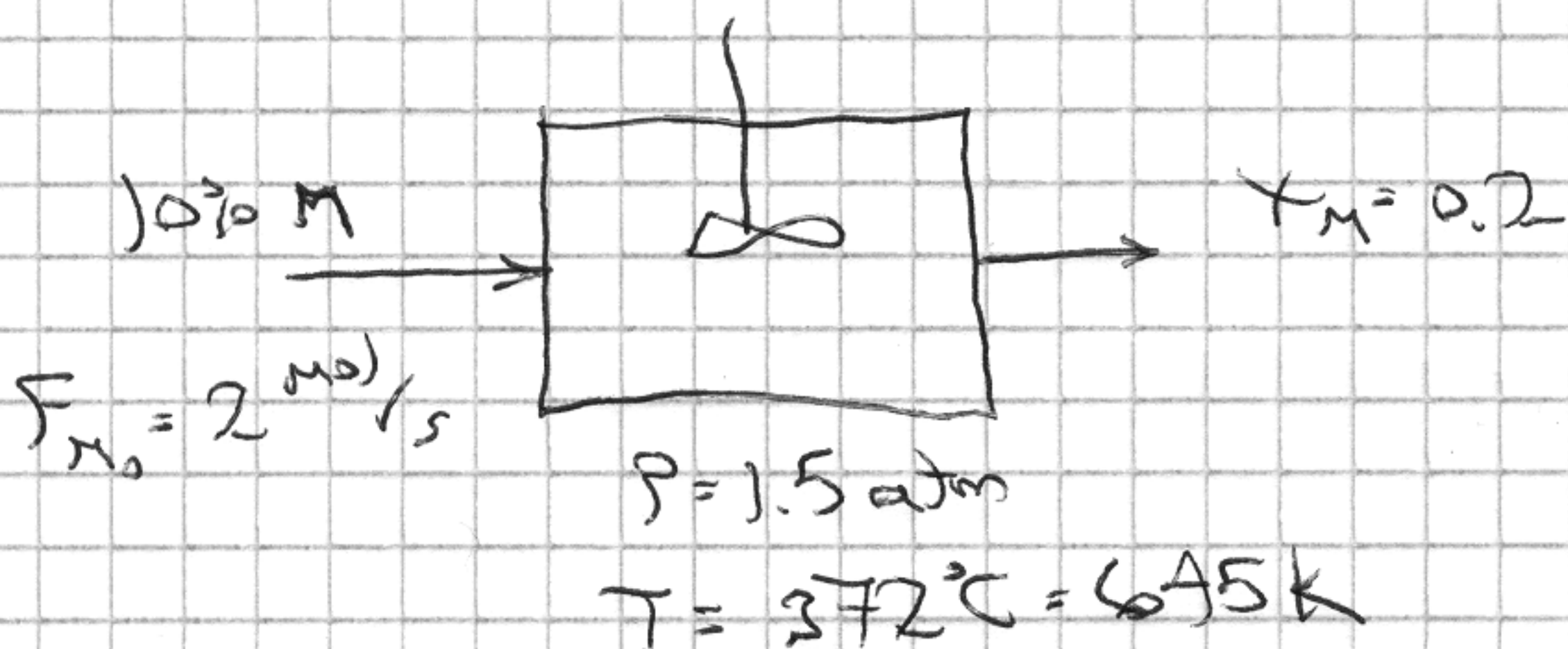
from diagram $1-X \approx 0.035$
 $X = 0.965$ (b)



$$k = 4.28 \cdot 10^{-2} \frac{\text{mol}}{\text{s} \cdot \text{kg}}$$

$$r = \frac{k b P_M}{1 + b P_M}$$

$$b = 3 \text{ atm}^{-1}$$



$$k_c = \frac{Sh D_m}{d_p} = \frac{3 \cdot 1 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2}{5} \cdot \frac{1}{10^{-3} \text{ m}} = 3 \cdot 10^{-2} \text{ m/s}$$

$$a = \frac{6}{d_p \rho_p} = \frac{6}{10^{-3} \text{ m} \cdot 3500 \text{ kg}} = 1.71 \text{ m}^2/\text{kg}$$

reactor mole balance for M:

$$F_{M_0} - F_M - rW = 0$$

$$F_{M_0} - F_M - k_c (C_{M_0} - C_{M_S}) a W = 0$$

at SS. $k_c a (C_{M_0} - C_{M_S}) = \frac{k b P_{M_S}}{1 + b P_{M_S}}$

$$\frac{k_c a}{RT} (P_{M_0} - P_{M_S}) = \frac{b k P_{M_S}}{1 + b P_{M_S}}$$

$$P_{M_0} = P_{M_0} (1 - X_M) = Y_{M_0} P_{tot} (1 - X_M) = 0.12 \text{ atm}$$

$$R = \frac{8.314 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot \frac{\text{atm}}{101325 \text{ Pa}} = 8.205 \cdot 10^{-5} \frac{\text{atm} \cdot \text{m}^3}{\text{mol} \cdot \text{K}}$$

$$(P_{M_6} - P_{M_5})(1 + b P_{M_5}) = \frac{k_b R T}{k_c a} P_{M_5}$$

$$-b P_{M_5}^2 + b P_{M_6} P_{M_5} - P_{M_5} + P_{M_6} = \frac{k_b R T}{k_c a} P_{M_5}$$

$$b P_{M_5}^2 - (b P_{M_6} - 1 - \frac{k_b R T}{k_c a}) P_{M_5} - P_{M_6} = 0$$

$$\frac{k_b R T}{k_c a} = \frac{0.0428 \text{ mol} / \text{s}}{8 \text{ kg}} \Big| \frac{3}{\text{atm}} \Big| \frac{8.205 \cdot 10^5 \text{ atm m}^3}{\text{mol K}} \Big| 645 \text{ K}$$

$$\frac{8}{3 \cdot 10^{-2} \text{ m}^3} \Big| \frac{\text{kg}}{1.7 \text{ m}^2} = 0.1325$$

$$3 P_{M_5}^2 + 0.7725 P_{M_5} - 0.12 = 0$$

solving $P_{M_5} = 0.1091 \text{ atm}$

returning to reactor balance:

$$X F_{M_0} - \frac{a k_c}{R T} (P_{M_6} - P_{M_5}) W = 0$$

$$W = \frac{X F_{M_0}}{(P_{M_6} - P_{M_5})} \frac{R T}{a k_c}$$

$$= \frac{0.2 / 2 \text{ mol} / \text{s}}{(0.12 - 0.1091) \text{ atm}} \Big| \frac{\text{kg}}{1.7 \text{ m}^2} \Big| \frac{8}{3 \cdot 10^{-2} \text{ m}^3} \Big| 645 \text{ K}$$

$$\frac{8.205 \cdot 10^5 \text{ atm m}^3}{\text{mol K}} = 37.5 \text{ kg} \leftarrow$$