

KEMISK REAKTIONSTEKNIK

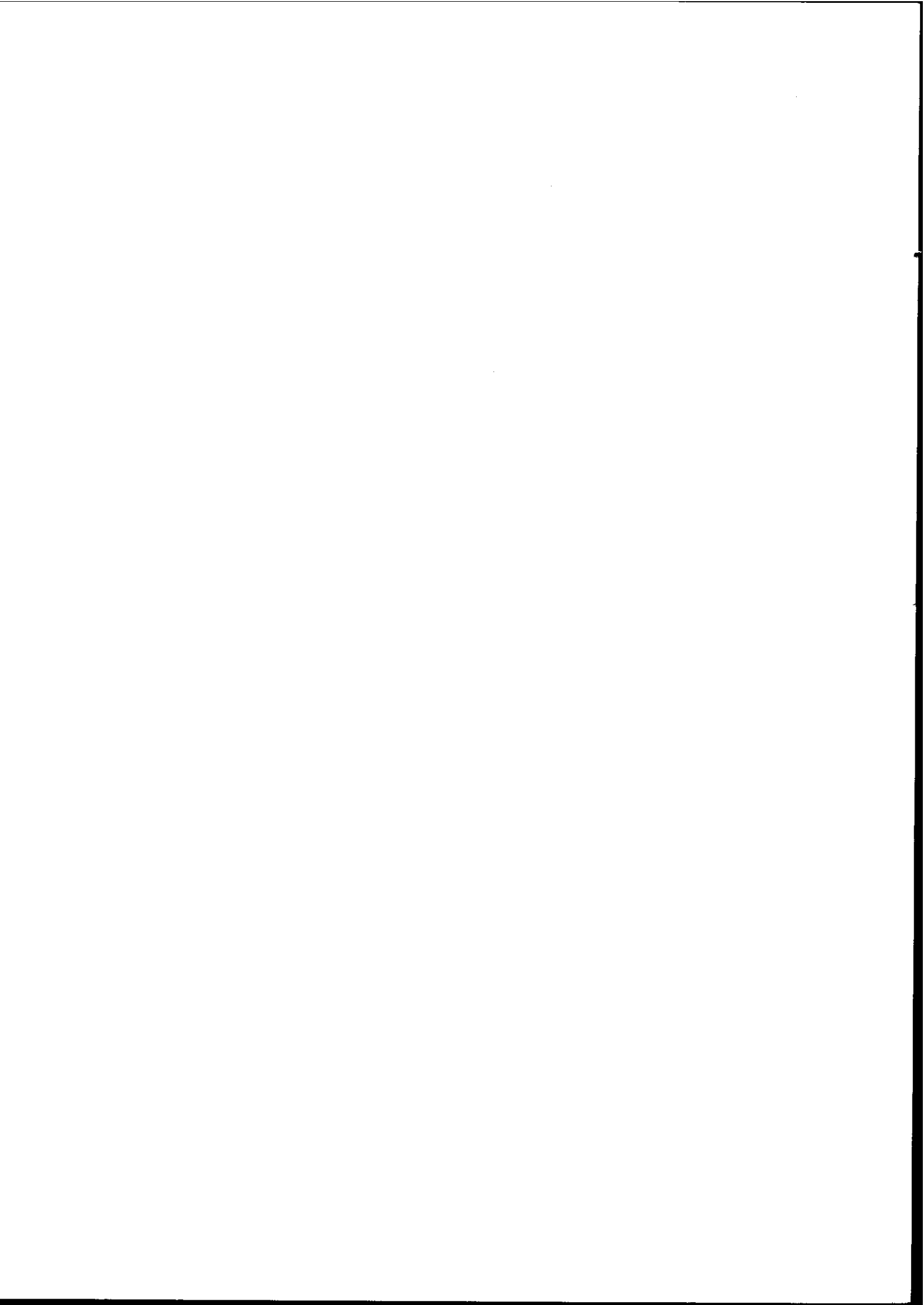
ÖVN

KF

1996

SIDOR: 73

PRIS: ~~20/30 kr~~ 35 kr

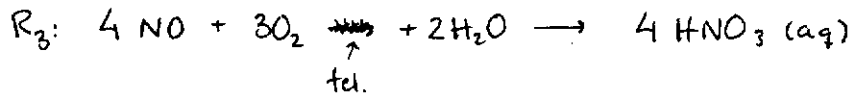
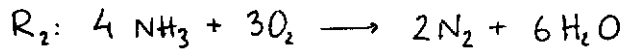
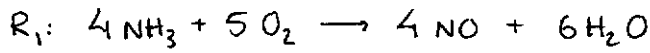
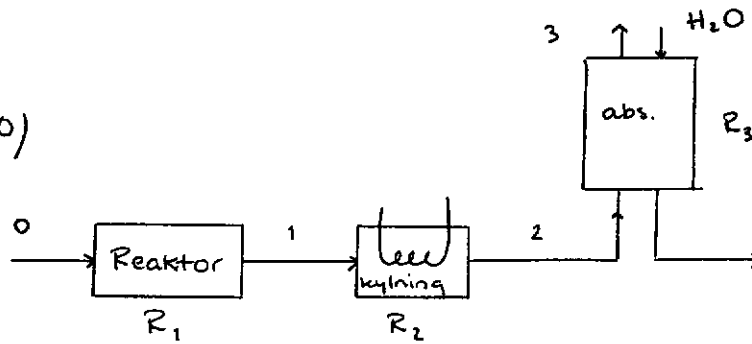


KRT-räknedrningar

960312
R81

1.10)

Rö1:1



Räknebas 100 mol/s in totalt.

	0	1	2	3
NH ₃	8,3	8,3 - 4R ₁ = 0,581	0,581 - 4R ₂ = 0	0
O ₂	0,21(100 - 8,3) = 19,26	19,26 - 5R ₁ = 9,608	9,608 - 3R ₂ = 9,172	9,172 - 3R ₃ = 3,67
N ₂	0,79(100 - 8,3) = 72,44	72,44	72,44 + 2R ₂ = 72,73	72,73
NO	-	4R ₁ = 7,719	7,719	7,719 - 4R ₃ = 0,386
H ₂ O	-	6R ₁ = 11,58	11,58 + 6R ₂ - 12,45	?

M.B. in - ut - reagerat = 0 [mol/s]

$$R_1 = \frac{0,93 \cdot 8,3}{4} = 1,93 \text{ mol/s}$$

$$0,581 - 4R_2 = 0 \Rightarrow R_2 = 0,145 \text{ mol/s}$$

$$R_3 = \frac{0,95 \cdot 7,719}{4} = 1,83 \text{ mol/s}$$

$$F_{\text{tot},3} = F_{\text{O}_2,3} + F_{\text{N}_2,3} + F_{\text{NO}_3} = 76,79 \text{ mol/s}$$

$$y_{\text{O}_2} = \frac{F_{\text{O}_2,3}}{F_{\text{tot},3}} = 4,8 \%$$

$$y_{\text{N}_2} = 94,7 \%$$

$$y_{\text{NO}} = 0,5 \%$$

V.B över reaktorn

värme in - värme ut \pm värme/lyft. + reaktionsvärme = och = 0

$$\sum F_{j1} \langle c_p \rangle_{T_{ref}}^{T_{in}} (T_{in} - T_{ref}) - \sum F_{j1} \langle c_p \rangle_{T_{ref}}^{T_{ut}} (T_{ut} - T_{ref}) + R_1 (-\Delta H) = 0$$

Välj T_{ref} som den temp. där ΔH är givet.

$$\Rightarrow T_{ref} = 25^\circ\text{C}.$$

$$\Delta H = \sum \nu_j (\Delta H_f^\ominus)_i = 6(-242.0) + 4 \cdot 90.0 - 5 \cdot 0 - 4 \cdot (-45.6) = -909.6 \text{ kJ/mol}$$

H_2O NO O_2 NH_3

Uppskatta T_{ut} :

anta: $\sum F_{j0} \langle c_p \rangle_{T_{ref}}^{T_{in}} \approx \sum F_{j1} \langle c_p \rangle_{T_{ref}}^{T_{ut}}$

$$\Rightarrow T_{in} - T_{ut} = \frac{-R_1(-\Delta H)}{\sum F_{j1} \langle c_p \rangle_{T_{ref}}^{T_{in}}} = \frac{-R_1(-\Delta H)}{F_{tot} \langle c_p \rangle_{T_{ref}}^{T_{in}} (\text{N}_2)} \Rightarrow T_{ut} = 1180^\circ\text{C}$$

Gissa $T_{ut} = 1200^\circ\text{C}$ (för att få c_p -värden)

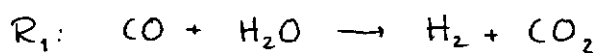
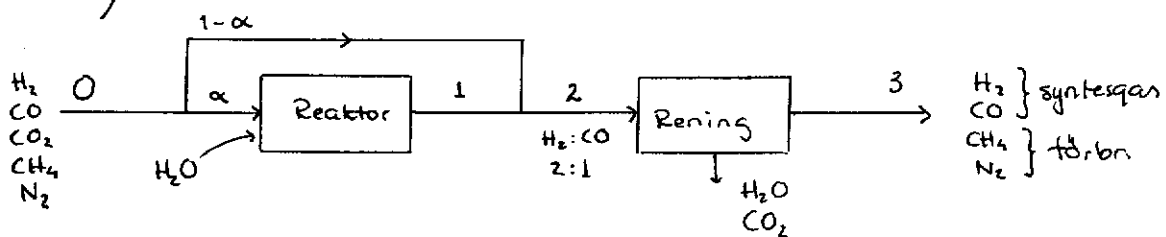
$$\text{V.B.} \Rightarrow T_{ut} = T_{ref} + \frac{R_1(-\Delta H) + \sum F_{j0} \langle c_p \rangle_{T_{ref}}^{T_{in}} (T_{in} - T_{ref})}{\sum F_{j1} \langle c_p \rangle_{T_{ref}}^{T_{ut}}}$$

$$\Rightarrow T_{ut} = 1083^\circ\text{C}$$

Gissa $T_{ut} = 1100^\circ\text{C} \Rightarrow$ andra värden på $\langle c_p \rangle$

$$\Rightarrow \underline{T_{ut} = 1093^\circ\text{C}}$$

1.13)



Räknebas: 100 mol/s

	0	1	2	3
H ₂	46.2	$\alpha \cdot 46.2 + R_1$	$46.2\alpha + R_1 + 46.2(1-\alpha) =$ $= 46.2 + R_1$	$46.2 - R_1$
CO	46.7	$\alpha \cdot 46.7 - R_1$	$46.7 - R_1$	$46.7 - R_1$
CO ₂	4.6	$\alpha \cdot 4.6 + R_1$	$4.6 + R_1$	0
CH ₄	0.4	$\alpha \cdot 0.4$	0.4	0.4
N ₂	2.1	$\alpha \cdot 2.1$	2.1	2.1
Tot.	100	$100\alpha + R_1$	$100 + R_1$	95.4

M.B.: in - ut - reagerat = ack = 0

α, R_1 :

efter reaktorn 2% CO

$$\frac{46.7\alpha - R_1}{100\alpha + R_1} = 0,02 \quad (1)$$

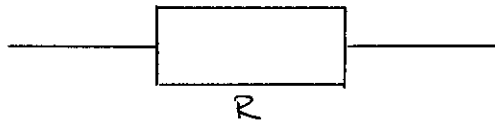
$$\frac{46.2 + R_1}{46.7 - R_1} = 2 \quad (2)$$

(2) $\Rightarrow R_1 = 15,73 \text{ mol/s}$ ins i (1) $\Rightarrow \alpha = 0,359$

$1 - \alpha = 0,641 = \underline{64,1\%}$ i förbi flödet

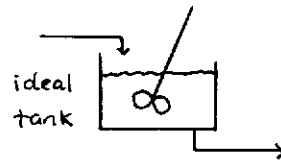
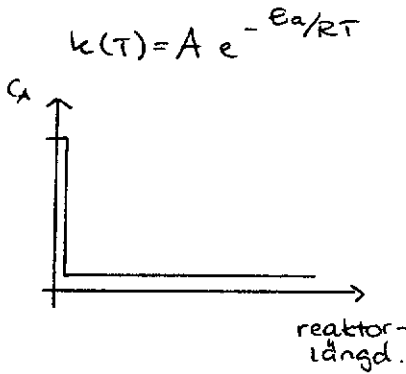
föroreningshalt (CH₄ + N₂) = $\frac{0,4 + 2,1}{95,4} = \underline{2,62\%}$

TANKREAKTORN

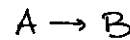
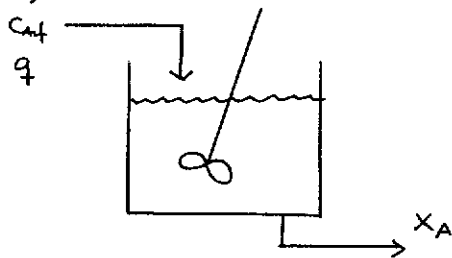


max r
max produkt

$$r = k(T) C_A^n \cdot C_B^m$$



2.4)



$r = k \cdot C_A$

$k = 0.18^{-1}$

$\rho = \text{konst.}$

$q = \frac{\dot{m}}{\rho} = \text{konst.}$

M.B. m.p A (mol/s)

$$q \cdot C_{Af} - q \cdot C_A - k \cdot C_A \cdot V_r = 0$$

$$C_A = C_{Af} (1 - x_A)$$

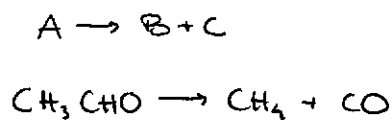
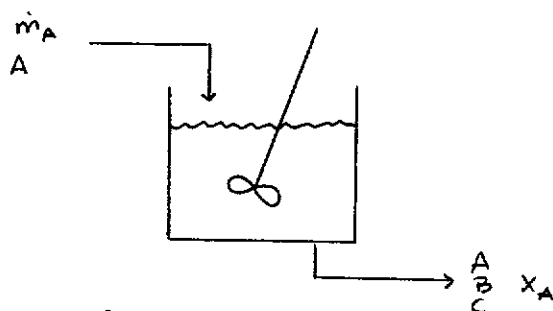
$x_A = \text{oms. uttrycket är giltigt om } \rho = \text{konst.}$

$$\Rightarrow V_r = \frac{q \cdot C_{Af} - q \cdot C_{Af} (1 - x_A)}{k C_{Af} (1 - x_A)} = \frac{q (1 - 1 + x_A)}{k (1 - x_A)} = \frac{q \cdot x_A}{k (1 - x_A)}$$

$$\Rightarrow \underline{V_r = 0.16 \text{ m}^3}$$

Har man en första ordningens reaktion så har ingående konc. ingen betydelse.

2.10)

SÖLut: V_r

$$r = k \cdot C_A^2$$

M.B m.a.p. A (mol/s)

$$F_{A\text{in}} - F_{A\text{out}}(1-x_A) - k \cdot C_A^2 \cdot V_r = 0$$

$$\Rightarrow V_r = \frac{F_{A\text{in}} \cdot x_A}{k \cdot C_A^2} \quad (1)$$

$$C_A = \frac{n_A}{V} = \frac{P_A}{R \cdot T} = y_A \cdot \frac{P}{RT} = \frac{F_A}{F_{\text{tot}}} \cdot \frac{P}{RT}$$

M.B

	in	ut	reagerat	= 0	
A	$F_{A\text{in}}$	$F_{A\text{out}}(1-x_A)$	$-R$	$\cdot 0$	$\rightarrow R = F_{A\text{in}} \cdot x_A$
B	0	F_B	$+R$	$\cdot 0$	$F_B = R = F_{A\text{in}} \cdot x_A$
C	0	F_C	$+R$	$\cdot 0$	$F_C = R = F_{A\text{in}} \cdot x_A$
		$\Sigma \Rightarrow F_{\text{tot}}$			

$$F_{\text{tot}} = F_{A\text{in}}(1-x_A) + 2F_{A\text{in}}x_A$$

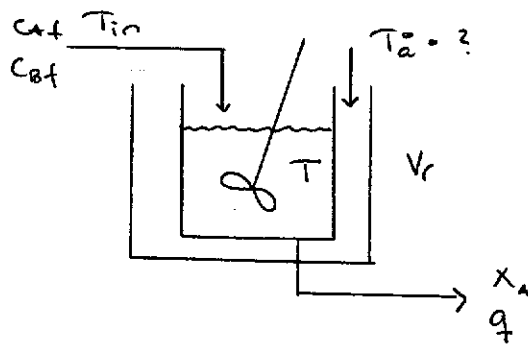
$$F_{A\text{in}} = \frac{\dot{m}}{M} = \frac{0.1}{44}$$

$$V_r = \frac{\frac{\dot{m}}{M} \cdot x_A}{k \left(\frac{F_{A\text{in}}(1-x_A)}{F_{A\text{in}}(1-x_A) + 2F_{A\text{in}}x_A} \cdot \frac{P}{RT} \right)^2} = 34.7 \text{ m}^3$$

$$\underline{V_r = 34.7 \text{ m}^3}$$

2.15)

R02:3



$$r = k(T) C_A \cdot C_B$$

$$R = r \cdot V_r$$

T_a från T ; T från $k(T)$; $k(T)$ från M.B

M.B. in - ut - reagerat = 0

$$A: q \cdot C_{Af} - q \cdot C_A(1 - x_A) - R = 0$$

$$R = q \cdot C_{Af} \cdot x_A$$

$$B: q \cdot C_{Bf} - q \cdot C_B - R = 0$$

$$C_B = \frac{q \cdot C_{Bf} - q \cdot C_{Af} \cdot x_A}{q} = C_{Bf} - C_{Af} \cdot x_A$$

$$C: 0 - q \cdot C_C + R = 0$$

$$C_C = \frac{R}{q} = C_{Af} \cdot x_A$$

$$r = \frac{R}{V_r} = k(T) \cdot C_{Af}(1 - x_A)(C_{Bf} - C_{Af} \cdot x_A) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow k(T) = \frac{q \cdot C_{Af} \cdot x_A}{V_r \cdot C_{Af}(1 - x_A)(C_{Bf} - C_{Af} \cdot x_A)} = 0.0469$$

$$k(T_{in}) = A e^{-E_a/RT_{in}} \Rightarrow A = \frac{k(T_{in})}{e^{-E_a/RT_{in}}}$$

$$k(T) = A e^{-E_a/RT} \Rightarrow -\frac{E_a}{RT} = \ln \frac{k(T)}{A}$$

$$\Rightarrow T = -\frac{E_a}{R \cdot \ln\left(\frac{k(T)}{k(T_{in})/e^{-E_a/RT_{in}}}\right)}$$

$$\rightarrow T = 399.92 \text{ K}$$

Detta är temp. i reaktorn. Ställ upp en V.B för att få reda på vilken temp. ångan måste ha.

