

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

Onsdag den 15 april 2009 kl 8:30-13:30 i V

Examinator: Docent Louise Olsson

Louise Olsson (031-722 4390) kommer att besöka tentamenslokalen på förmiddagen.
Granskning av tentamensrättningen kan ske tidigast den 6 maj 2009.

Tillåtna hjälpmedel

Valfri räknare
Formelsamlingar utgiven av institutionen
TEFYMA
Standard Mathematics Handbook
beta Mathematics Handbook
Physics Handbook
Handbook of Chemistry and Physics

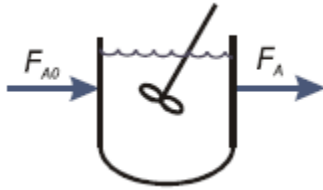
Ej tillåtna hjälpmedel

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)

- a) I en tankreaktor hålls först det vätskeformiga ämnet A i till volymen V_r med koncentrationen c_{Af} . Ingen reaktion sker vid fyllning då ingen katalysator finns. Vid tiden $t=0$ hålls katalysator i och reaktionen $A \rightarrow B$ börjar ske omedelbart, samtidigt sker ett inflöde av A med koncentrationen c_{Af} och flödet q (Det sker också ett utflöde q med koncentration c_A). Vad är koncentrationen av A efter 5s och 10s?
- b) Vad är koncentrationen av A vid steady state (dvs när koncentrationen är konstant och ej ändras)?

Indata:

Reaktionen är första ordningen map A.

Koncentration av reaktant i inflödet till reaktorn

Volymflöde av A

Reaktionsvolym

Hastighetskonstant

$$c_{Af} = 0.7 \text{ kmol/m}^3$$

$$q = 0.3 \text{ m}^3/\text{s}$$

$$V_r = 4.0 \text{ m}^3$$

$$k = 0.2 \text{ s}^{-1}$$

Uppgift 2 (6 poäng)

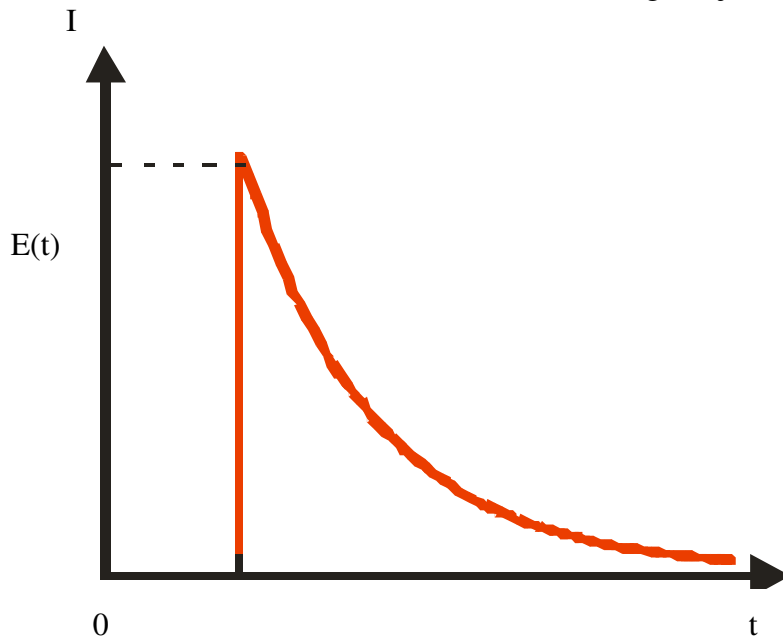
- a) Ett spårämnesförsök görs för att undersöka idealiteten hos en tubreaktor. Resultatet finns i tabellen nedan.