V.B. över reaktorn (1/s)

$$\dot{Q}_{in} - \dot{Q}_{out} + R(-\Delta H) + \dot{Q}_w = 0$$

↑
värme.

$$\dot{Q}_{in} = \sum F_j \langle c_{pj} \rangle_{T_{ref}}^{T_{in}} (T_{in} - T_{ref}) = 0$$

$$\{T_{in} = T_{ref}\}$$

$$\dot{Q}_{out} = \sum F_j \langle c_{pj} \rangle_{T_{ref}}^{T_{out}} (T_{out} - T_{ref}) =$$

R02:4

$$= (F_A C_{PA} + F_B C_{PB} + F_C C_{PC}) (T - T_{ref}) =$$

$$= (q C_{Af} (1 - X_A) C_{PA} + q (C_{Bf} - C_{Af} X_A) C_{PB} + q C_{Af} X_A C_{PC}) (T - T_{ref}) = 15963 \text{ J/s}$$

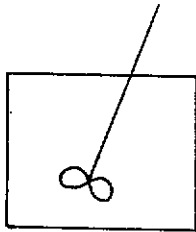
$$R(-\Delta H) = q C_{Af} X_A (-\Delta H) = -24000 \text{ J/s}$$

$$\dot{Q}_v = U \cdot A (T_a - T) = \dot{Q}_{ut} - R(-\Delta H) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \underline{T_a} = T + \frac{\dot{Q}_{ut} - R(-\Delta H)}{U \cdot A} = \underline{227^\circ\text{C}}$$

960329
R03IDEALA SATSREAKTORN

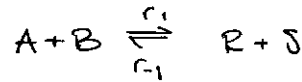
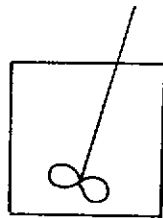
R03:1



ideal \Leftrightarrow samma halter, temp. i hela reaktorn vid samma tid.

$$\text{M.B. } V_r \cdot \frac{dn_j}{dt} = \frac{dn_j}{dt}$$

3.5)



$$r = r_1 - r_{-1} = k_1 C_A C_B - k_{-1} C_S C_R$$

$$\text{I jämvikt} \Rightarrow r_1 = r_{-1} \quad K = \frac{C_R C_S}{C_A C_B} = \frac{k_1}{k_{-1}} \Rightarrow k_{-1} = \frac{k_1}{K}$$

M.B. m.a.p. B (mol/s)

$$-r \cdot V_r = \frac{dn_B}{dt} = \frac{dc_B}{dt} V_r$$

uttryck $c_i(t)$ som fun av $x_B(t)$

$$n_B = n_{B0} (1 - x_B) ; \quad c_B = c_{B0} (1 - x_B)$$

$$c_A = c_{A0} - c_{B0} x_B \quad c_S = c_{S0} + c_{B0} x_B$$

$$c_R = 0 + c_{B0} x_B$$

$$C_{A0} = \frac{n_{A0}}{V_r} = \frac{y_{A0} n_{tot0}}{V_r} = \frac{y_{A0} \cdot n_{tot0}}{m_{tot} / \rho_{tot}} = \frac{y_{A0} \cdot \rho_{tot}}{M_{tot}}$$

$$M_{tot} = 0.15 \cdot 60 + 0.30 \cdot 46 + 0.55 \cdot 18 = 32.7 \text{ kg/kmol}$$

$$\Rightarrow C_{A0} = 9.174 \text{ kmol/m}^3$$

$$C_{B0} = y_{B0} \frac{\rho_{tot}}{M_{tot}} = 4.587 \text{ kmol/m}^3$$

$$C_{S0} = 16.82 \text{ kmol/m}^3$$

$$-r = \frac{d(C_{B0}(1-x_B))}{dt} = -C_{B0} \frac{dx_B}{dt}$$

$$\int_{x_{B0}}^{x_B(t)} \frac{C_{B0}}{r} dx_B = \int_0^t dt \Rightarrow$$

$$t = \int_0^{x_B} \frac{C_{B0}}{k(C_{A0} - C_{B0}x_B)(C_{B0}(1-x_B)) - \frac{k-1}{k} C_{B0}x_B(C_{S0} + C_{B0}x_B)} dx_B$$

$$t = \int_0^{x_B} \frac{1}{ax_B^2 + bx_B + c} dx_B \quad \text{l\u00f6ses u.h.a. \beta!}$$

$$\Rightarrow t = 2.185 \text{ h}$$

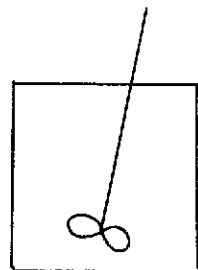
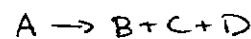
$$n_{\text{cykler/dygn}} = \frac{24}{2.185 + 1} = 7.535 \text{ cykler/dygn}$$

$$m_R = \frac{50}{7.535} \text{ ton/sats} = 6.636 \text{ ton R/sats}$$

$$C_R = C_{B0} \cdot x_{B\text{slut}} = \frac{n_R}{V_r} = \frac{m_R / M_R}{V_r}$$

$$\Rightarrow \underline{V_r} = \frac{m_R}{M_R \cdot C_{B0} \cdot x_{B\text{slut}}} = \underline{46.97 \text{ m}^3}$$

3.7)

 V_r $P(t)$ 

$$r = k \cdot C_A$$

$$P(t) = \frac{n_{tot}(t) \cdot R \cdot T}{V_r}$$

$$n_A = n_{A0}(1 - x_A(t))$$

$$n_C = 0 + n_{A0} x_A(t)$$

$$n_B = 0 + n_{A0} x_A(t)$$

$$n_D = 0 + n_{A0} x_A(t)$$

$$\Rightarrow n_{tot} = n_{A0}(1 + 2x_A(t)) \quad (\text{summera!})$$

M.B. map A (mol/s)

$$-k \cdot c_A \cdot V_r = \frac{dn_A}{dt} \Rightarrow -k \cdot n_A - \frac{dn_A}{dt}$$

$$-\int_0^t k \cdot dt = \int_{n_{A0}}^{n_A(t)} \frac{dn_A}{n_A} \quad -k \cdot t = \ln \frac{n_A(t)}{n_{A0}} \quad e^{-kt} = \frac{n_A(t)}{n_{A0}}$$

$$\Rightarrow n_A(t) = n_{A0} e^{-kt} \quad n_A = n_{A0} (1 - x(t))$$

$$n_{A0} (1 - x_A(t)) = n_{A0} e^{-kt}$$

$$x_A(t) = 1 - e^{-kt}$$

$$P(t) = \frac{n_{A0} (1 + 2(1 - e^{-kt})) \cdot R \cdot T}{V_r} \quad \text{låt } t \rightarrow \infty$$

$$P_\infty = \frac{n_{A0} (1 + 2(1 - 0)) \cdot R \cdot T}{V_r} \Rightarrow n_{A0} = \frac{P_\infty \cdot V_r}{3RT}$$

$$\Rightarrow P(t) = \frac{P_\infty \cdot V_r}{3RT} (1 + 2(1 - e^{-kt})) \cdot \frac{R \cdot T}{V_r}$$

$$\frac{P(t)}{P_\infty} = 1 - \frac{2}{3} e^{-kt} \Rightarrow \frac{2}{3} e^{-kt} = 1 - \frac{P(t)}{P_\infty}$$

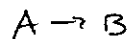
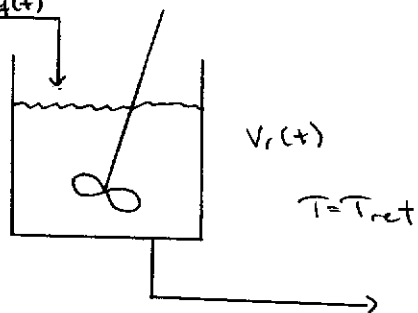
$$\Rightarrow kt = -\ln \frac{3}{2} \left(1 - \frac{P(t)}{P_\infty}\right)$$

$$k = \underbrace{-\ln \frac{3}{2} \left(1 - \frac{P(t)}{P_\infty}\right)}_{\alpha} / t$$

Plotta α mot t k fås som lutningen!

$$\underline{k = 4.4 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}}$$

3.10) $q(t)$



$$r = k \cdot c_A$$

V.B över reaktorn (1/s)

$in + \text{reaktionsvärme} = 0$

$q(t) \cdot \rho \cdot c_p (T_{avg} - T_{ref}) + r(-\Delta H) \cdot V_r = 0$

M.B totalt (m³/s)

$q(t) = \frac{dV_r}{dt} \quad in = ach$

M.B m.a.p A (mol/s)

$-k \cdot c_A \cdot V_r(t) = \frac{dn_A}{dt} = \frac{d(c_A V_r)}{dt} = c_A \frac{dV_r}{dt} + V_r \frac{dc_A}{dt}$

$-k \cdot c_A \cdot V_r(t) = V_r \frac{dc_A}{dt} + c_A \cdot \frac{r \cdot \Delta H \cdot V_r}{\rho \cdot c_p \cdot \Delta T}$
 $\frac{dV_r}{dt} = q(t)$

$-k \cdot c_A = \frac{dc_A}{dt} + c_A \cdot \frac{k \cdot \Delta H}{\rho \cdot c_p \cdot \Delta T} = \alpha$

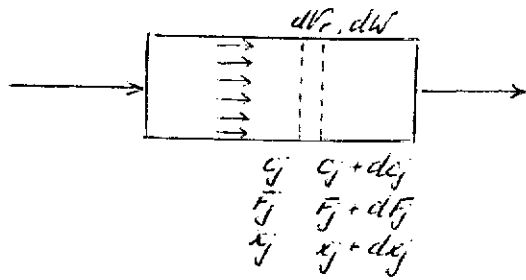
$\frac{dc_A}{dt} = -k(c_A + \alpha \cdot c_A^2) \Rightarrow \int_{c_{A0}}^{c_A(t)} \frac{1}{-(kc_A + \alpha c_A^2)} dc_A = \int_0^t dt$

$\Rightarrow t = \dots$ löses m.h.a. $\beta!$

$-k \cdot t = \left[\ln \frac{\alpha c_A + 1}{c_A} \right]_{c_{A0}}^{c_A} \Rightarrow -k \cdot t = \ln \left(\frac{(\alpha c_A + 1) \cdot c_{A0}}{c_A (\alpha c_{A0} + 1)} \right)$

$e^{-kt} = \frac{\alpha c_A + 1}{c_A} \cdot \frac{c_{A0}}{\alpha c_{A0} + 1}$

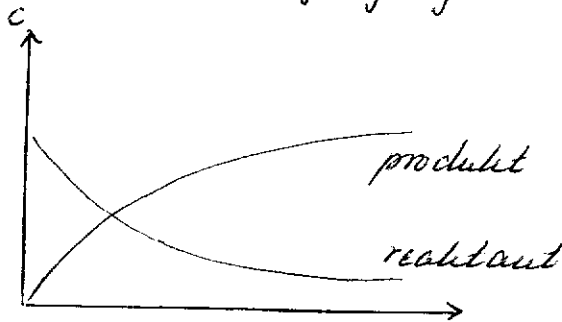
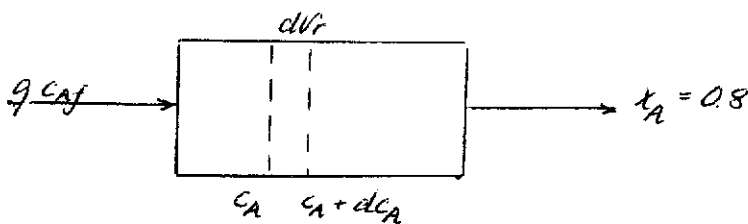
$c_A = \frac{e^{-kt} c_{A0}}{\alpha c_{A0} + 1 - e^{-kt} \cdot c_{A0} \cdot \alpha} = \{t=2h\} = \underline{\underline{308,5 \text{ mol/m}^3}}$

Ideala tubreaktorKRT räkneöv.
960419

• Plugflöde

⇒ konc, T samma i ett
radiellt tvärsnitt
Gradient försummas

• Försummar axiell omblandning

• G_j, F_j ger något lättare
balanser än x_j .43Vätskefas, $g = \text{konst}$ Sökt: V_r MB map A över ett litet volymselement dV_r [mol/s]:

$$g c_A - g(c_A + dc_A) - r dV_r = 0$$

$$\Rightarrow -g dc_A = r dV_r$$

Da $dV_r \rightarrow 0$ $r \rightarrow k c_A$

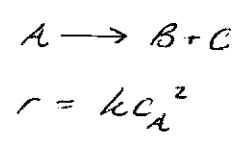
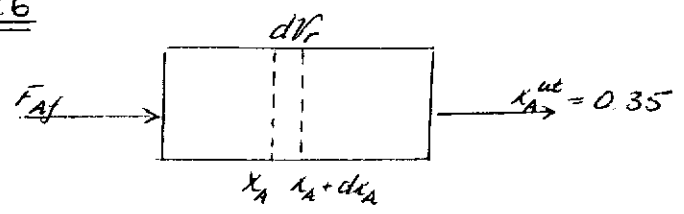
$$\Rightarrow -g dc_A = k c_A dV_r$$

$$-\int_{c_A}^{c_A(1-x_A)} \frac{dc_A}{c_A} = \int_0^{V_r} \frac{k}{g} dV_r$$

$$-\left[\ln c_A \right]_{c_A}^{c_A(1-x_A)} = \frac{k}{g} V_r$$

$$\text{Da fäs } V_r = -\frac{g}{k} \ln\left(\frac{c_A(1-x_A)}{c_A}\right) = \left\{ \text{insättu. siffror} \right\} = \underline{0.064 \text{ m}^3}$$

4.6



Sökt: Reaktorlängden L , fas ut V_r

MB map A över volumenelementet dV_r [mol/s]

$$F_{Aj}(1-x_A) - F_{Aj}(1-(x_A+dx_A)) - r dV_r = 0$$

$$F_{Aj} dx_A = r dV_r \quad (1)$$

lat $dV_r \rightarrow 0$ $r \rightarrow kC_A^2$

$$C_A = \frac{P_A}{RT} = y_A \frac{P}{RT} = \frac{F_A}{F_{tot}} \frac{P}{RT} = \frac{F_{Aj}(1-x_A)}{F_{tot}} \frac{P}{RT}$$

Sök F_{tot} :

$$F_A = F_{Aj}(1-x_A)$$

$$F_B = F_{Aj}x_A$$

$$F_C = F_{Aj}x_A \Rightarrow F_{tot} = F_{Aj}(1+x_A)$$

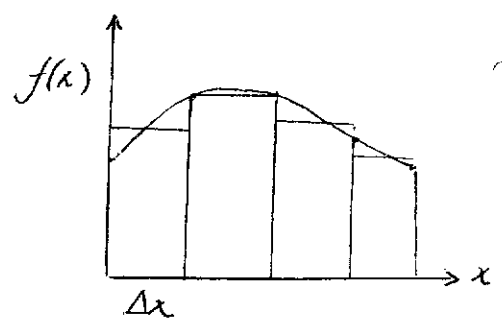
Insätt i (1)

$$F_{Aj} dx_A = k \cdot \frac{F_{Aj}^2 (1-x_A)^2}{F_{Aj}^2 (1+x_A)^2} \left(\frac{P}{RT}\right)^2 dV_r$$

$$\int_0^{x_A^{ut}} \frac{(1+x_A)^2}{(1-x_A)^2} dx_A = \int_0^{V_r} \frac{k}{F_{Aj}} \left(\frac{P}{RT}\right)^2 dV_r$$

- \int lösas mha
- tabell (β)
 - numeriskt mha dator
 - \Rightarrow • numeriskt för hand

Numeriskt för hand: Trapetsmetoden



$$x \quad f(x) = \frac{(1+x)^2}{(1-x)^2}$$

0	1
0.05	1.22
0.10	1.49
0.15	1.83
0.20	2.25
0.25	2.78
0.30	3.45
0.35	4.37

$$\Delta x = 0.05$$

$$J = \Delta x \left[\frac{f(x_1) + f(x_2)}{2} + \frac{f(x_2) + f(x_3)}{2} + \dots \right] =$$

$$= \Delta x \left[\frac{1}{2} f(x_1) + f(x_2) + \dots + \frac{1}{2} f(x_n) \right]$$

Da förs $J = 0.784$

Jämför m. matlab: 0.7807

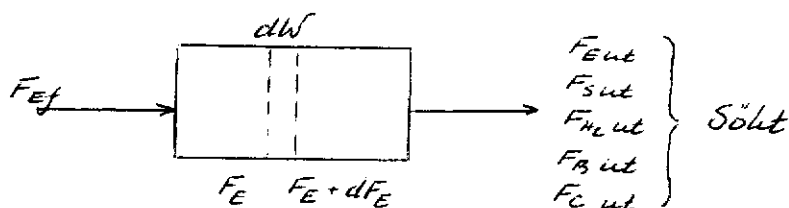
$$V_r = \frac{F_A J}{k} \left(\frac{RT}{P} \right)^2 = 0.02775$$

$$V_r = \frac{\pi d^2 L}{4} \Rightarrow L = \frac{4}{\pi d^2} V_r = \underline{\underline{3.55 \text{ m}}}$$

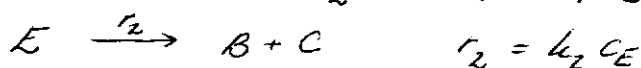
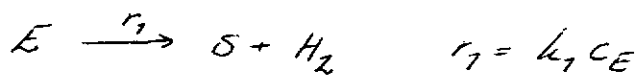
Med J enl. matlab: $L = 3.53 \text{ m}$

Anm. Lättare att räkna med F_A

4.7



$$W = 325 \text{ kg}$$



MB map E över masselementet dW [mol/s]

$$F_E - (F_E + dF_E) - (r_1 + r_2) dW = 0$$

$$- dF_E - (r_1 + r_2) dW \quad (7)$$

låt $dW \rightarrow 0$

$$r_1 \rightarrow k_1 C_E$$

$$r_2 \rightarrow k_2 C_E$$

$$C_E = \frac{P_E}{RT} = y_E \frac{P}{RT} = \frac{F_E}{F_{tot}} \frac{P}{RT}$$

Sök ett uttryck för F_{tot} !

$$F_{tot} = F_E + F_S + F_{H_2} + F_B + F_C$$

$$F_S + F_B = F_{Ej} - F_E \quad \left\{ \text{Det som förbräcks av E} \right\}$$

$$F_{H_2} = F_S, \quad F_C = F_B$$

$$\text{Detta ger } F_{tot} = F_E + 2(F_{Ej} - F_E) = 2F_{Ej} - F_E$$

Susättning: (1)

$$-dF_E = (k_1 + k_2) \frac{F_E}{2F_{Ej} - F_E} \cdot \frac{P}{RT} dW$$

$$\int_{F_{Ej}}^{F_{Eut}} \left(2F_{Ej} \frac{1}{F_E} - 1 \right) dF_E = - \int_0^W (k_1 + k_2) \frac{P}{RT} dW$$

$$\left[2F_{Ej} \ln F_E - F_E \right]_{F_{Ej}}^{F_{Eut}} = - (k_1 + k_2) \frac{P}{RT} W$$

Susättning av integrationsgränser:

$$2F_{Ej} \ln F_{Eut} - F_{Eut} - 2F_{Ej} \ln F_{Ej} + F_{Ej} = - (k_1 + k_2) \frac{P}{RT} W$$

$$2F_{Ej} \ln F_{Eut} - F_{Eut} = 2F_{Ej} \ln F_{Ej} - F_{Ej} - (k_1 + k_2) \frac{P}{RT} W = -1.69$$

VL måste lösas iterativt för att få fram F_{Eut}

$$0 < F_{Eut} < 2$$

$$\text{Gissa } F_{Eut} = 1 \Rightarrow VL = -1$$

$$0.8 \quad -1.69 \quad \text{OK!}$$

{ Du kan problemet lösas med Newton-Raphson }

$$F_{Eut} = 0.80 \text{ mol/s}$$

Sök F_S , F_{H_2} , F_B och F_C

$$\text{Total MB} \quad \text{in} - \text{ut} - \text{reagerat} = 0$$

$$\text{imp E:} \quad F_{Ej} - F_{Eut} - (R_1 + R_2) = 0$$

$$S: \quad 0 - F_{Sut} + R_1 = 0$$

$$H_2: \quad 0 - F_{H_2ut} + R_1 = 0$$

$$B: \quad 0 - F_{But} + R_2 = 0$$

$$C: \quad 0 - F_{Cout} + R_2 = 0$$

$$R_1 + R_2 = F_{Ej} - F_{Eut}$$

$$R_1 = \int_0^{V_r} r_1(V_r) dV_r = k_1 \int_0^{V_r} c_E(V_r) dV_r$$

$$R_2 = \int_0^{V_r} r_2(V_r) dV_r = k_2 \int_0^{V_r} c_E(V_r) dV_r$$

Da fås $\frac{R_1}{R_2} = \frac{k_1}{k_2} \Rightarrow R_1 = R_2 \cdot \frac{k_1}{k_2}$

$$\left(\frac{k_1}{k_2} + 1\right) R_2 = F_{Ej} - F_{Eut} \Rightarrow R_2 = \frac{k_2}{k_1 + k_2} (F_{Ej} - F_{Eut})$$

$$R_1 = \frac{k_1}{k_1 + k_2} (F_{Ej} - F_{Eut})$$

Insättning av siffror ger $R_1 = 0.97 \text{ mol/s}$
 $R_2 = 0.23 \text{ mol/s}$

Svar: $F_{Eut} = 0.80 \text{ mol/s}$

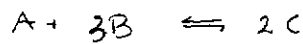
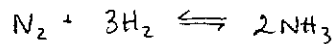
$$F_{sut} = F_{H_2ut} = 0.97 \text{ mol/s}$$

$$F_{but} = F_{cut} = 0.23 \text{ mol/s}$$

ADIABATISKA JÄMVIKTSPROCESSER

960423

5.10)

1. Konstruera jämviktskurvan

$$x = x_A$$

$$\left. \begin{array}{l} \text{givet } K_p(T) \\ x(K_p) \end{array} \right\} x(T)$$

$$K_p = \frac{P_C^2}{P_A \cdot P_B^3} = \frac{y_C^2 P^2}{y_A \cdot P \cdot y_B^3 P^3} = \frac{\left(\frac{F_C}{F_{\text{tot}}}\right)^2 \cdot P^2}{\frac{F_A}{F_{\text{tot}}} \cdot P \cdot \left(\frac{F_B}{F_{\text{tot}}}\right)^3 \cdot P^3} = \frac{F_{\text{tot}}^2}{P^2} \cdot \frac{F_C^2}{F_A \cdot F_B^3}$$

uttryck flödena i x_A :

$$F_A = F_{A1}(1 - x_A)$$

$$F_B = F_{B1} - 3F_{A1}x_A$$

$$F_C = F_{C1} + 2F_{A1}x_A$$

$$F_I = F_{A1} + F_{CH41}$$

$$F_{\text{tot}} = F_{A1}(1 - 2x) + F_{B1} + F_{C1} + F_{A1} + F_{CH41} =$$

$$= 100 - 47,25x$$

Räknebas: 100 mol/s totalt in

$$F_{C1} = 4 \text{ mol/s}$$

$$F_{A1} = 0,5 \text{ mol/s}$$

$$F_{CH41} = 1 \text{ mol/s}$$

$$F_{A1} + F_{B1} = 100 - 5,5 = 94,5 \text{ mol/s} \quad \left. \begin{array}{l} \\ \\ \end{array} \right\} 4F_{A1} = 94,5 \text{ mol/s}$$

$$F_{B1} = 3 \cdot F_{A1}$$

$$F_{A1} = 23,625 \text{ mol/s}$$

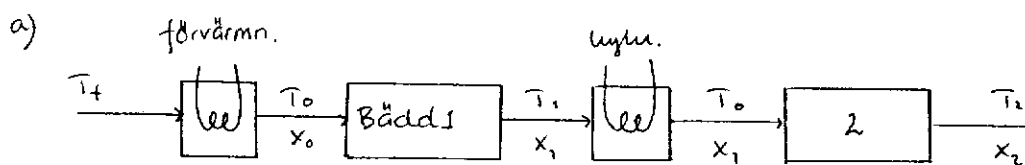
$$F_{B1} = 70,875 \text{ mol/s}$$

$$\Rightarrow K_p = \frac{(4 + 47,25x)^2}{23,625(1-x)(70,875 - 70,875x)^3} \cdot \frac{(100 - 47,25x)^2}{P^2} \quad (1)$$

$$\ln K_p = -20,82 + \frac{11301}{T} \Rightarrow T = \frac{11301}{\ln K_p + 20,82} \quad (2)$$

x	$K_p(x)$ ur (1)	$T(K_p)$ ur (2)
0	⋮	⋮
⋮	⋮	⋮
⋮	⋮	⋮
<1	⋮	⋮

→ jämviktskurva

2. Konstruera driftslinjerV.B (1/s)

$$\dot{Q}_{in} - \dot{Q}_{out} + R(-\Delta H) = 0$$

Bädd 1:

$$\dot{Q}_{in} = \sum F_{ij} c_{pj} (T_0 - T_{ref}) = \left\{ \begin{array}{l} T_0 = 430^\circ\text{C} \\ T_{ref} = 400^\circ\text{C} \end{array} \right\} = \dots = 9.1579 \cdot 10^4 \text{ W}$$

$$\dot{Q}_{out}(x) = \sum F_{ij} c_{pj} (T - T_{ref}) = \dots = \underbrace{(3052.64 - 583.54x)(T - T_{ref})}_{\text{allmän formel.}} \quad (3)$$

$$R(-\Delta H) = F_{Af} x (-\Delta H) = 2.244 \cdot 10^6 x$$

ins. i V.B. \Rightarrow

$$9.1579 \cdot 10^4 - (3052.64 - \underbrace{583.54x}_{\text{försummas}})(T - T_{ref}) + 2.244 \cdot 10^6 x = 0$$

lös ut x som fun av T .

$$\Rightarrow x = \frac{-9.1579 \cdot 10^4 - 3052.64 \cdot T_{ref}}{2.244 \cdot 10^6} + \frac{3052.64}{2.244 \cdot 10^6} \cdot T$$

$$x = 1.36 \cdot 10^{-3} T - 0.585$$

Lägg in i x, T -diagram tillsammans med jämviktshurvan. se sid R05:5

Bädd 2

$$(3) \Rightarrow \dot{Q}_{in} = (3052.64 - 583.54 \cdot 0.146)(430 - 400) = 8.9023 \cdot 10^4 \text{ W}$$

$$\dot{Q}_{out} = (3052.64 - 583.54x)(T - T_{ref})$$

$$\begin{aligned} R(-\Delta H) &= (F_{Af}(1-x_1) - F_{Af}(1-x))(-\Delta H) = F_{Af}(x-x_1)(-\Delta H) = \\ &= 2.244 \cdot 10^6 x - 3.2768 \cdot 10^5 \end{aligned}$$

ins. i V.B.

$$\begin{aligned} 8.9023 \cdot 10^4 - \underbrace{(3052.64 - 583.54x)(T - T_{ref})}_{\text{försummas}} + \\ + 2.244 \cdot 10^6 x - 3.2768 \cdot 10^5 = 0 \end{aligned}$$

$$x = \frac{-8.9023 \cdot 10^4 - 3052.64 \cdot T_{ref}}{2.244 \cdot 10^6} + \frac{3052.64}{2.244 \cdot 10^6} T \quad \text{samma lutning!}$$

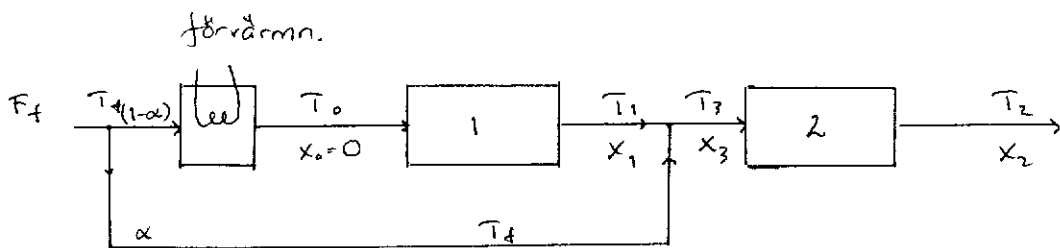
lägg in i x, T -diagram.

Avläsning ger:

$$\underline{x_1 = 0.146} \quad \underline{x_2 = 0.226}$$

$$\underline{T_1 = 538^\circ\text{C}} \quad \underline{T_2 = 489^\circ\text{C}}$$

b)



Jämviktsskurvan?

Alla flöden multipliceras med $(1-x) \Rightarrow$ samma $K_p(T) \Rightarrow$ samma jämviktsskurva!

Bädd 1:

i v.B. utgår flöden i alla termer. Alla termer mult. med $(1-x) \Rightarrow$ samma driftlinje som i a)

$$T_1 = 538^\circ\text{C}$$

$$x_1 = 0.146$$

x_2 och T_2 bestäms ur M.B. resp. v.B. u.a.p. A över blandningspunkten.

M.B. u.a.p. A över blandpnt: (mol/s)

$$F_{Af}(1-x_1)(1-x) + \alpha T_{Af}(1-0) = F_{Af}(1-x_2) \Rightarrow x_2 = 0.0876$$

v.B. över bl.pnt: (J/s)

u.h.a. (3)

$$(1-x)(3052.64 - 583.54x)(T_1 - T_{ref}) + \alpha \cdot 3052.64(T_f - T_{ref}) =$$

$$= (3052.64 - 583.54x_2)(T_2 - T_{ref}) \Rightarrow T_2 = 400.5^\circ\text{C}$$

lägg in denna punkt i jämviktsdiagrammet!

se sid R85:6

Bädd 2:

$$\dot{Q}_{in} \text{ ur (3)}$$

$$\dot{Q}_{out} = (3)$$

$$R(-\Delta H) = F_{Af}(x-x_3)(-\Delta H) \Rightarrow x = A + B \cdot T$$

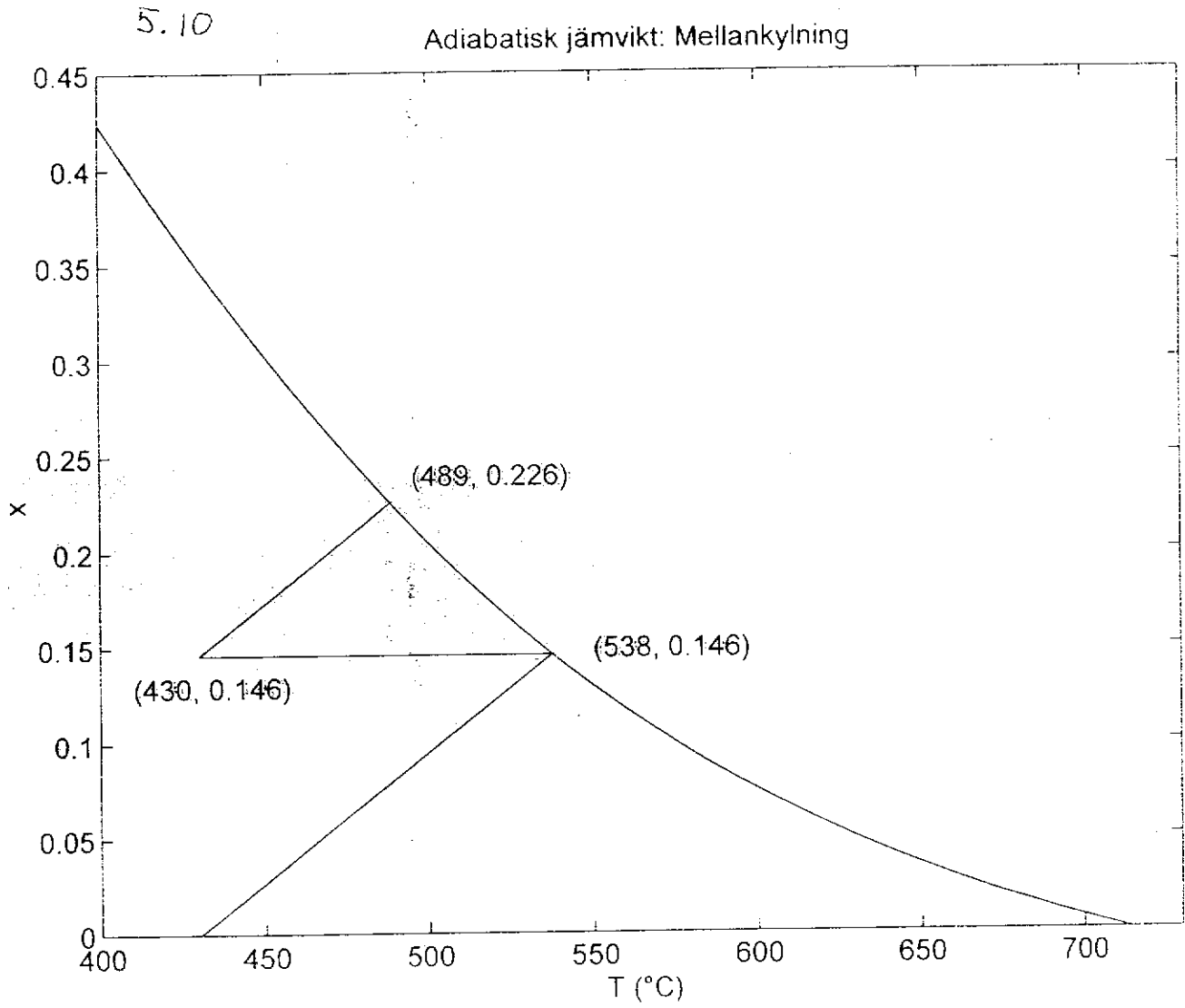
lutr. B är densamma som innan.

lägg in i x, T -diagram. \Rightarrow $x_2 = 0.216$

$$\underline{\underline{T_2 = 494^\circ\text{C}}}$$

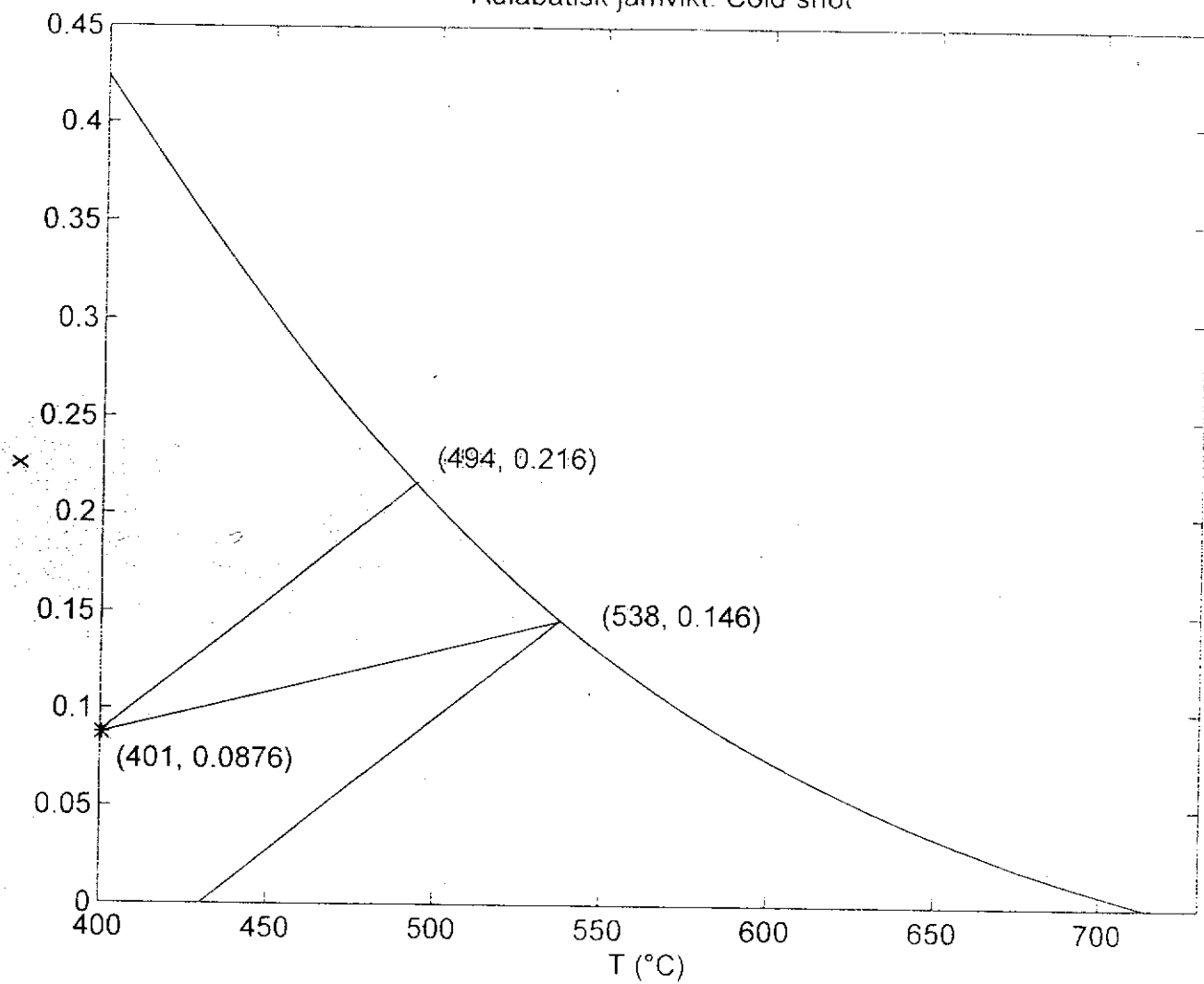
c) utdelad lösning.