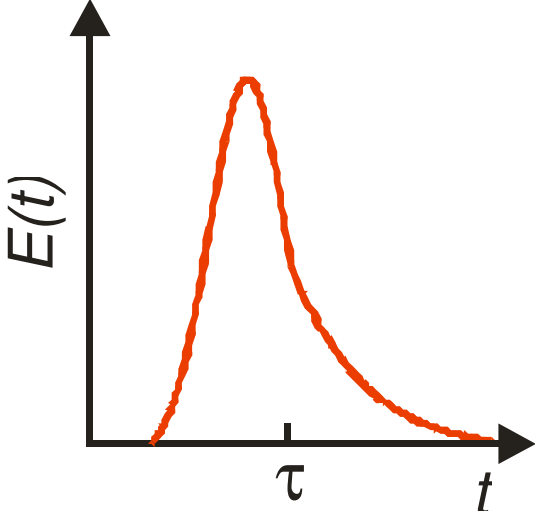
Reaktionen ($A \rightarrow B$) är av första ordningen map A. Beräkna omsättningsgraden av A med valfri metod. Hasighetskonstanten k är 0.4 min^{-1} .

t (min)	c (mg/l)
0	0
3	4
5	9
8	14
11	12
14	7
16	3
18	0

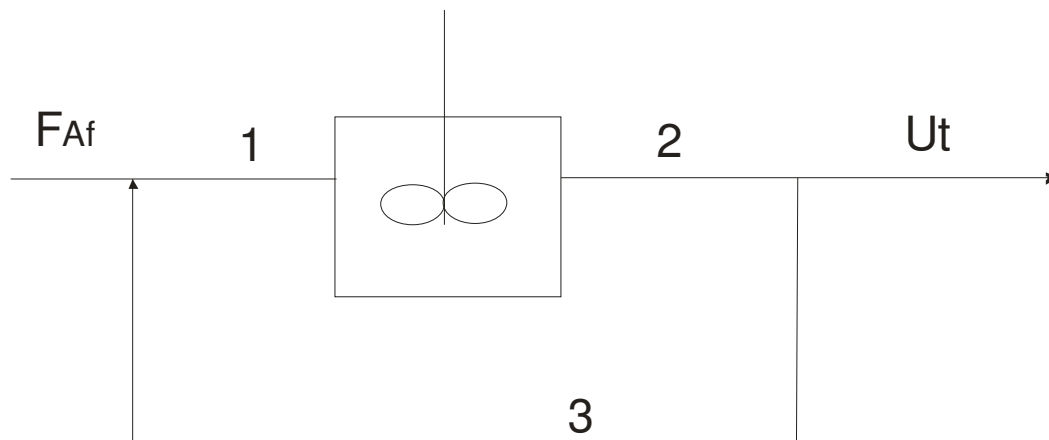
- b) Lisa hade tyvärr ingen möjlighet att utföra ett spårämnes försök. Hjälp henne att beräkna hur många tankar hon skall använda i sin tankseriemodell. Flödet i hennes tubreaktor är 350 ml/min och dimensionen 20 mm i diameter och 50 mm i längd. Diffusiviteten av ämne A är $2 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$.

- c) Vilken reaktor/reaktorkombination kan ge följande uppehållstidsfördelningar

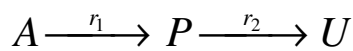




Uppgift 3 (6 poäng)



I en vätskefas reaktor med recirkulation enligt bilden ovan, sker en konsekutiv reaktion enligt:

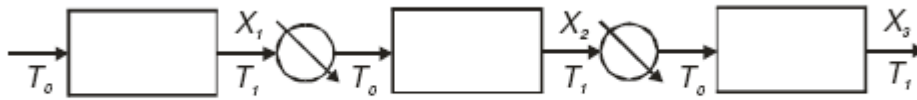


där P är den önskvärda produkten och U en oönskad produkt. 30% av flödet recirkuleras. Bestäm molflödet av produkten P (mol/s) ut från hela anläggningen.

Molflöde av A i flödet in till hela anläggningen	$F_{Af}=2 \text{ mol/s}$
Pre-exponentiell factor för reaktion 1	$A1=1 \cdot 10^{10} \text{ s}^{-1}$
Aktiveringsenergi för reaktion 1	$E1=120 \text{ kJ/mol}$
Pre-exponentiell factor för reaktion 2	$A2=1 \cdot 10^{10} \text{ s}^{-1}$
Aktiveringsenergi för reaktion 2	$E2=145 \text{ kJ/mol}$
Temperatur i reaktorn	$T=300^\circ\text{C}$
Volym	$V=0.8 \text{ m}^3$
Allmänna gaskonstanten	$R=8.314$
Koncentration av A i flödet in till hela anläggningen	$c_{Af}=800 \text{ mol/ m}^3$

b) Beskriv ett sätt att öka selektiviteten av produkten P. Motivera!