se sid RÖS:7 - RÖS:10

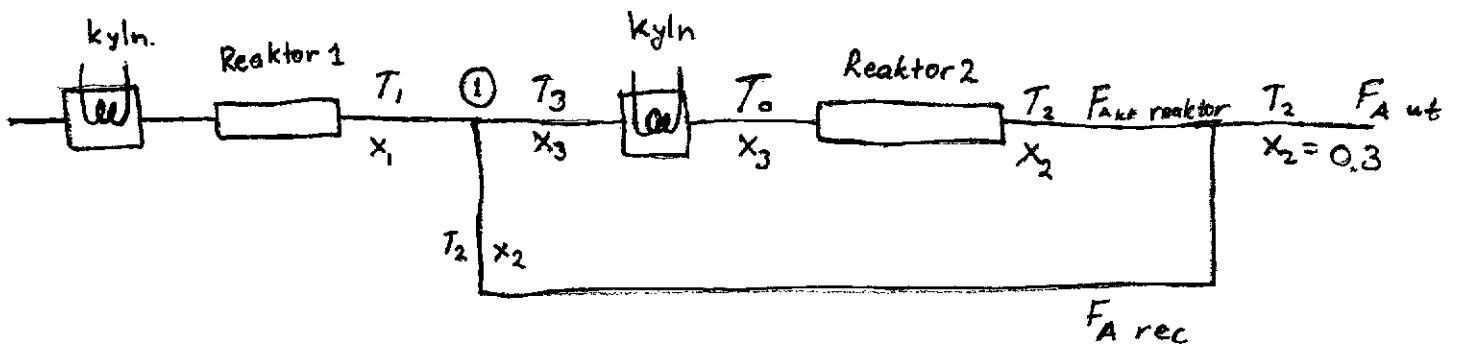


5.10

Adiabatisk jämvikt: Cold shot



5.10 c)



$$\text{Recirkulationsgrad } R = \frac{F_{A \text{ rec}}}{F_{A \text{ ut}}} \Rightarrow$$

$$F_{A \text{ rec}} = R F_{A \text{ ut}} = R F_{A f} (1 - x_2)$$

$$F_{A \text{ ut reaktor}} = F_{A \text{ ut}} + F_{A \text{ rec}} = (1 + R) F_{A f} (1 - x_2)$$

$$\text{Analogt: } F_{A \text{ in reaktor}} = (1 + R) F_{A f} (1 - x_3)$$

M.B. över blandn. punkt (1)

$$R F_{A f} (1 - x_2) + F_{A f} (1 - x_1) = (1 + R) F_{A f} (1 - x_3)$$

$$\Rightarrow [(1 - x_2) - (1 - x_3)] R = (1 - x_3) - (1 - x_1)$$

$$\Rightarrow R = \frac{x_1 - x_3}{x_3 - x_2} \quad (1)$$

x_3 fås grafiskt, genom att dra ner driftlinjen för reaktor 2 (samma lutning som tidigare) från T_2, x_2 till T_0 och läsa av x_3

eller så beräknas x_3 ur V.B

för reaktor 2 : $\dot{Q}_{in} - \dot{Q}_{ut} + \dot{Q}_r = 0$ RÖS: 8 (2)

$$F_{B \text{ ut reaktor}} = F_{B \text{ out}} + F_{B \text{ rec}} = (1+R)(F_{Bf} - 3 F_{Af} x_2)$$

$$\Rightarrow F_{B \text{ in reaktor}} = (1+R)(F_{Bf} - 3 F_{Af} x_3)$$

$$F_{C \text{ in reaktor}} = (1+R)(F_{Cf} + 2 F_{Af} x_3)$$

$$F_{Ar \text{ in reaktor}} = (1+R) F_{Ar f}$$

$$F_{CH_4 \text{ in reaktor}} = (1+R) F_{CH_4 f}$$

$$\dot{Q}_{in} = \sum F_j \text{ in reaktor } c_{p,j} (T_0 - T_{ref}) =$$

$$= (1+R)(3052,64 - 583,54 x_3)(T_0 - T_{ref})$$

$$\dot{Q}_{ut} = (1+R)(3052,64 - 583,54 x_2)(T_2 - T_{ref})$$

$$\dot{Q}_r = (1+R) F_{Af} (x_2 - x_3)(-\Delta H)$$

$$(2) \Rightarrow (1+R)(3052,64 - 583,54 x_3)(T_0 - T_{ref})$$

$$- (1+R)(3052,64 - 583,54 x_2)(T_2 - T_{ref}) + (1+R) F_{Af} (x_2 - x_3)(-\Delta H) = 0$$

$$\Rightarrow \left[F_{Af}(-\Delta H) - 583,54 (T_0 - T_{ref}) \right] x_3 = (3052,64 - 583,54 x_2)(T_2 - T_{ref}) - F_{Af} x_2 (-\Delta H) - 3052,64 (T_0 - T_{ref})$$

$$\Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \text{jämviktskurvan} \Rightarrow \\ T_2 = 452 \text{ } ^\circ\text{C} \end{array} \right\} \Rightarrow$$

$$x_3 = \frac{(3052,64 - 583,64 \cdot 0,3)(452 - 400) - 23,625 \cdot 0,3 \cdot 95 \cdot 10^3}{-23,625 \cdot 95 \cdot 10^3 - 583,54(430 - 400)}$$

$$= 0,272$$

$$(1) \Rightarrow R = \frac{0,146 - 0,272}{0,272 - 0,3} = 4,50$$

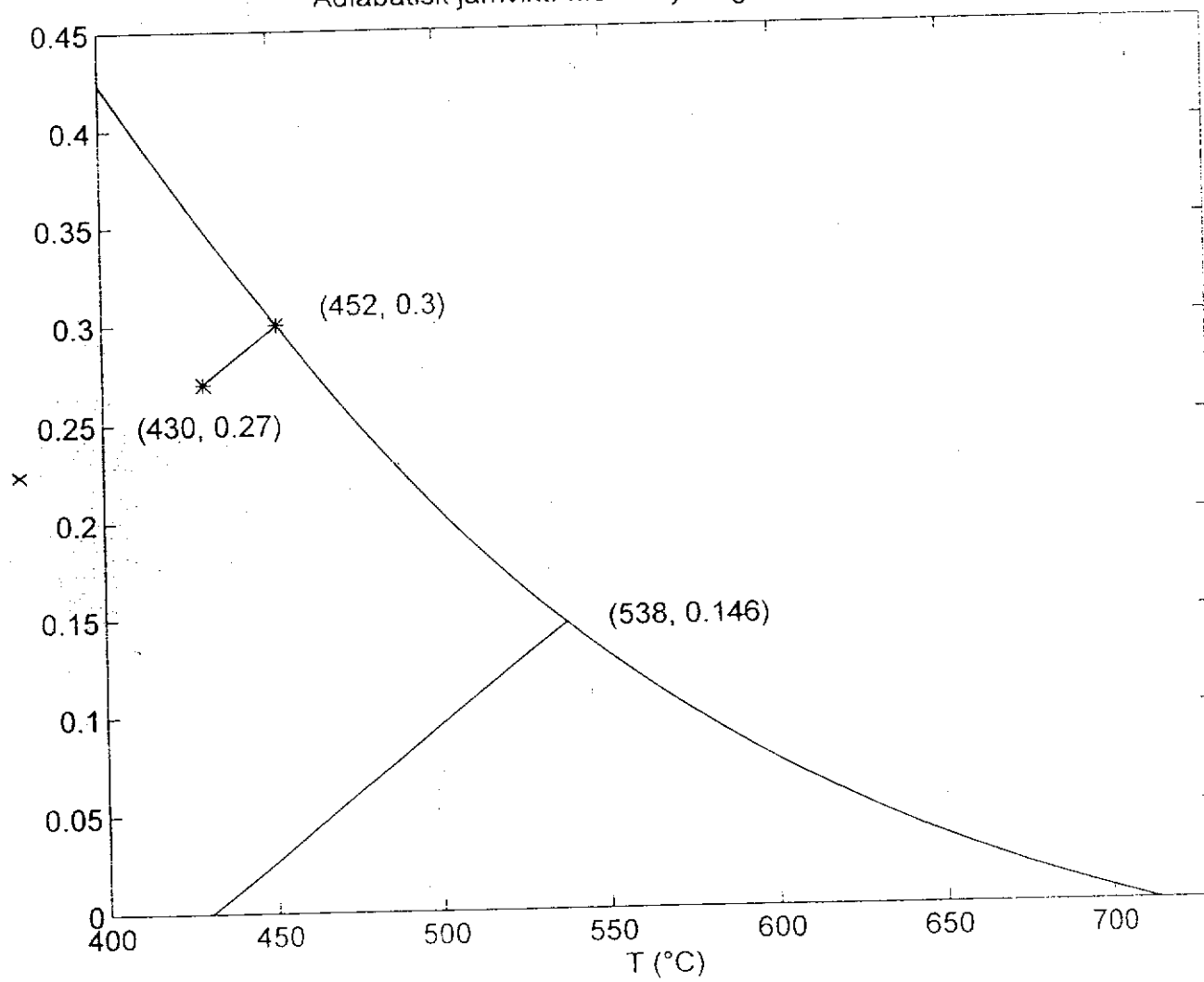
R05.8

Söke

$$\alpha_r = \frac{F_{A \text{ rec}}}{F_{A \text{ ut reaktor}}} = \frac{R F_{Af}(1-x_2)}{(1+R) F_{Af}(1-x_2)} = \underline{\underline{0,82}}$$

5.10

Adiabatisk jämvikt: Mellankylning med recirkulation

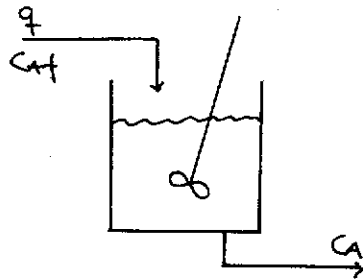


REAKTORSTABILITET

Man har betingelser (kinetikuttryck VB-MB) så att
multipla driftspunkter fås.

Är dessa driftspunkter stabila?

6.12)



$$r = \frac{k \cdot C_A}{(1 + K_A \cdot C_A)^2}$$

M.B. m.a.p A över reaktorn: (mol/s)

$$q \cdot C_{Af} - q \cdot C_A + v_A r - v_r = 0 \quad v_A = -2 \quad r = \dots \uparrow$$

$$q \cdot C_{Af} - q \cdot C_A - 2v_r \cdot \frac{k \cdot C_A}{(1 + K_A C_A)^2} = 0$$

$$C_{Af}(1 + K_A C_A)^2 - C_A(1 + K_A C_A)^2 - \frac{2v_r k \cdot C_A}{q} = 0$$

$$C_{Af}(1 + 2K_A C_A + K_A^2 C_A^2) - (C_A + 2K_A C_A^2 + K_A^2 C_A^3) - 2k \cdot C_A \cdot \tau = 0$$

$$\Rightarrow -K_A^3 C_A^3 + (C_{Af} K_A^2 - 2K_A) C_A^2 + (C_{Af} \cdot 2K_A - 1 - 2k\tau) C_A + C_{Af} = 0$$

Kan lösas numeriskt eller grafiskt

$$\underbrace{q \cdot C_{Af} - q \cdot C_A}_{M_t} - \underbrace{2r \cdot v_r}_{M_r} = 0$$

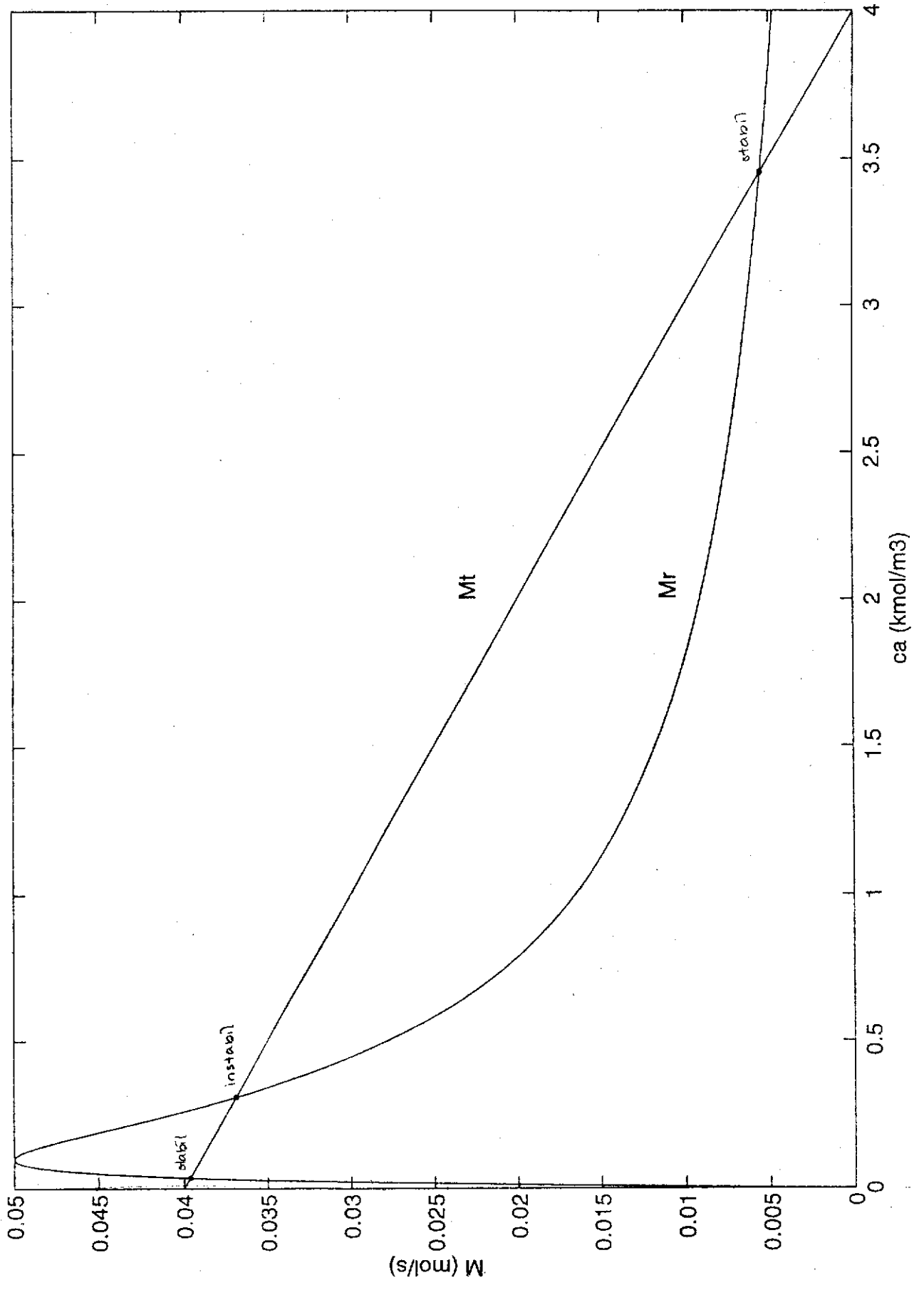
M_t och M_r som funktion av C_A

C_A	M_r	M_t
0	⋮	⋮
⋮	⋮	⋮
C_{Af}		

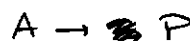
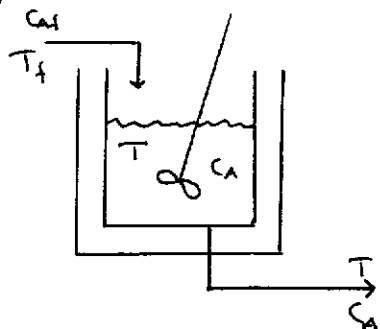
stabilitet? Villkor $\frac{dM_r}{dt} > \frac{dM_t}{dt}$

Sefig. sid R06:2

Reaktorstabilitet 6.12



6.3)



$$r = k \cdot C_A$$

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

$$\rho = \text{konst} \Rightarrow q = \text{konst.}$$

V.B. över reaktorn: (1/s)

$$\dot{Q}_{in} - \dot{Q}_{out} - \dot{Q}_{uyl} + \dot{Q}_r = 0$$

$$\dot{Q}_r = \dot{Q}_{out} - \dot{Q}_{in} + \dot{Q}_{uyl} \equiv \dot{Q}_b$$

$$\dot{Q}_r = R(-\Delta H) = r \cdot V_r (-\Delta H) = k \cdot C_A \cdot V_r (-\Delta H)$$

$$\dot{Q}_r = q \cdot C_{Af} \cdot x_A (-\Delta H)$$

$$\dot{Q}_b = q \rho C_p (T - T_{ref}) - q \rho C_p (T_f - T_{ref}) + U \cdot A (T - T_{uyl})$$

$$\dot{Q}_b(T) = (q \rho C_p + U \cdot A) T - (q \rho C_p T_f + U \cdot A T_{uyl})$$

M.B. utp. A: (mol/s)

$$q C_{Af} - q \cdot C_{Af} (1 - x_A) + V_A \cdot r \cdot V_r = 0 \quad V_A = -1$$

$$\Rightarrow q C_{Af} x_A - k C_{Af} (1 - x_A) \cdot V_r = 0$$

$$x_A - k(1 - x_A) \tau = 0$$

$$x_A = \frac{k(T) \cdot \tau}{1 + k(T) \cdot \tau} \quad (1)$$

Plotta $\dot{Q}_r(T)$ och $\dot{Q}_b(T)$

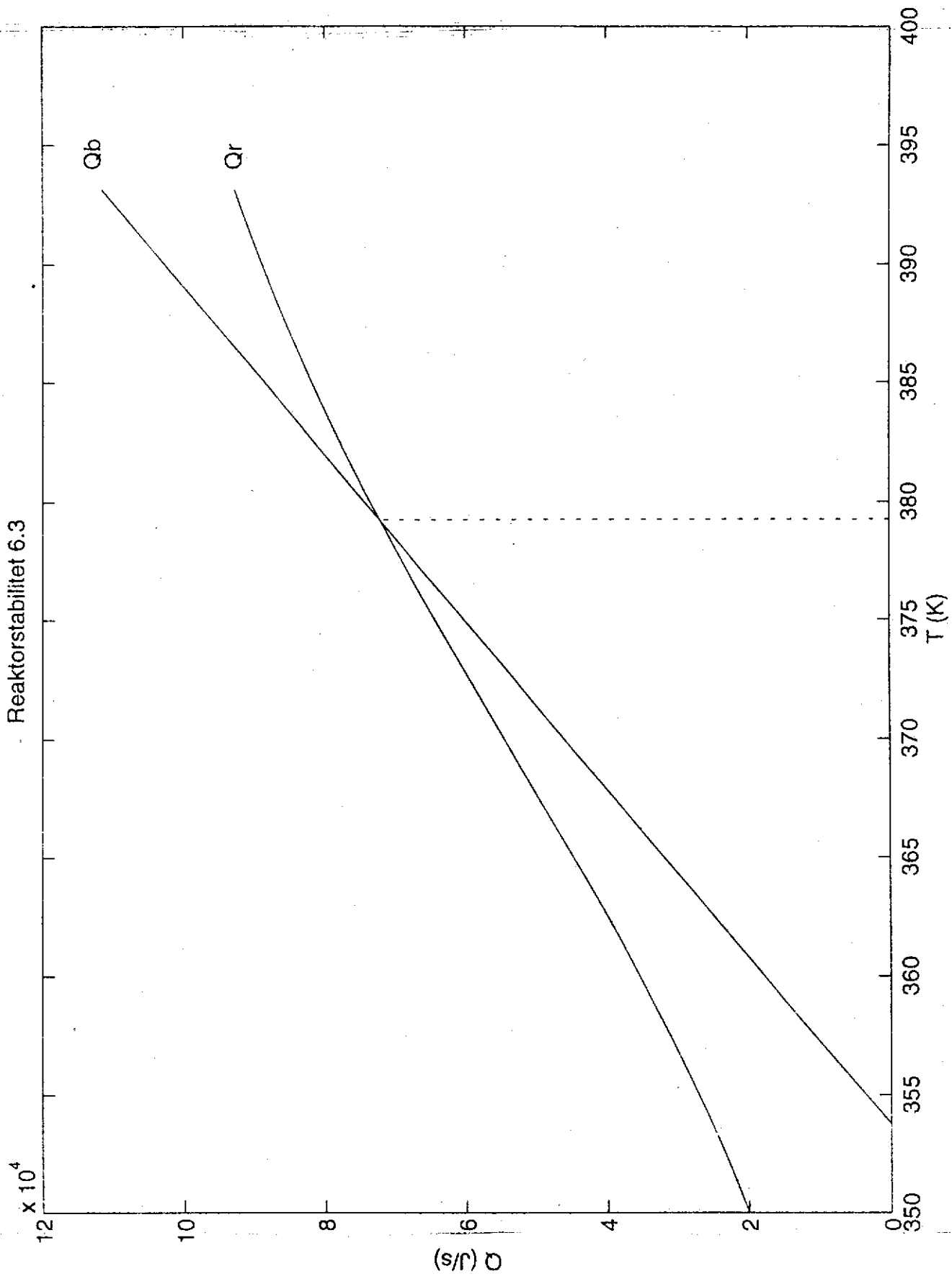
$$T_s \text{ fås där } \dot{Q}_r = \dot{Q}_b \Rightarrow \underline{\underline{T_s = 379 \text{ K}}} \quad \text{se sid R06:4}$$

$$(1) \Rightarrow \underline{\underline{x_A = 0.62}}$$

Stabilitetskriterium:

$$1) \quad U A + q \rho C_p (2 + k_s \tau) > \left(\frac{d\dot{Q}_r}{dT} \right)_{T_s}$$

$$2) \quad U A + q \rho C_p > \left(\frac{d\dot{Q}_r}{dT} \right)_{T_s}$$



$$2) \quad VL = \left(\frac{d\dot{Q}_b}{dT} \right)_{T_s} > \left(\frac{d\dot{Q}_r}{dT} \right)_{T_s} \quad \underline{\underline{(1) \text{ uppfyllt!}}}$$

$$1) \quad \dot{Q}_r = k(T) \cdot C_A(T) \cdot V_r (-\Delta H)$$

$$\left(\frac{d\dot{Q}_r}{dT} \right) = \underbrace{\frac{dk}{dT} C_{As} \cdot V_r (-\Delta H)}_{\left(\frac{d\dot{Q}_r}{dT} \right)_{C_s}} + k(T_s) \frac{dC_A}{dT} \cdot V_r (-\Delta H)$$

Man kan visa att:

$$\left(\frac{d\dot{Q}_r}{dT} \right)_{C_s} (1-x_s) = \left(\frac{d\dot{Q}_r}{dT} \right)_{T_s}$$

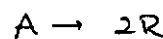
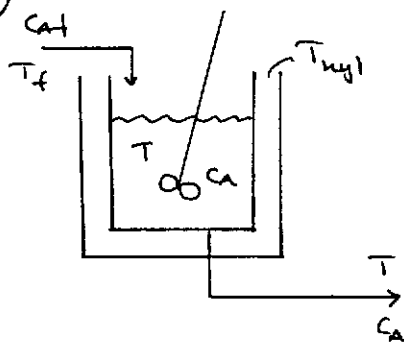
$$\frac{dk}{dT} = \left\{ k(T) = A e^{-\frac{E}{T}} \right\} = \frac{E}{T^2} A e^{-\frac{E}{T}} = \frac{E}{T^2} \cdot k$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{d\dot{Q}_r}{dT} \right)_{C_s} &= \frac{E}{T_s^2} k(T_s) C_{As} \cdot V_r (-\Delta H) = \frac{E}{T_s^2} \dot{Q}_r(T_s) = \frac{E}{T_s^2} \cdot q \cdot C_{At} x_s (-\Delta H) = \\ &= 4704 \text{ W/K} \end{aligned}$$

$$UA + q_p C_p (2 + k(T_s) \cdot T) = 5897 \text{ W/K}$$

\therefore (2) uppfyllt!

6.11)



$$r = k \cdot C_A$$

$$\text{Givet: } T_s = 350 \text{ K} \\ x_{As} = 0.81$$

Är T_s stabil? Vad blir A_{uyl} ?

V.B över reaktorn: (J/s)

$$\dot{Q}_{in} - \dot{Q}_{out} - \dot{Q}_{uyl} + \dot{Q}_r = 0$$

$$q_p C_p (T_f - T_{ret}) - q_p C_p (T_s - T_{ret}) - U \cdot A (T_s - T_{uyl}) + q C_{At} x_{As} (-\Delta H) = 0$$

$$\Rightarrow \underline{\underline{A_{uyl}}} = \frac{q_p C_p (T_f - T_s) + q C_{At} x_{As} (-\Delta H)}{U (T_s - T_{uyl})} = \underline{\underline{5,15 \text{ m}^2}}$$

Stabilitetskriterier: (irr. 1:a ordn., icke-adiabat, ideal tanu, exokerm)

$$1) U \cdot A_{\text{myl}} + q_p C_p (2 + k_s \tau) > \left(\frac{d\dot{Q}_r}{dT} \right)_{C_s}$$

$$2) UA + q_p C_p > \left(\frac{d\dot{Q}_r}{dT} \right)_{C_s} (1 - x_s)$$

$$1) \tau = \frac{V_r}{q} \quad k(T_s) = k(350K) = 0.425$$

$$\Rightarrow V.L. = 72671 \text{ W/K}$$

$$\dot{Q}_r = k \cdot C_A \cdot V_r (-\Delta H)$$

$$\left(\frac{d\dot{Q}_r}{dT} \right)_{C_s} = \frac{dk}{dT} C_A \cdot V_r (-\Delta H)$$

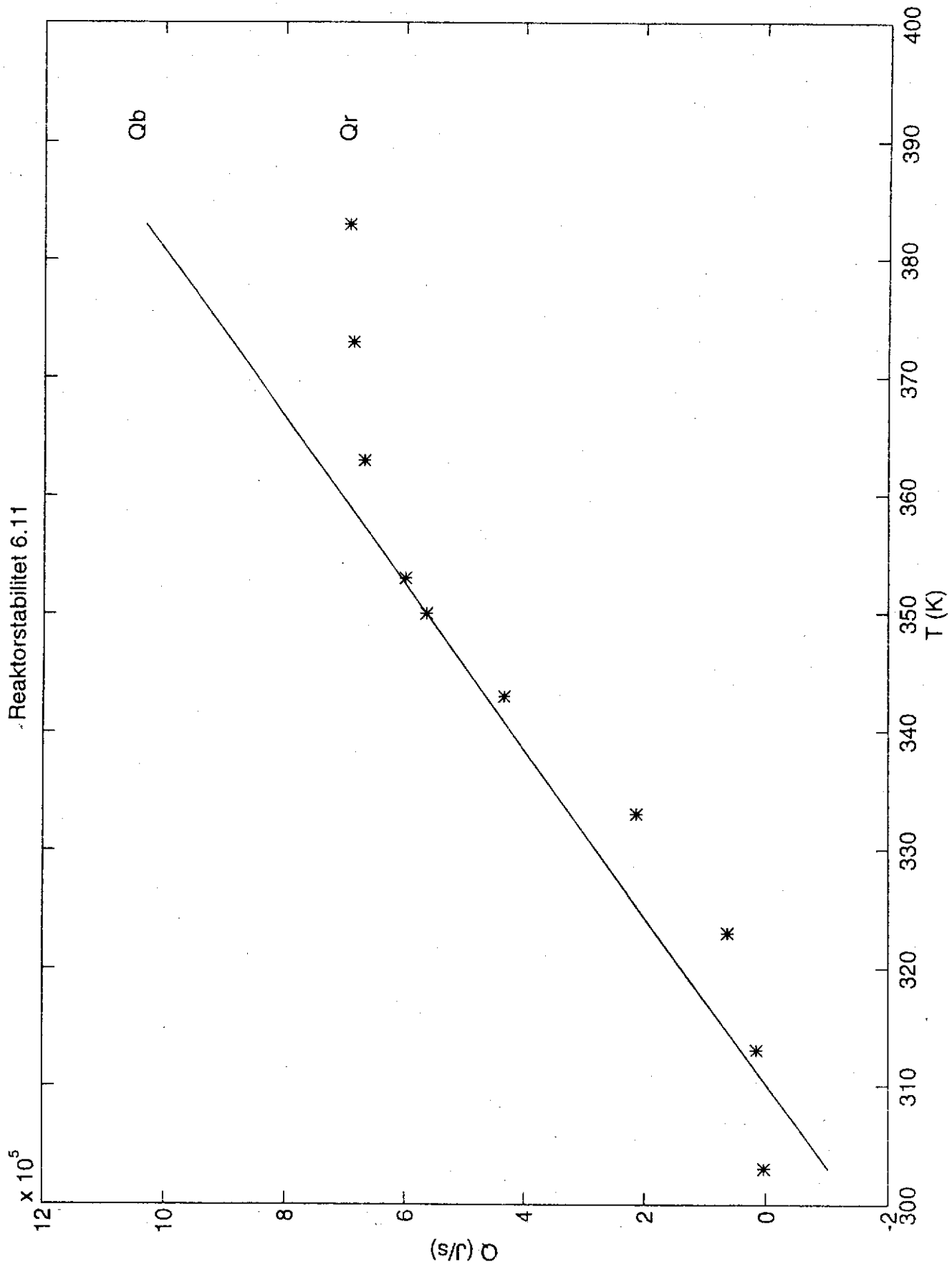
$$k(T) = A \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \quad \frac{dk}{dT} = \frac{E}{RT^2} A \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) = \frac{E}{RT^2} \cdot k$$

$$\left(\frac{d\dot{Q}_r}{dT} \right)_{C_s} = \frac{E}{RT_s^2} \underbrace{k(T_s) \cdot C_A \cdot V_r (-\Delta H)}_{\dot{Q}_r(T_s)} = \frac{E}{RT_s^2} \cdot q_{CH} x_{AS} (-\Delta H) = 74408 \text{ W/K}$$

$V.L. < H.L.$ alltså är villkoret inte uppfyllt.

\Rightarrow instabil driftspunkt

se fig sid 86:7

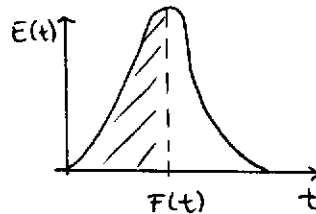


ICKE IDEALA REAKTORER OCH UPPEHÅLLSTIDSFÖRDELNING

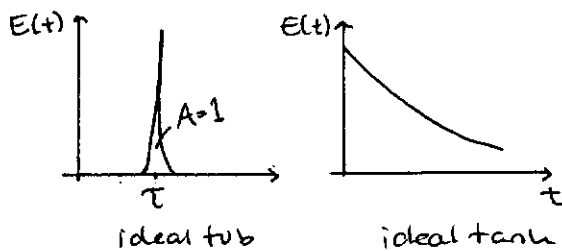
Ikke ideal \rightarrow inför blandningsmodell

- Segregerat flöde
- Dispersionsmodell
- Tankserie modell

Spårämnes försök



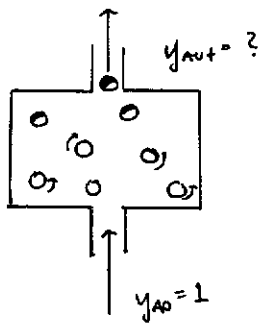
Def: $E(t)dt =$ andel av flödet med en uppehållstid mellan t och $t+dt$.



$$\int_0^{\infty} E(t) dt = 1$$

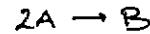
$$F(t) = \int_0^t E(t) dt$$

7.4)



$\circ = A$

$\bullet = B$



$-\frac{dy_A}{dt} = 2k \cdot y_A^2$

$$-\int_{y_A^0}^{y_A^{ut}} \frac{1}{y_A^2} dy_A = \int_0^t 2k dt \quad ; \quad \left[\frac{1}{y_A} \right]_{y_A^0}^{y_A^{ut}} = 2k \cdot t \quad ; \quad \frac{1}{y_A^{ut}} - \frac{1}{y_A^0} = 2kt \quad \{y_A^0 = 1\}$$

$$y_A^{ut}(t) = \frac{1}{1+2kt}$$

Ikke ideal, alltså blandningsmodell:

- Segregerat flöde

$$\langle C_A^{ut} \rangle = \int_0^{\infty} C_A^{ut}(t) E(t) dt \quad C_A = y_A \frac{P}{RT}$$

$$\langle y_A^{ut} \rangle = \int_0^{\infty} y_A^{ut}(t) E(t) dt = \int_0^{\infty} \frac{1}{1+2kt} E(t) dt$$

$E(t)$ fås ur puls försök:

Röt: 2

$$E(t) = \frac{C_s(t)}{\int_0^{\infty} C_s(t) dt} \quad (\text{finns i F.S})$$

t	$C_s(t)$	$E(t)$	$\frac{1}{1+2kt} E(t)$
0	0	0/215	0
5	5.0	5/215	0,0221
10	12.0		0,0507
15	14.0		
20	8.0		
25	4.0		
30	0		

Trapetsmetoden: (*)

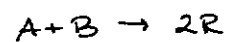
$$\int_0^{\infty} C_s(t) dt \stackrel{(*)}{\approx} \Delta t \left(\frac{C_1+C_2}{2} + \frac{C_2+C_3}{2} + \dots \right) = \Delta t \left(\frac{1}{2} C_1 + C_2 + \dots + \frac{1}{2} C_n \right) =$$

$$= 5 \left(\frac{1}{2} \cdot 0 + 5.0 + \dots \right) = 215$$

$$\langle y_A^{st} \rangle \stackrel{(*)}{\approx} 5 \left(0 \cdot \frac{1}{2} + 0.0221 + \dots \right) = \underline{\underline{0.877}}$$

$$\langle t \rangle = \int_0^{\infty} t E(t) dt \stackrel{(*)}{\approx} 5 \left(\frac{1}{2} \cdot 0 + 5 \cdot 5/215 + \dots \right) = \underline{\underline{14.3 \text{ min}}}$$

7.6)



$$r = k \cdot C_A \cdot C_B \quad \text{2:a ordn!}$$

1:st ideal tub, alltså blandningsmodell

Eftersom 2:a ordn. kan ej segregerat flöde användas.

Dispersionsmodellen

$$\frac{De_a}{v \cdot L} = f(\tau, \sigma^2)$$

Sluten mätsträcka (spårämnet sätts in i inloppet)

$$\langle t \rangle = \int_0^{\infty} t E(t) dt \quad \leftarrow \text{F.S.} \quad \begin{array}{l} \swarrow \\ \text{ej i F.S} \end{array}$$

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

t	$C_s(t)$	$E(t)$	$tE(t)$	$t^2E(t)$
0	0	0	0	0
5	3.0	3/100	5·3/100	5 ² ·3/100
10	5.0	5/100	5·5/100	5·10 ² /100
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮

35

$\Delta t = 5$

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

trapez: $\int_0^{\infty} C_s(t) dt = 5 \left(\frac{1}{2} \cdot 0 + 3.0 + \dots \right) = 100$

$\tau = \langle t \rangle = 5 \left(\frac{1}{2} \cdot 0 + 5 \cdot \frac{3}{100} + \dots \right) = 15 \text{ min}$

$\sigma^2 = 5 \left(\frac{1}{2} \cdot 0 + 5^2 \cdot \frac{3}{100} + \dots \right) - 15^2 = 47.5 \text{ min}$

$\frac{Dea}{v \cdot L} = \gamma \quad \{F.S. \text{ o. } S\} \Rightarrow \frac{\sigma^2}{\langle t \rangle^2} = 2\gamma - 2\gamma^2 \left(1 - \frac{e^{-1/\gamma}}{1/\gamma} \right) \quad (1)$

$\Rightarrow \gamma^2 - \gamma + \frac{1}{2} \frac{\sigma^2}{\langle t \rangle^2} = 0$

$\gamma = \frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4} - \frac{1}{2} \frac{\sigma^2}{\langle t \rangle^2}} \Rightarrow \begin{matrix} \gamma_1 = 0.12 \\ (\gamma_2 = 0.88) \end{matrix} \text{ uppfyller ej (1)}$

$\frac{Dea}{v \cdot L} = 0.12$ } Det finns en (tabell) som har dessa värden som parametrar.
 $k \cdot \tau \cdot C_{A0} = 100$

2:a ordn. $A + B \rightarrow \dots$

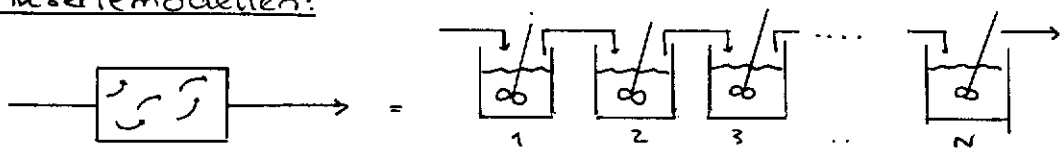
$C_{A0} = C_{B0}$

avläs i diagram (dvn. och fig 3b)

$\frac{C_A}{C_{A0}} = 1 - 0.015$

$\frac{C_A}{C_{A0}} = 98.5\%$

Tankseriemodellen:



$N = \frac{\langle t \rangle^2}{\sigma^2} = \frac{15^2}{47.5} = 4.74 \approx 5 \text{ tankar}$