Uppgift 4 (6 poäng)



Reaktionen $A \rightarrow B$ är en exoterm jämviktsprocess. Den utförs i tre tankreaktorer med mellanliggande kylning. Nedan är locus of maximum rates kurvan utritad. Temperaturen in till alla 3 reaktorerna är 300°C . Inflödet består av 30% A och 70% inert material, I. Inflödet av det inerta materialet är 3 mol/s.

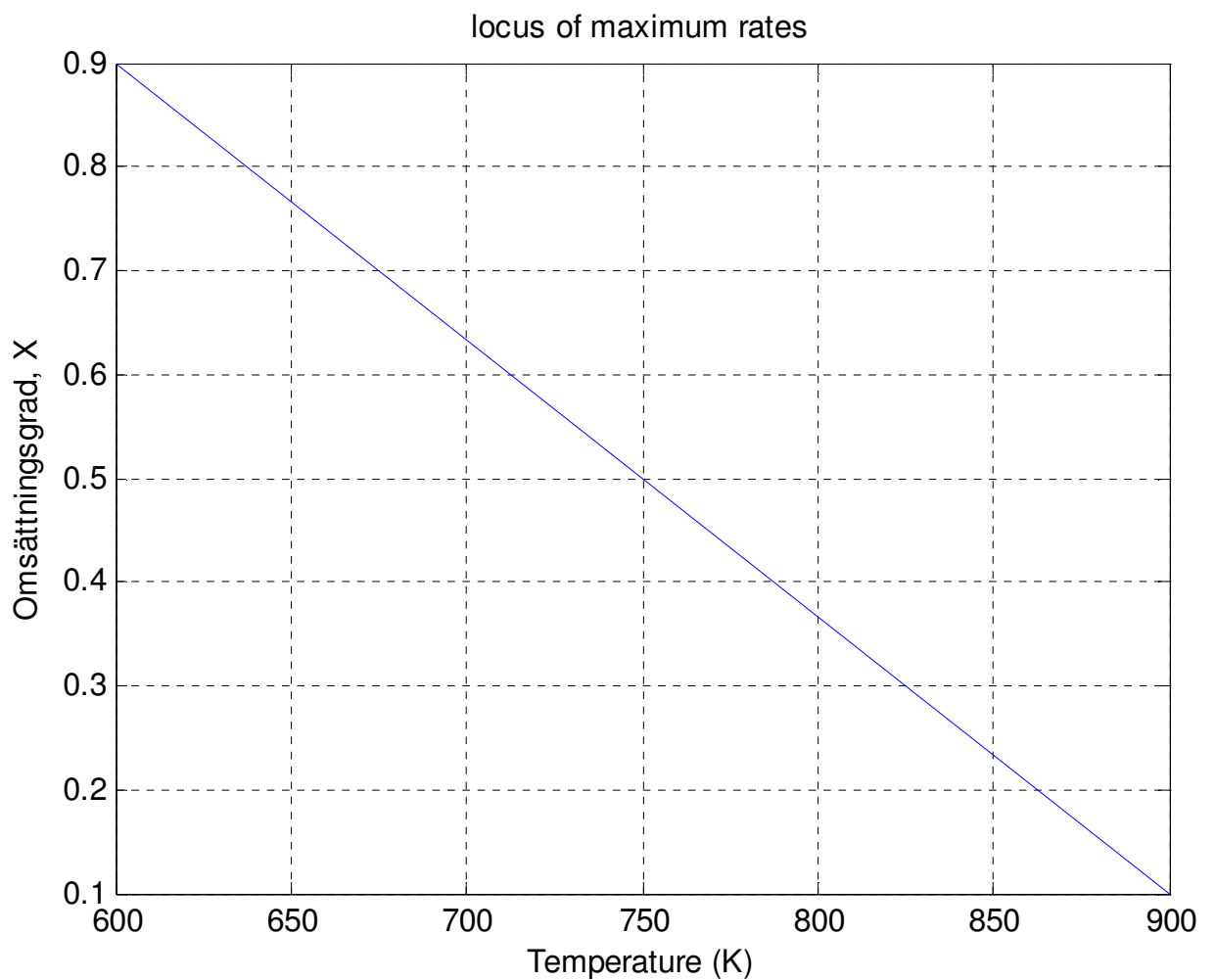
Värmekapaciteten för ämne A: 63 J/(mol K)