M.B. u.a.p A för tank i : (mol/s)

$$q \cdot c_{i-1} - q \cdot c_i - k \cdot c_i^2 \cdot \frac{V_r}{N} = 0$$

$$-k \cdot \frac{V_r}{N} \cdot c_i^2 - c_i + c_{i-1} = 0$$

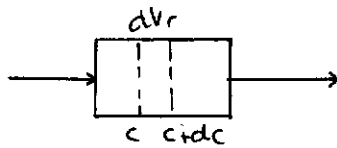
$$c_i^2 + \frac{N}{kV_r} c_i - \frac{N}{kV_r} c_{i-1} = 0$$

$$c_i = -\frac{N}{2kV_r} \pm \sqrt{\left(\frac{N}{2kV_r}\right)^2 + \frac{N}{kV_r} c_{i-1}}$$

$$c_0 = c_1 ; c_i \Rightarrow c_2 \dots$$

$$\text{Övn. bok fig 2b } (N=4.74 ; k \cdot V_r \cdot c_{A0} = 100) \Rightarrow \frac{c_A}{c_{A0}} = 1 - 0.02 = \underline{\underline{98\%}}$$

Ideal tub:



M.B över dV_r :

$$q \cdot c - q(c+dc) - k \cdot c^2 \cdot dV_r = 0$$

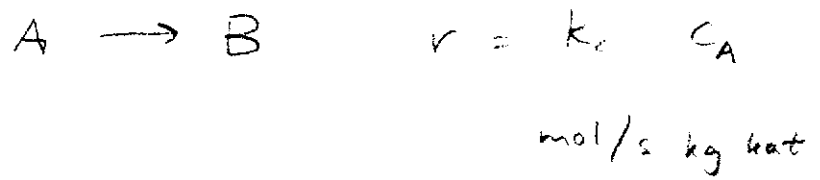
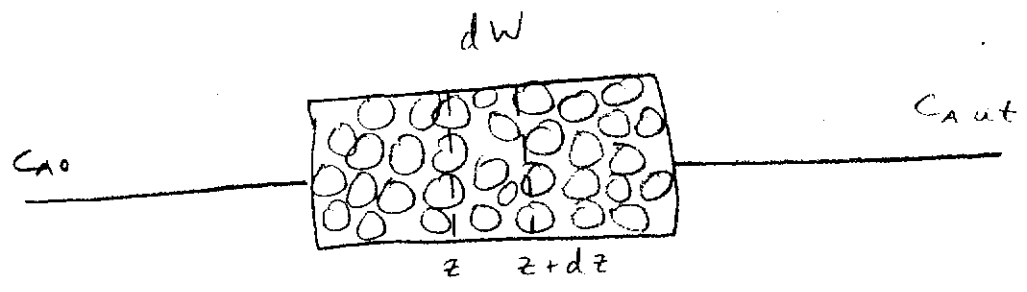
$$-q \cdot dc = k \cdot c^2 \cdot dV_r$$

$$-\int_{c_{A0}}^{c_A^{ut}} \frac{1}{c^2} dc = \frac{k}{q} \int_0^{V_r} dV_r ; \left[\frac{1}{c} \right]_{c_{A0}}^{c_A^{ut}} = \frac{k}{q} \cdot V_r \Rightarrow k \cdot V_r = \frac{1}{c_A^{ut}} - \frac{1}{c_{A0}}$$

$$c_A^{ut} = \frac{1}{\frac{1}{c_{A0}} + k \cdot V_r} = 9.91 \cdot 10^{-4} \text{ kmol/m}^3$$

$$\underline{\underline{X_{ideal}}} = 1 - \frac{c_A^{ut}}{c_{A0}} = \underline{\underline{0.99}}$$

7.8



$$P_{ca} = \frac{V_0 dp}{D_{ca}} \Rightarrow D_{ca} = \frac{V_0 dp}{z}$$

P, T konst
 ingen moländring } ρ konst. → η konst

Differentiell M.B. m a p A över dW
 med axiell dispersion (obs fri volym
 för strömning och dispersion):

$$\left[\frac{\text{mol}}{\text{s}} \right] \begin{aligned} & \underbrace{V_0 A \epsilon_B c(z)}_{\text{strömning in}} - \underbrace{V_0 A \epsilon_B c(z+dz)}_{\text{strömning ut}} \\ & + \left(- D_{ca} \frac{dc}{dz} \Big|_z - D_{ca} \frac{dc}{dz} \Big|_{z+dz} \right) A \epsilon_B \\ & - \underbrace{r}_{f_B} dW = 0 \end{aligned}$$

där A = tubens tvärsnittsarea
 ε_B = bäddporositet = $\frac{\text{fri volym}}{\text{total volym}}$

$$f_B = \text{bäddensitet} = \frac{W}{\text{total volym}}$$

287:6

div med A och $dz \Rightarrow$

$$-V_0 \epsilon_B \frac{c(z+dz) - c(z)}{dz} + D_{ca} \epsilon_B \frac{\frac{dc}{dz} \Big|_{z+dz} - \frac{dc}{dz} \Big|_z}{dz} - r f_B = 0$$

Låt $dz \rightarrow 0 \Rightarrow r \rightarrow k_c c(z)$ och

$$-V_0 \epsilon_B \frac{dc}{dz} + D_{ca} \epsilon_B \frac{d^2c}{dz^2} - k_c f_B c = 0$$

Gör dim. löst $c^* = \frac{c}{c_0}$ $z^* = \frac{z}{L}$

$$\Rightarrow c = c_0 c^* \quad z = L z^*$$

$$-V_0 \epsilon_B \frac{c_0}{L} \frac{dc^*}{dz^*} + D_{ca} \epsilon_B \frac{c_0}{L^2} \frac{d^2c^*}{dz^{*2}} -$$

$$k_c f_B c_0 c^* = 0$$

$$\Rightarrow - \frac{dc^*}{dz^*} + \frac{D_{ca}}{V_0 L} \frac{d^2c^*}{dz^{*2}} - \frac{k_c f_B L}{V_0 \epsilon_B} c^* = 0$$

(1)

Jämförelse med KRT - komp. s 11.23

ekv 11.62

tom tub

packad bädd

$$\frac{D_{ea}}{vL} \longleftrightarrow \frac{D_{ea}}{v_0 L}$$

$$k_c \tau \longleftrightarrow \frac{k_c \rho_B L}{v_0 \varepsilon_B} = \frac{k_c \frac{W}{A_L} L}{v_0 \varepsilon_B} =$$

$$= \frac{k_c W}{v \cdot A} = \frac{k_c W}{q}$$

(1) kan lösas analytiskt men
enklare använda Figur 3 a

$$\frac{D_{ea}}{v_0 L} = \frac{v_0 d_F}{2 v_0 L} = 0,05$$

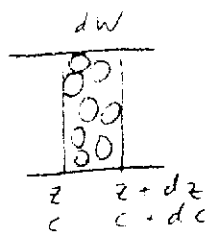
$$\frac{k_c W}{q} = \frac{0,0142 \cdot 1,45}{42 \cdot 10^{-3}} = 4,90$$

$$\text{Figur 3 a} \Rightarrow \frac{C_A}{C_{A0}} \approx 0,017 = \underline{\underline{1,7\%}}$$

Ideal tub

Stryk dispersions termen (1)

eller

M.B. map A över dW :OBS skilj på
fri volym och
katalysatorvolym!

$$v_0 A \varepsilon_B c - v_0 A \varepsilon_B (c + dc) - r \underbrace{dW}_{A dz} = 0$$

$$\Rightarrow -v_0 A \varepsilon_B dc = r A f_B dz$$

$$\text{låt } dz \rightarrow 0 \Rightarrow r \rightarrow k_c c \Rightarrow$$

$$-v_0 \varepsilon_B dc = k_c c f_B dz$$

$$\Rightarrow \int_{c_0}^{c_{ut}} \frac{1}{c} dc = - \int_0^L \frac{k_c f_B}{v_0 \varepsilon_B} dz$$

$\frac{W}{A \cdot L}$

$$\Rightarrow \ln \frac{c_{ut}}{c_{in}} = - \frac{k_c f_B L}{v_0 \varepsilon_B} = - \frac{k_c \frac{W}{A \cdot L} L}{v} =$$

$= v$

$$= - \frac{k_c W}{A \cdot v} = - \frac{k_c W}{\eta}$$

$$\Rightarrow \frac{c_{ut}}{c_{in}} = e^{-\frac{k_c W}{\eta}} = \underline{0,74 \%} \quad 40$$

$r =$ effektiv
njärhast.

82) Reaktion: $A \xrightleftharpoons[k_2]{k_1} R$; $r = r_1 - r_2 = k_1 \cdot C_A - k_2 \cdot C_R$

Givet: $k_1 = f(T)$, $k_2 = f(T)$, ΔH , γ , C_p , q_t , C_A^0

Sökt: a) V_r^{min} , T_{opt} vid $x_A = 0.8$

tankreaktor \Rightarrow all reaktion sker vid konstant $x = T$

Sök max $r(x=0.8, T) \Rightarrow \frac{dr}{dT} = 0$

$$\frac{dr}{dT} = \frac{d}{dT} (C_A^0(1-x)k_1(T) - C_A^0 x k_2(T)) =$$

$$= C_A^0(1-x) \frac{d}{dT} \left(e^{(17.2 - 5838/T)} \right) - C_A^0 x \frac{d}{dT} \left(e^{(41.9 - 14897/T)} \right) =$$

$$= C_A^0(1-x) e^{17.2 - 5838/T} \cdot \frac{5838}{T^2} - C_A^0 x \cdot e^{41.9 - 14897/T} \cdot \frac{14897}{T^2} = 0$$

$$\Rightarrow T = \frac{9089}{\ln \left(\frac{0.8}{0.2} \cdot \frac{14897}{5838} \right) + 24.7} = 335.23 \text{ K} = 62.1^\circ \text{C}$$

M.B m.a.p.A över tank:

$$q \cdot C_A^0 - q \cdot C_A^0(1-x_A) - r V_r = 0 \Rightarrow V_r = \frac{q \cdot C_A^0 x}{r(x=0.8, T=62.1^\circ \text{C})}$$

$$= \frac{q \cdot C_A^0 x}{k_1 C_A^0(1-x) - k_2 C_A^0 x} = \frac{q x}{k_1(335 \text{ K})(1-x) - k_2(335 \text{ K})x} = 8.15 \text{ m}^3$$

Alternativ lösning: Använda fig 1 i dningeboken.

Vid $x_A = 0.8 \rightarrow -r_A = 0.1 \Rightarrow V_r$ ur M.B ; $V_r = 8 \text{ m}^3$

b) tankreaktor

Sökt: V_r^{min} och T_f vid $x_A = 0.8$

$V_r = 8.15 \text{ m}^3$ enligt (a)

V.B: $q \cdot \gamma \cdot C_p (T_{in} - T_{ret}) - q \cdot \gamma \cdot C_p (T_{ut} - T_{ret}) + (-\Delta H) \cdot R = 0$ $\{ T_{ret} = T_{in} \}$

$$q \cdot \gamma \cdot C_p (T_{in} - T_{ut}) = -(-\Delta H) q \cdot C_A^0 \cdot x$$

$$T_{in} = T_{ut} - \frac{(-\Delta H) \cdot C_A^0 \cdot x}{\gamma \cdot C_p} = 62.1 - \frac{75.3 \cdot 10^3 \cdot 10^3 \cdot 0.8}{800 \cdot 1.25 \cdot 10^3} = 1.85^\circ \text{C}$$

c) ideal tub

Søkt: V_r^{\min} vid $x_0 = 0.8$ samt optimal temperaturfordeling ($T = t(z^*)$)
 tub \rightarrow for varje x finns en optimal temperatur vid vilken r
 har sitt max.

$$T_{\text{opt}} \text{ så då } \frac{d(r(x,T))}{dT} = 0$$

$$-24.7 + \frac{3059}{T} = \ln\left(\frac{x}{1-x} \cdot \frac{14897}{5838}\right) \Rightarrow T_{\text{opt}} = \frac{9059}{\ln\left(\frac{14897}{5838} \cdot \frac{x}{1-x}\right) - 24.7}$$

$$r(x,T) = r(x, f(x)) = r(x)$$

M.B m.a.p A , differentiell

$$q \cdot C_n(1-x) - q \cdot C_n(1-x-dx) - r(x) dV_r = 0 \rightarrow$$

$$q \cdot C_n dx = r(x) dV_r \Rightarrow$$

$$V_r = \int_0^x \frac{q \cdot C_n}{r(x)} dx = q \int_0^x \frac{C_n dx}{C_n(1-x)k_1 - C_n x k_2} = q \int_0^x \frac{dx}{(1-x)k_1 - xk_2} = q \int_0^x f(x) dx$$

$$k_1 = e^{17.2 - 5838/T}$$

$$k_2 = e^{41.2 - 14897/T}$$

$$\text{max temp} = 95^\circ\text{C} = 360.15 \text{ K} \Rightarrow T = \min(T_{\text{opt}}, 95^\circ\text{C})$$

$$z^* = z/L = \frac{V_r(z)}{V_r^{\text{tot}}}$$

Integrera numerskt

x	T	$f(x)$	$\int_0^x f(x) dx$	$z^* = \frac{\int_0^x f(x) dx}{\int_0^1 f(x) dx}$
0	95	0,261	0	0
0.1	95	0,333	0,0293	0,018
0.2	95	0,45	0,0677	0,042
0.3	92.3	0,69	0,1234	0,076
...
0.8	62.1	10,19	1,6212	1

$$V_r = q \cdot \int_0^{0.8} f(x) dx = 1 \cdot 1.62 = 1.62 \text{ m}^3$$

Brytpunkten: $T^* = 368.15 \text{ K}$

$$368.15 = \frac{3059}{\ln\left(\frac{14897 \cdot x}{5836 \cdot (1-x)}\right) + 24.7} \Rightarrow x = 0.263$$

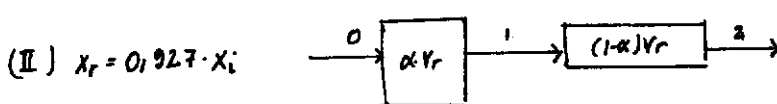
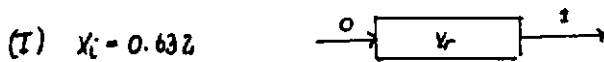
8.5) reaktion: $A \rightarrow B$; $r = k \cdot C_A$

Isotermt, isobart i tubreaktor
Modell reell reaktor

Givet: Ideal tub x_i, F_{A1}, k, q
Reell tub x_r, k, q

Modell: Reella reaktorn kan beskrivas som tank + tub

Sökt: $\frac{V_{\text{tank}}}{V_{\text{tot}}}$



Ingen moländning, räkna med q, C_A

(I) m.B m.a.p A differentiell

$$q \cdot C_A - q \cdot (C_A + dC_A) - k \cdot C_A \cdot dV_r = 0 \Rightarrow \frac{dC_A}{C_A} = \frac{k}{q} \cdot dV_r \Rightarrow$$

$$\frac{k}{q} V_r = \int_{C_A}^{C_A(1-x)} \frac{-dC_A}{C_A} = -[\ln C_A]_{C_A}^{C_A(1-x)} = -\ln(1-x) = 1$$

$$V_r = \frac{q}{k} (-\ln(1-x_i)) = 0.0282 \text{ m}^3$$

(II) m.B över tank, volymen = $\alpha \cdot V_r$

$$q \cdot C_A^i - q \cdot C_A^i - k \cdot C_A^i \cdot \alpha \cdot V_r = 0$$

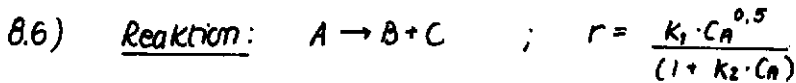
$$C_A^i = \frac{q \cdot C_A^i}{q + k \cdot \alpha \cdot V_r} = \frac{C_A^i}{1 + \alpha \cdot \frac{k}{q} \cdot V_r} = \frac{C_A^i}{1 + \alpha}$$

M.B över tuben, volymen $(1-\alpha) \cdot V_r$

$$- \frac{dC_A}{C_A} = \frac{k}{q} \cdot dV_r = \frac{k}{q} V_r (1-\alpha)$$

$$\underbrace{\frac{k}{q} \cdot V_r (1-\alpha)}_1 = - \left[\ln C_A \right]_{C_A}^{C_A^0} \Rightarrow \alpha = 1 + \ln[(1-x_r)(1+\alpha)] = 1 + \ln[(1-0.927)(1+\alpha)]$$

Iteration $\Rightarrow \alpha = 0.569 \Rightarrow V_{tank} = 57\%$ av totala volymen



Isoterm reaktion som sker i vätskefas

Giuet: $F_{A0}, C_{A0}, x_{A0}, k_1, k_2$

Sökt: lämplig reaktorkombination samt minsta volymer som krävs för att få en ändring av omsättningsgraden med $\Delta x_A = 0.90$

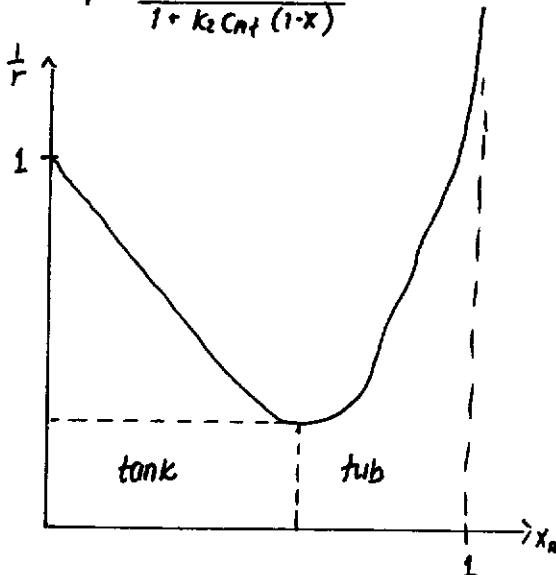
(I) Plotta $\frac{1}{-v_r}$ mot x_A

tub: differentiell M.B $\Rightarrow dV_r = F_{A0} \cdot \frac{1}{-v_r(x)} dx$

$$V_r = F_{A0} \int_{x_{in}}^{x_{ut}} \frac{1}{-v_r(x)} dx = F_{A0} \cdot \left\{ \begin{array}{l} \text{ytan under kurvan} \\ \text{mellan } x_{in} \text{ och } x_{ut} \end{array} \right\}$$

tank: $V_r = F_{A0} \frac{1}{-v_r(x_{ut})} (x_{ut} - x_{in}) = F_{A0} \cdot \left\{ \begin{array}{l} \text{ytan av rektangeln} \\ \text{som har basen } (x_{ut} - x_{in}) \\ \text{och höjden } 1/v_r \end{array} \right\}$

$$r = \frac{\sqrt{k_1 C_{A0}(1-x)}}{1 + k_2 C_{A0}(1-x)}$$



x	$1/r$
0	1
0.2	0.939
0.4	0.878
0.6	0.822
0.8	0.805
1.0	∞

tank-tub

Bestäm max r → minimal volym

$\frac{dr}{dx}$ eller $\frac{dr}{dc}$ (spelar inte så stor roll vilken man väljer)

$$\frac{dr}{dc} = \frac{(1+k_3 \cdot C_A) k_1 \cdot \frac{1}{2} \cdot C_A^{-0.5} - k_1 \cdot C_A^{0.5} \cdot k_2}{(1+k_2 \cdot C_A)^2} = 0 \rightarrow$$

$$C_A = \frac{1/2}{k_3 - 1/2 k_3} = \frac{1}{k_3} = 0,0025 \text{ mol / liter}$$

M.B tank

$$q \cdot C_{A1} - q \cdot C_A' - r \cdot V_r = 0 \rightarrow q(C_{A1} - C_A') = \frac{k_1 \cdot C_A'^{0.5}}{1+k_2 \cdot C_A'} \cdot V_r$$