Värmekapaciteten för ämne B: 58 J/(mol K)

Värmekapaciteten för ämne I: 71 J/(mol K)

Reaktionsvärmets $\Delta H = -80$ kJ/mol

Vad blir omsättningsgraden efter reaktor 1, 2 och 3?



Uppgift 5 (6 poäng)

- a) I en heterogen katalytisk process (gasfas-fastfas) finns reaktanterna i gasfas och katalysatorn är ett fast material. Beskriv de olika transportstegen som kan förekomma. Rita gärna en liten enkel figur för att ytterligare illustrera. (2p)
- b) Rita en schematisk graf med $\ln(k_{eff})$ på y-axel och $1/T$ på x-axel. Beskriv hur grafen är uppbyggd och inom vilka interval olika masstransportmotstånd dominerar. (2p)
- c) Du har en ensam sfärisk partikel där filmtransportmotståndet är viktigt. $A \rightarrow B$ och reaktionshastigheten är första ordningen med avseende på A på ytan. Ta fram ett uttryck för reaktionshastigheten som funktion av koncentrationen i gasbulken. Motivera! (2p)

$$7. \frac{dN_A}{dt} = F_{Af} - F_A - k_{CA} \cdot V_r$$

$$\frac{d(C_A \cdot V_r)}{dt} = C_{Af} \cdot q - C_A \cdot q - k_{CA} V_r$$

V_r konst.

$$V_r \frac{dC_A}{dt} = C_{Af} \cdot q - C_A \cdot q - k_{CA} \cdot V_r$$

$$\tau = \frac{V_r}{q}$$

$$\tau \frac{dC_A}{dt} = C_{Af} - C_A - k_{CA} \cdot \tau$$

$$\frac{dC_A}{dt} = \frac{C_{Af}}{\tau} - \frac{C_A}{\tau} - k_{CA}$$

$$\int_{C_{Ai}=C_{Af}}^{C_A} \frac{dC_A}{\frac{1}{\tau}(C_{Af} - C_A) - k_{CA}} = \int_0^t dt$$

$$\int_{C_{Af}}^{C_A} \frac{dC_A}{C_{Af} - C_A(1 + k\tau)} = \frac{1}{\tau} \cdot t$$

(2)

$$\left[\frac{1}{1+k\tau} \ln \left(C_{Af} - C_A(1+k\tau) \right) \right]_{C_{Af}}^{C_A} = \frac{t}{\tau}$$

$$\frac{-t \cdot (1+k\tau)}{\tau} = \ln \frac{C_{Af} - C_A(1+k\tau)}{C_{Af} - C_{Af}(1+k\tau)} = \ln \frac{C_{Af} - C_A(1+k\tau)}{-C_{Af} \cdot k\tau}$$

$$\frac{C_{Af} - C_A(1+k\tau)}{-C_{Af} \cdot k\tau} = \exp\left(-\frac{t(1+k\tau)}{\tau}\right)$$

$$-C_{Af} + C_A(1+k\tau) = C_{Af} k\tau \cdot \exp\left(-\frac{t(1+k\tau)}{\tau}\right)$$

$$C_A(1+k\tau) = C_{Af} + C_{Af} \cdot k\tau \cdot \exp\left(-\frac{t(1+k\tau)}{\tau}\right)$$