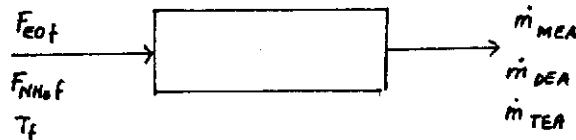
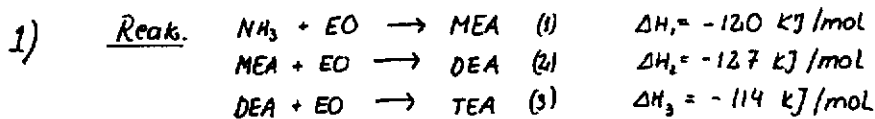
$$C_A' = 0,0625 \rightarrow V_r = 60 \text{ liter}$$

M.B tub

$$q \cdot C_A - q(C_A + dC_A) - r dV_r = 0 \rightarrow -q \cdot dC_A = r \cdot V_r \Rightarrow V_r = -q \int_{C_A'}^{C_A^{ut}} \frac{(1+k_2 C_A)}{k_1 C_A^{0.5}} dC_A =$$

$$= -\frac{q}{k_1} \int_{C_A'}^{C_A^{ut}} (C_A^{-0.5} + k_2 \cdot C_A^{0.5}) dC_A = -\frac{q}{k_1} \left[2C_A^{0.5} + \frac{k_2}{1.5} C_A^{1.5} \right]_{C_A'}^{C_A^{ut}}$$

$$\{ C_A = C_{A1} (1-x) = 0,25 \cdot 0,2 = 0,025 \} \Rightarrow V_r = 12,3 \text{ liter}$$

Tentamen 960127

Givet: $C_p, M_{\text{NH}_3}, M_{\text{EO}}$

Søkt: x_{EO}, T

$$M_{\text{MEA}} = M_{\text{NH}_3} + M_{\text{EO}} = 17 + 44 = 61 \text{ kg/kmol}$$

$$M_{\text{DEA}} = M_{\text{MEA}} + M_{\text{EO}} = 105 \text{ kg/kmol}$$

$$M_{\text{TEA}} = M_{\text{DEA}} + M_{\text{EO}} = 149 \text{ kg/kmol}$$

Utledd:

$$F_{\text{NH}_3} = F_{\text{NH}_3f} + U_{\text{NH}_3} \cdot R_1 = 210 - R_1 \text{ mol/s}$$

$$F_{\text{EO}} = F_{\text{EO}f} + U_{\text{EO}1} \cdot R_1 + U_{\text{EO}2} \cdot R_2 + U_{\text{EO}3} \cdot R_3 = 15 - R_1 - R_2 - R_3 \text{ mol/s}$$

$$F_{\text{MEA}} = \frac{F_{\text{MEA}}}{0} + U_{\text{MEA}1} \cdot R_1 + U_{\text{MEA}2} \cdot R_2 = R_1 - R_2 \text{ mol/s}$$

$$F_{\text{DEA}} = \frac{F_{\text{DEA}}}{0} + U_{\text{DEA}2} \cdot R_2 + U_{\text{DEA}3} \cdot R_3 = R_2 - R_3 \text{ mol/s}$$

$$F_{\text{TEA}} = F_{\text{TEA}f} + U_{\text{TEA}3} \cdot R_3 = R_3 \text{ mol/s}$$

$$R_3 = F_{\text{TEA}} = \frac{0,60 \cdot 0,05}{149 \cdot 10^{-3}} = 0,201 \text{ mol/s}$$

$$R_2 = F_{\text{DEA}} + R_3 = \frac{0,6 \cdot 0,2}{105 \cdot 10^{-3}} + 0,201 = 1,344 \text{ mol/s}$$

$$R_1 = F_{\text{MEA}} + R_2 = \frac{0,6 \cdot 0,75}{67 \cdot 10^{-3}} + 1,344 = 8,721 \text{ mol/s}$$

$$F_{\text{EO}f} \cdot x_{\text{EO}} = R_1 + R_2 + R_3 = 10,266 \Rightarrow x_{\text{EO}} = 0,684$$

U.B $T_f = T_{kt}$

// m_i från F_i

$$0 = (T - T_f) \cdot \dot{m} \cdot C_p + (-\Delta H_1) \cdot R_1 + (-\Delta H_2) \cdot R_2 + (-\Delta H_3) \cdot R_3 = 0$$

$$(T - 350)(210 \cdot 17 + 15 \cdot 44) \cdot 10^{-3} \cdot 6,05 \cdot 10^3 = (8,721 \cdot 120 + 1,344 \cdot 127 + 0,201 \cdot 114) \cdot 10^3 \Rightarrow$$

$$T = 398,5 \text{ K}$$

2) Reaktion: $A \rightarrow R + 2S$; $r = k \cdot C_A$; $k = 0,01$

gasfasreaktion

3dk: Reaktorsystem, min V_r vid $x_A = 0,75$, $F_3 = 3 \text{ mol/s}$

plotta x mot $1/r = 1/kC_A$

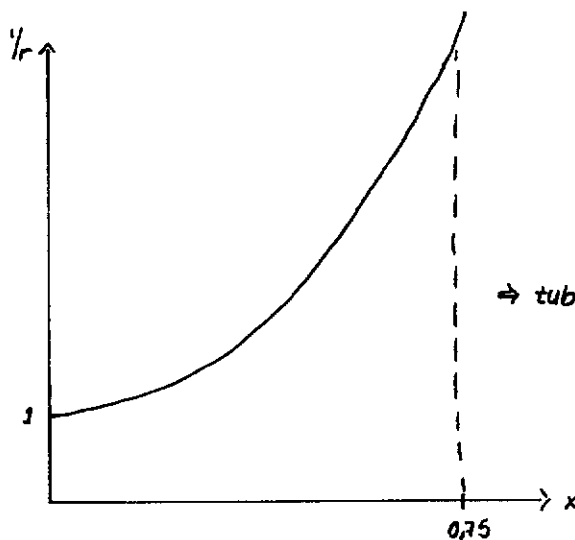
$$C_A = \frac{F_A}{F_{tot}} \cdot \frac{P}{RT} = \frac{F_A}{(F_A + F_R + F_S + F_I)} \cdot \frac{P}{RT} \quad (1)$$

$$\left. \begin{aligned} F_A &= F_{A0}(1-x) \\ F_R &= F_{A0} \cdot x \\ F_S &= 2F_{A0} \cdot x \end{aligned} \right\} \text{insättning i (1)} \Rightarrow$$

$$C_A = \frac{F_{A0}(1-x)}{(F_{A0}(1-x) + 3F_{A0} \cdot x + F_{A0})} \cdot \frac{P}{RT} \Rightarrow C_A = \frac{(1-x)}{2(1+x)} \cdot \frac{P}{RT} \Rightarrow$$

$$\frac{1}{r} = A \cdot \frac{(1+x)}{(1-x)}$$

x	$\frac{(1+x)}{(1-x)}$
0	1
0.1	1.22
0.2	1.5
0.3	1.86
0.4	2.33
0.5	3
0.75	7



M.B m.a.p A över en tub \Rightarrow differentiell M.B

$$F_{A0}(1-x) - F_{A0}(1-x-dx) - r dV_r = 0$$

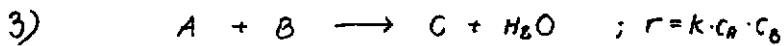
$$dV_r = F_{A0} \frac{dx}{r} \Rightarrow V_r = \int_0^x \frac{2RT \cdot F_{A0}}{k \cdot P} \cdot \frac{(1+x)}{(1-x)} dx = \frac{2RT \cdot F_{A0}}{k \cdot P} \int_0^x \left(\frac{2}{1-x} - 1 \right) dx =$$

$$= \frac{2RT \cdot F_{A0}}{k \cdot P} \left[-2 \ln(1-x) - x \right]_0^x = \frac{2RT \cdot F_{A0}}{k \cdot P} \left[-2 \ln(1-x) - x \right]$$

år 9:3
Grp 1

$$F_3 = 2 \cdot F_M \cdot X \Rightarrow F_{A1} = F_3 / (2X)$$

$$V_r = \frac{2RT F_3}{X \cdot k \cdot P} (-2 \ln(1-X) - X) = \frac{8.314(650+273) \cdot 1}{0.01 \cdot 0.3 \cdot 10^6 \cdot 0.175} (-2 \ln(1-0.75) - 0.75) = \underline{\underline{6.90 \text{ m}^3}}$$



satsreaktor

Givet: $C_A^0, C_B^0, C_A \leftrightarrow t$

Sdkt: k

m.B m.a.p A över en ideal satsreaktor:

$$-r/r = \frac{dn}{dt} = \frac{1}{V_r} \frac{dC_A}{dt} \Rightarrow -r = \frac{dC_A}{dt} \quad (1)$$

$C_B^0 = C_A^0$
molförhållandet mellan A och B $\Rightarrow C_A = C_B$

$$-r = \frac{dC_A}{dt} = -k \cdot C_A^2 = \frac{dC_A}{dt} \Rightarrow -kt = \frac{dC_A}{C_A^2} \quad \{\text{integrera}\}$$

$$-kt = \left[-\frac{1}{C_A} \right]_{C_A^0}^{C_A} = -\left(\frac{1}{C_A} - \frac{1}{C_A^0} \right) \Rightarrow \frac{1}{C_A} = kt + \frac{1}{C_A^0} \quad \text{rätlinje då}$$

t plottas mot $1/C_A$

t	C_A	$1/C_A$
2	0.055	18.18
5	0.035	28.57
10	0.020	50

linjär regressione $\Rightarrow \frac{1}{C_A} = 9.535 + 4.009 \cdot t$

$$\Rightarrow k = 4.009 \text{ m}^3/\text{kmol} \cdot \text{min}$$

Alternativ lösning: $k = \frac{1}{t} \left(\frac{1}{C_A} - \frac{1}{C_A^0} \right)$; $C_A^0 = 0.1 \Rightarrow$

$$\left. \begin{array}{l} k_1 = 4.091 \\ k = 3.719 \\ k = 4.0 \end{array} \right\} \Rightarrow k = \{\text{medelvärde}\} = 3.9 \text{ m}^3/\text{kmol} \cdot \text{min}$$

5) Reaktion: $A \rightarrow B$

Bl 9:4
Grp 1

Givet: $\int_0^{\infty} c dt = 50.65$ $\int_0^{\infty} t c dt = 259.7$ $\int_0^{\infty} t^2 c dt = 1633$

∴ uppehållstidsfördelningen.
 dr, u, k

Sökt: x enl. a) disper. modell med sluten mätsträcka
- b) tanksenmodell

$$E(t) = \frac{c dt}{\int_0^{\infty} c dt} \quad ; \quad \langle t \rangle = \int_0^{\infty} t E(t) dt = \frac{\int_0^{\infty} t \cdot c dt}{\int_0^{\infty} c dt} = \frac{259.7}{50.65} = 5.127 \text{ min}$$

$$\sigma_t^2 = \int_0^{\infty} (t - \langle t \rangle)^2 E(t) dt = \int_0^{\infty} t^2 E(t) dt - \langle t \rangle^2 = \frac{\int_0^{\infty} t^2 c(t) dt}{\int_0^{\infty} c(t) dt} - \langle t \rangle^2$$

$$\sigma_t^2 = \frac{1633}{50.65} - 5.127^2 = 5.951 \text{ min}^2$$

a) Disper. modellen, sluten mätsträcka

$$FS \Rightarrow \frac{\sigma_t^2}{\langle t \rangle^2} = 2 \left(\frac{D_{eq}}{vL} \right) - 2 \left(\frac{D_{eq}}{vL} \right)^2 \left(1 - \frac{e^{-vL/D_{eq}}}{\infty} \right) \Rightarrow$$

$$\frac{\sigma_t^2}{\langle t \rangle^2} = 2 \left(\frac{D_{eq}}{vL} \right) - 2 \left(\frac{D_{eq}}{vL} \right)^2 \Rightarrow \left(\frac{D_{eq}}{vL} \right)^2 - \left(\frac{D_{eq}}{vL} \right) + \frac{1}{2} \frac{\sigma_t^2}{\langle t \rangle^2} = 0 \Rightarrow$$

$$\left(\frac{D_{eq}}{vL} \right) = \frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4} - \frac{1}{2} \frac{\sigma_t^2}{\langle t \rangle^2}} = \begin{cases} 0.130 \text{ OK!} \\ 0.8699 \text{ EJ OK!} \end{cases}$$

$$FS \Rightarrow \frac{1 - X_{reell}}{1 - X_{ideal}} = 1 + (k \langle t \rangle)^2 \frac{D_{eq}}{vL} \Rightarrow X_{reell} = 1 - (1 - X_{ideal}) \left[1 + (k \langle t \rangle)^2 \frac{D_{eq}}{vL} \right]$$

Plösta ta reda på X_{ideal} :

M.B. tub:

$$q \cdot c_{Af} dx - k c_A (1-x) dV_r = 0$$

$$\frac{dx}{(1-x)} = \frac{k}{q} dV_r \Rightarrow -\ln(1-x) = k \cdot V_r / q = k \cdot \tau \Rightarrow$$

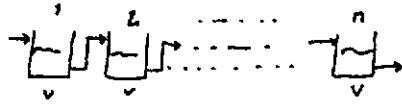
$$\Rightarrow (1-x_i) = e^{-k\tau} \quad \{ \tau = \langle t \rangle \} \Rightarrow x_i =$$

$$X_{\text{reell}} = (1 - (1 - e^{-0.25 \cdot 5,127}) (1 + 0.25^2 \cdot 5,127^2 \cdot 0,13)) = 0.663$$

Rd 9:5
Grp. 1

b) Tankserie modell

$$FS \Rightarrow N = \langle t \rangle^2 / d_t^2 = 5,127^2 / 5,951 = 4.4$$



$$\text{M.B. over tank 1: } q \cdot C_0 - q \cdot C_1 - k \cdot C_1 \cdot V = 0 \Rightarrow \frac{C_1}{C_0} = \frac{q}{kV + q} ; x_1 = 1 - \frac{C_1}{C_0}$$

$$x_1 = 1 - \frac{q}{kV + q}$$

$$\text{M.B. over tank } n: x_n = 1 - \frac{C_n}{C_0} = 1 - \frac{C_n}{C_{n-1}} \cdot \frac{C_{n-1}}{C_{n-2}} \cdot \dots \cdot \frac{C_1}{C_0} = 1 - \left(\frac{q}{kV + q} \right)^n$$

$$V = V_{\text{tot}} / N ; q = V_{\text{tot}} / \tau$$

$$\Rightarrow x_n = 1 - \left(\frac{1}{\frac{kV}{N} + 1} \right)^N = \{ t = \langle t \rangle \} = 1 - \left(\frac{1}{\frac{0.25 \cdot 5,127}{4,4} + 1} \right)^{4,4}$$

$$x_n = 0.676$$

CHALMERS TEKNISKA HÖGSKOLA

Kemisk reaktionsteknik

Tentamen i Kemisk reaktionsteknik

lördagen den 27 januari 1996 kl 14.15 - 19.15 i vv

Said Irandoust är anträffbar för frågor på telefonankn. 3023 och kommer dessutom att vara i tentamenslokalen någon gång mellan 16.00 och 16.30.

Granskning av tentamensrättningen kan ske tidigast den 9/2 1996.

Tillåtna hjälpmedel

Valfri räknare (OBS! inga egna anteckningar)

Formelsamling utgiven av institutionen

TEFYMA

Standard Mathematical Tables

beta Mathematics Handbook

Physics Handbook

Handbook of Chemistry and Physics

Lycka till!

Postadress

412 96 GÖTEBORG

Gatuadress

Kemigården 3

Leveransadress

Kemivägen 10

Fax

031-772 30 35

Telefon

031-772 30 30

Uppgift 1 (material- och värmebalans)

6 poäng

Mono-, di-, och trietanolamin (MEA, DEA resp. TEA) tillverkas genom reaktion mellan ammoniak (NH_3) och etenoxid (EO) enligt



ΔH är givet vid 350 K. Processen genomförs i en adiabatisk reaktor i vätskefas vid 13 MPa. reaktorinflödet består av 15 mol/s EO och 210 mol/s NH_3 vid 350 K.

I reaktorn produceras 0,60 kg etanolaminer/s varav 75 vikts% är MEA, 20 vikts% är DEA och resten TEA. Hur stor är omsättningsgraden map EO och vad är temperaturen i reaktorutflödet?

Medelvärmekapacitivet för lösningen antas vara oberoende av temperatur och sammansättning och uppgår till $6,05 \text{ kJ kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$.

Molmassor: $M_{\text{EO}} = 44 \text{ kg/kmol}$, $M_{\text{NH}_3} = 17 \text{ kg/kmol}$

$$\text{Svar: } X_{\text{EO}} = 0,07 \rightarrow T = 398,5 \text{ K}$$

Uppgift 2 (reaktorkapacitet, ideala reaktorer)

6 poäng

Den homogena gasfasreaktionen $\text{A} \rightarrow \text{R} + 2\text{S}$ skall utföras isotermt och isobart vid $650 \text{ }^\circ\text{C}$ och $0,3 \text{ MPa}$. Du kan välja att använda en ideal tub, en ideal tank, eller en kombination av dessa. Slutomsättningsgraden av reaktanten A skall vara $0,75$.

Bestäm vilket reaktorsystem du vill använda för ovanstående reaktion för att minimera den totala reaktorvolymen och beräkna dessutom den minsta möjliga totalvolymen för att produktionen skall bli 1 mol S/s vid ovan angivna betingelser.

Ingående flöde till reaktorsystemet innehåller 50 mol\% A och resten inert. Reaktionen är av första ordningen map reaktanten A med hastighetskonstanten $k = 0,01 \text{ s}^{-1}$.

$$\text{Svar: tubreaktor, } V_T = 0,90 \text{ m}^3$$

Uppgift 3 (ideal satsreaktor)

5 poäng

Om vätskefasreaktionen



sker i en 90 \% -ig lösning av svavelsyra vid $25 \text{ }^\circ\text{C}$ blir hastighetsekvationen av andra ordningen dvs $r = k \cdot c_A \cdot c_B$ där A och B betecknar de två reaktanterna.