$$C_A = \frac{1}{1+k\tau} \left(C_{Af} + C_{Af} \cdot k\tau \cdot \exp\left(-\frac{t(1+k\tau)}{\tau}\right) \right)$$

$$t = 5s \Rightarrow C_A = 320 \text{ mol/m}^3$$

$$t = 10s \Rightarrow C_A = 223 \text{ mol/m}^3$$

Steady state $t \rightarrow \infty \Rightarrow \exp\left(-\frac{t(1+k\tau)}{\tau}\right) \rightarrow 0$

$$\Rightarrow C_A = \frac{C_{Af}}{1+k\tau} = 190 \text{ mol/m}^3$$

(alt. gör en MB steady state)

(3)

$$2) a) \quad k = 0,4 \text{ min}^{-1}$$

$$t \text{ min} \quad C \text{ mg/l}$$

$$\bar{X} = \int_0^{\infty} X(t) \cdot E(t) dt \quad (\text{Segregationsmodellen,})$$

MB for en satsreaktor

$$\frac{dN_A}{dt} = -k C_A \cdot V \quad V \cdot \frac{dC_A}{dt} = -k C_A V$$

$$C_A = C_{AF} \cdot (1-x)$$

$$\frac{d(C_{AF}(1-x))}{dt} = -k \cdot C_{AF}(1-x)$$

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

$$\int_0^x \frac{dx}{1-x} = k \int_0^t dt \quad [-\ln(1-x)]_0^x = kt$$

$$-\ln(1-x) = kt \quad 1-x = \exp(-kt)$$

$$X = 1 - e^{-kt}$$

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

$$\bar{X} = \int_0^{\infty} (1 - e^{-kt}) E(t) dt = \underline{\underline{0,94}}$$

b)

$$Pe = \frac{v \cdot L}{D_A}$$

(4)

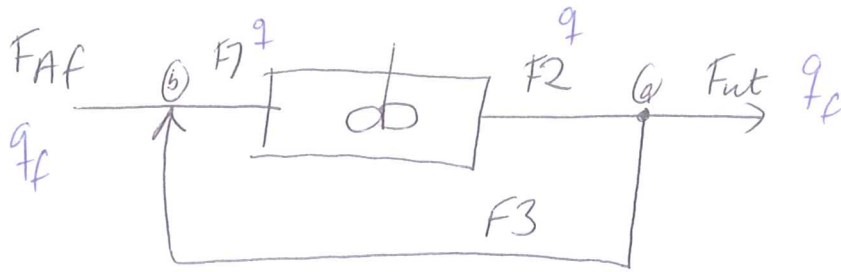
$$q = v \cdot A \quad v = \frac{q}{A} = 0,019 \text{ m/s}$$

$$\Rightarrow Pe = 46,4$$

$$\frac{\sigma^2}{t_m^2} = \frac{2}{Pe} - \frac{2}{Pe^2} \cdot (1 - \exp(-Pe)) = 0,042$$

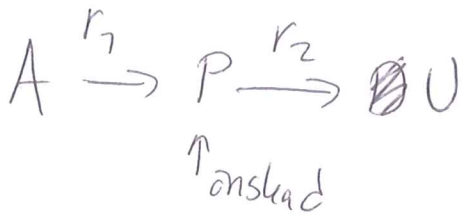
$$n = \frac{\tau^2}{\sigma^2} = \frac{1}{0,042} = \underline{\underline{24 \text{ tanks}}}$$

3.



(5)

$$F_{Af} = q \cdot C_{Af} \Rightarrow q = \frac{F_{Af}}{C_{Af}} = 0,0025 \text{ m}^3/\text{s}$$



$$r_1 = k_1 C_A$$

$$r_2 = k_2 C_B$$

Vätskefas

$$(a) \quad F_{ut} + F_3 = F_2$$

$$(b) \quad F_3 + F_f = F_1$$

30% recirkuleras

$$F_3 = 0,3 \cdot F_2 \Rightarrow 0,3 \cdot F_2 + F_f = F_1 \quad (1)$$

MB över reaktorn

$$F_{A1} - F_{A2} - k_1 C_{A2} \cdot V = 0$$

$$C = \frac{F}{q}$$

$$0,7 \cdot q = q_f \quad q = \frac{q_f}{0,7} = 0,0036$$

$$F_{A1} - F_{A2} - k_1 \cdot \frac{F_{A2}}{q} \cdot V = 0$$

$$F_{A1} = F_{A2} + k_1 \cdot \frac{F_{A2}}{q} \cdot V \quad (2)$$

$$(1) + (2) \quad 0,3 \cdot F_{A2} + F_{Af} = F_{A2} + k_1 \cdot \frac{F_{A2}}{q} \cdot V$$

$$F_{A2} \left(0,3 - 1 - k_7 \frac{V}{q} \right) = -F_{Af} \quad (6)$$

$$\Rightarrow F_{A2} = 0,0752 \text{ mol/s}$$

$$C_{A2} = \frac{F_{A2}}{q} = 21,04 \text{ mol/m}^3$$

MB map P:

$$F_{P1} - F_{P2} + k_7 C_{A2} \cdot V - k_2 C_{P2} \cdot V = 0$$

$$F_{P1} - F_{P2} + k_7 C_{A2} \cdot V - k_2 \frac{F_{P2}}{q} \cdot V = 0$$

$$\left\{ \begin{aligned} F_{P1} &= F_{P2} + k_2 \frac{F_{P2}}{q} \cdot V - k_7 C_{A2} \cdot V \end{aligned} \right.$$

$$0,3 F_{P2} + F_{Pf} = F_{P1}$$

$$q = 0$$

$$\rightarrow 0,3 F_{P2} = F_{P2} + k_2 \frac{F_{P2}}{q} \cdot V - k_7 C_{A2} \cdot V$$

$$F_{P2} \left(0,3 - 1 - k_2 \frac{V}{q} \right) = -k_7 C_{A2} \cdot V$$

$$F_{P2} = \overset{2,33}{\cancel{2,33}} \text{ mol/s}$$

$$F_{\text{put}} = 0,7 \cdot F_{P2} = \underline{\underline{1,63 \text{ mol/s}}}$$

4. Värmebalans

(7)

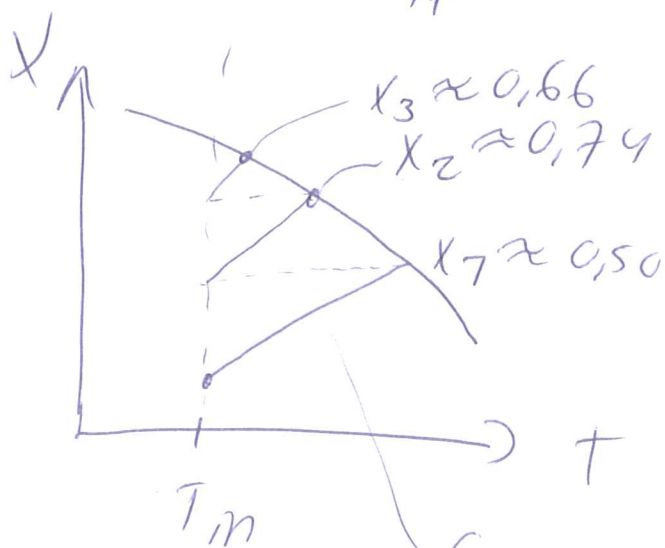
$$\sum F_{if} \int_{T_{ref}}^{T_m} c_{p,i} dT - \sum F_{i'} \int_{T_{ref}}^{T_{ut}} c_{p,i'} dT + F_{Af} X_A (-\Delta H) = 0$$

Välj $T_{ref} = T_{ut}$

$$\sum F_{if} \int_{T_{ut}}^{T_m} c_{p,i} dT = F_{Af} X_A \Delta H$$

$$\sum F_{if} c_{p,i} (T_m - T_{ut}) = F_{Af} X_A \Delta H$$

$$X_A = \frac{-\sum F_{if} c_{p,i} (T - T_m)}{F_{Af} \cdot \Delta H}$$



Samma lutning på de 3 driftlinjerna.