När reaktionen genomfördes i en satsreaktor under dessa betingelser uppmättes följande värden:

Reaktionstid/min	$c_A / (\text{kmol m}^{-3})$
2,0	0,055
5,0	0,035
10,0	0,020

Begynnelsekoncentrationerna av reaktanterna var $c_{A0} = c_{B0} = 0,100 \text{ kmol m}^{-3}$. Bestäm värdet på hastighetskonstanten vid 25 °C i en 90 %-ig svavelsyralösning. *För: $k = 0,0$*

Uppgift 4 (porttransport) VTGÅR 4 poäng

En 1:a ordningens katalytisk gasfasreaktionen A - B har utförts under isoterma betingelser i försöksserier med porösa sfäriska katalysatorpartiklar av två olika storlekar. Reaktionen utfördes under identiska betingelser (samma temperatur och omsättningsgrad) i en "spinning basket" reaktor (en tankreaktor där korgar med katalysator utgör propellerblad som rör om gasen i reaktorn). Resultaten av dessa försök är givna i nedanstående tabell. Av reaktionsbetingelser framgår att man kan bortse från den externa masstransportmotståndet.

Uppskatta Thieles modul och effektivitetsfaktorn för båda katalysatorpartiklar. Hur små bör katalysatorpartiklar vara för att man skall kunna bortse från den interna masstransportmotståndet?

	Obs. reaktionshast. / $(\text{mol (kg kat.)}^{-1} \text{ s}^{-1})$	Partikelradie / m
Försök 1	$3 \cdot 10^{-2}$	0,01
Försök 2	$23 \cdot 10^{-2}$	0,001

Uppgift 5 (uppehållstidsfördelning, icke-ideal reaktor) 4 poäng

Reaktionen A - B som är av första ordningen m.p. reaktanten utföres i en tubreaktor med diametern 10 cm och längden 6,36 m. Upphållstidsfördelningen i reaktorn studerades genom att till inflödet tillsätta en liten mängd spårämne och mäta dess koncentration i utflödet som funktion av tiden. En sådan mätserie redovisas i följande tabell:

t/min	c/(mg/liter)	t/min	c/(mg/liter)
0	0	7	4
1	1	8	3
2	5	9	2,2
3	8	10	1,5
4	10	12	0,6
5	8	14	0
6	6		

Beräkna omsättningsgraden för reaktanten A m h a: (a) dispersionsmodellen, sluten mätsträcka; (b) tankseriemodellen. Vid ifrågavarande betingelser är hastighetskonstanten $k = 0,25 \text{ min}^{-1}$.

För att underlätta räknearbetet ges numeriska värden på följande integraler (beräknade ur tabellen ovan):

$$\int_0^{\bar{t}} c_s(t) dt = 50,65 \quad ; \quad \int_0^{\bar{t}} t c_s(t) dt = 259,7 \quad ; \quad \int_0^{\bar{t}} t^2 c_s(t) dt = 1633$$

(enheter: se tabellen).

$\bar{t} = 0,333$
 $K_r = 0,57\%$

Uppgift 6

(beskrivande)

5 poäng

a) Rita in följande uppgifter för en exoterm jämviktsreaktion i ett x-T diagram (x = omsättningsgrad, T = temperatur):

- 1) Den fullständiga jämviktskurvan (betecknas med a1)
- 2) Driftslinjen för den adiabatiska reaktorn, vars inflödespunkt betecknas med A och vars utflödespunkt vid jämvikt betecknas med B.
- 3) Jämviktspunkten (betecknas med a3) för den isoterma reaktorn vars inflödespunkt är A.
- 4) Kurvor som anger konstant reaktionshastighet (betecknas med r_1, r_2, r_3 osv, där $r_1 > r_2 > r_3 \dots$)
- 5) Funktionen $(\partial r / \partial T) = 0$
- 6) Den punkt på driftslinjen för den adiabatiska reaktorn, där reaktionshastigheten har ett maximum (betecknas med a6).

b) Redogör för begreppet tändningstemperatur och släckningstemperatur för en exoterm process som utförs under adiabatiska förhållanden i en ideal tankreaktor. Angiv dessa temperaturer på T-axeln i lämpligt diagram.

CHALMERS TEKNISKA HÖGSKOLA

Kemisk reaktionsteknik

Tentamen i Kemisk reaktionsteknik

torsdagen den 7 september 1995 kl 14.15 - 19.15 i vv

Said Irandoust är anträffbar för frågor på telefonankn. 3023 och kommer dessutom att vara i tentamenslokalen någon gång mellan 16.00 och 16.30.

Granskning av tentamensrättningen kan ske tidigast den 21/9 1995.

Tillåtna hjälpmedel

Valfri räknare (OBS! inga egna anteckningar)
Formelsamling utgiven av institutionen
TEFYMA
Standard Mathematical Tables
beta Mathematics Handbook
Physics Handbook
Handbook of Chemistry and Physics

Lycka till!

Postadress

412 96 GÖTEBORG

Gatuadress

Kemigården 3

Leveransadress

Kemivägen 10

Fax

031-772 30 35

Telefon

031-772 30 30

Uppgift 1 (materialbalans)

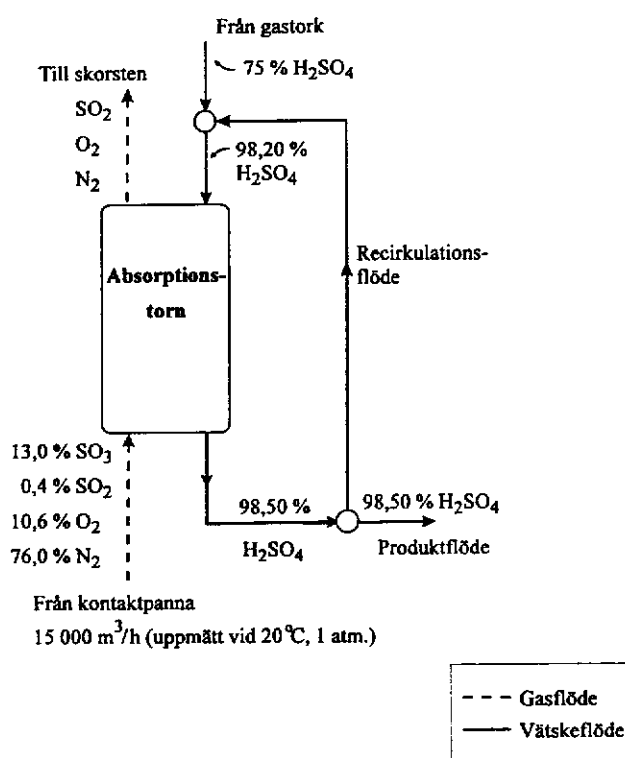
6 poäng

Nedanstående figur visar en absorptionsanläggning i en svavelsyrafabrik. All ingående SO_3 absorberas och reagerar med vatten i ingående utspädda syra och bildar H_2SO_4 enligt



Endast SO_3 absorberas. Procentangivelserna avser volym% i gasfas och vikt% i vätskefas. Beräkna:

- Antal frihetsgrader för absorptionstornet.
- Produktflödet uttryckt i ton/h.
- Recirkulationsflödet uttryckt i ton/h.

**Uppgift 2** (ideal tankreaktor)

6 poäng

Vid en vätskefasprocess föreligger förutom den önskade reaktionen



även bireaktionen



Hastighetsekvationen för huvudreaktionen kan skrivas

$$r_1 = k_1 \cdot c_A$$

och för bireaktionen

$$r_2 = k_2 \cdot c_A$$

Processen utföres i en ideal tankreaktor försedd med kylslinga. Välj den temperatur och värmeväxlaryta som ger maximal produktion av B. Följande data gäller:

Hastighetskonstant, huvudreaktionen,
Hastighetskonstant, bireaktionen,
Reaktionsentalpi, huvudreaktionen,
Reaktionsentalpi, bireaktionen,
Volymflödes hastighet,
Lösningens densitet,

$$k_1 = 3 \cdot 10^8 \cdot e^{-60000/(R \cdot T)} \text{ s}^{-1}$$

$$k_2 = 2 \cdot 10^{14} \cdot e^{-100000/(R \cdot T)} \text{ s}^{-1}$$

$$\Delta H_1 = -35000 \text{ J/mol (oberoende av temp.)}$$

$$\Delta H_2 = +55000 \text{ J/mol (oberoende av temp.)}$$

$$q = 0,05 \text{ m}^3/\text{s}$$

$$\rho = 720 \text{ kg/m}^3 \text{ (oberoende av temp. och omsättningsgrad)}$$

Lösningens värmekapacitet,

$$C_p = 3000 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1} \text{ (oberoende av temp. och omsättningsgrad)}$$

Reaktorns volym,

$$V_r = 1 \text{ m}^3$$

Koncentration av A i inflödet ($x_A = 0$),

$$c_{Af} = 16 \text{ kmol/m}^3$$

Inflödets temperatur,

$$T_f = 30^\circ\text{C}$$

Värmeöverföringskoefficient för värmeväxlaren, $U = 2 \text{ kJ m}^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ K}^{-1}$

$$T_k = 25^\circ\text{C}$$

Kylmediets temperatur (konstant),

Uppgift 3 (ideal sats- och tubreaktor)

6 poäng

En konsekutiv vätskefasreaktion

A - B - C

studeras i en ideal satsreaktor med volymen 1 liter. Mängden katalysator i reaktorn är 10 g. Därvid erhålls följande resultat:

tid/min	c_A /(mol/l)	c_B /(mol/l)	c_C /(mol/l)
0	1,00	0	0
100	0,75	0,20	0,05
200	0,48	0,40	0,12
300	0,21	0,57	0,22
400	0,04	0,52	0,44
500	0,01	0,30	0,69
600	0,00	0,12	0,88

Du har nyligen blivit anställd på kemiföretaget KRT-AB och skall som första uppgift dimensionera en ideal tubreaktor för ovanstående reaktionssystem. Hur mycket katalysator krävs då för att få maximalt utbyte av B vid en produktion av 100 kg B/timme, samt vad blir uppehållstiden? Tubreaktorn innehåller 2000 kg katalysator/m³ lösning. Inflödets sammansättning är samma i tubreaktorn som i satsreaktorn.

Molmassan för B är 100 g/mol.

Uppgift 4 (porttransport)

5 poäng

En första ordningens katalytisk reaktion, $A \rightarrow R$, sker i närvaro av porösa katalysatorpartiklar. Dessa är sfäriska med det katalytiskt aktiva materialet jämnt belagt på insidan av porerna. Man vet att reaktantkoncentrationen halvvägs mellan den yttre ytan och partikelns mitt motsvarar 10% av den yttre koncentrationen. Reaktionen antas vara isoterm. Följande data gäller:

Den yttre koncentrationen av reaktanten A, $c_{AS} = 0,001 \text{ mol/dm}^3$
Partikelradie, $r_p = 10^{-3} \text{ cm}$

UTGÅRBeräkna:

- Reaktantkoncentrationen vid ett avstånd av $7 \cdot 10^{-4} \text{ cm}$ från partikelns mitt.
- Partikeldiameter vid vilken effektivitetsfaktorn blir 0,6.

Ledning:

För en porös sfär gäller att

$$c_A(r) = c_{AS} \cdot r_p \cdot \sinh(\phi \cdot r/r_p) / (r \cdot \sinh \phi)$$

där r och ϕ betecknar avståndet från partikelns mitt resp Thieles modul.

Uppgift 5 (uppehållstidsfördelning, icke-ideal reaktor)

4 poäng

Man har utfört ett pulsförsök i en packad bädd enligt följande. Pulsen injicerades i bädden vid ett avstånd motsvarande ca 4 partikeldiametrar från reaktoröppningen. Pulsen är ej perfekt utan har variansen $\sigma^2 = 15 \text{ s}^2$. Pulsen uppmättes 3 meter längre bort där variansen var $\sigma^2 = 50 \text{ s}^2$. Den linjära hastigheten genom bädden var 0,01 m/s. Beräkna:

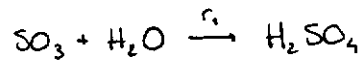
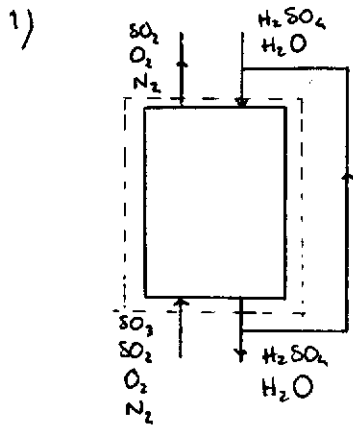
- Dispersionskoefficienten
- Omsättningsgraden vid mätpunkten för en första ordningens reaktion med hastighetskonstanten $k = 0,02 \text{ s}^{-1}$.

Uppgift 6 (beskrivande)

3 poäng

Totalförloppet vid en heterogent katalyserad gasfasreaktion kan delas upp i olika delsteg.

- Vilka delsteg?
- Ange vilka av delstegen som är fysikaliska resp kemiska.
- Vad menas med hastighetsbestämmande steg?



a) Frihetsgradsanalys:

- Se om problemet är lösbart ($df = 0$)
- Se var man ska börja om man har komplicerat M-B-problem. (d.v.s där $df = 0$)

$df = \text{antal ober. flödesvariabler} - \text{antal spec. flödesvar.} -$

$- \text{antal oberoende balanskv.} - \text{antal hjälpsamband.}$

$df = 0 \Rightarrow$ entydig lösning.

$df < 0$: överbestämt

$df > 0$: underbestämt ∞ antal lösning.

Adsorptionstornet:

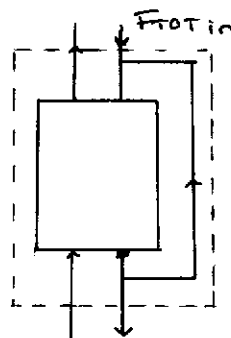
Flödesvariabler: $4 + 3 + 2 + 2 + 1 = 12$

Balanskv: $4 + 2 = 6$

Spe. flödesvar: $4 + 1 + 1 = 6$

Hjälpsamband 0 \rightarrow $df = 0$

b) Produktflöde
Ny systemgräns



Total M.B:

$$i_{in} - u_{out} - reagerat - 0 \quad F_{TOTin} = F_{TOTout}$$

$$SO_3 \quad F_{SO_3in} - 0 - R = 0 \quad \Rightarrow \quad R = F_{SO_3in}$$

$$H_2SO_4 \quad y_{sin} \cdot F_{TOTin} - y_{sut} \cdot F_{TOTout} + R = 0 \quad \Rightarrow \quad F_{TOTout} = \frac{R}{y_{sut} - y_{sin}}$$

$$H_2O \quad y_{H_2Oin} \cdot F_{TOTin} - y_{H_2Oout} \cdot F_{TOTout} - R = 0$$

$$R = q \cdot C_{SO_3in} = q \cdot y_{SO_3in} \cdot \frac{P}{R \cdot T} = 8,106 \cdot 10^4 \text{ mol/h}$$

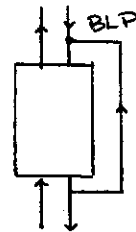
$$y_i = \frac{\frac{m_i}{m_{tot}} / M_i}{\sum (\frac{m_i}{m_{tot}} / M_i)} = \frac{x_i / M_i}{\sum (x_i / M_i)} \quad ; \quad y_{sut} = \frac{0,985 / 98,1}{0,985 / 98,1 + 0,015 / 18} = 0,9234$$

$$y_{sin} = \frac{0,75 / 98,1}{0,75 / 98,1 + 0,25 / 18} = 0,3550 \quad ; \quad F_{TOTout} = \frac{8,106 \cdot 10^4}{0,9234 - 0,3550} = 3426 \cdot 10^5 \text{ mol/h}$$

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\dot{m}_{totout}}} &= \dot{m}_{SO_3out} + \dot{m}_{H_2Oout} = \dot{n}_{SO_3} \cdot M_S + \dot{n}_{H_2Oout} \cdot M_{H_2O} = \\ &= y_{sut} \cdot F_{TOTout} \cdot M_S + y_{H_2O} \cdot F_{TOTout} \cdot M_{H_2O} = \underline{\underline{13,1 \text{ ton/h}}} \end{aligned}$$

c)

\dot{m}_{rec} sökes



M.B m.a.p H_2SO_4 över BLP:

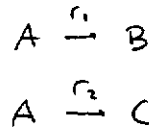
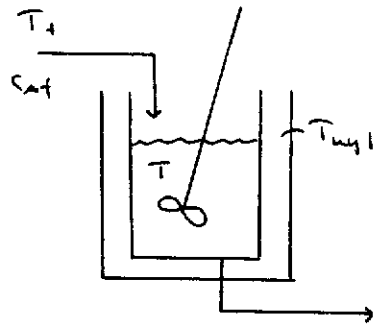
$$y_{sin} \cdot F_{TOTin} + y_{sut} \cdot F_{TOTrec} - y_{sinreaktor} (F_{TOTin} + F_{TOTrec})$$

$$\Rightarrow F_{TOTrec} = \frac{(y_{sinreaktor} - y_{sin}) F_{TOTin}}{y_{sut} - y_{sinreaktor}} =$$

$$= \left\{ y_{sinreaktor} = \frac{0,982 / 98,1}{0,982 / 98,1 + 0,018 / 18} = 0,9092 \right\} = 5,566 \cdot 10^6 \text{ mol/h}$$

$$\underline{\underline{\dot{m}_{totrec}}} = y_{sut} \cdot F_{TOTrec} \cdot M_S + y_{H_2Oout} \cdot M_{H_2O} \cdot F_{TOTrec} = \underline{\underline{512 \text{ ton/h}}}$$

2)



$$r_1 = k_1 \cdot C_A$$

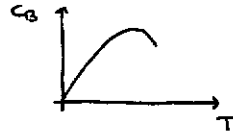
$$r_2 = k_2 \cdot C_A$$

$$k_1 = A_1 e^{-\frac{E_1}{RT}}$$

$$k_2 = A_2 e^{-\frac{E_2}{RT}}$$

Bestäm T så att maxprod. av B uppnås.

$$\frac{dc_B}{dT} = 0$$



$c_B(T)$ fås ur M.B. u.p. B över tanken:

$$0 - q \cdot c_B + r_1 \cdot V_r = 0$$

$$c_B = k_1 \cdot C_A \cdot \frac{V_r}{q} = k_1 \cdot C_A \cdot \tau$$

M.B. u.p. A över tanken:

$$q \cdot c_{Af} - q \cdot c_A + v_{A1} \cdot r_1 \cdot V_r + v_{A2} \cdot r_2 \cdot V_r = 0$$

$$q \cdot c_{Af} - q \cdot c_A - (k_1 \cdot C_A + k_2 \cdot C_A) \cdot V_r = 0$$

$$\Rightarrow C_A = \frac{q \cdot c_{Af}}{q + (k_1 + k_2) V_r} = \frac{c_{Af}}{1 + (k_1 + k_2) \tau}$$

$$\Rightarrow c_B = \frac{k_1 \cdot \tau \cdot c_{Af}}{1 + (k_1 + k_2) \cdot \tau}$$

$$\frac{dc_B}{dT} = \frac{\frac{dk_1}{dT} \tau \cdot c_{Af} (1 + (k_1 + k_2) \cdot \tau) - k_1 \cdot \tau \cdot c_{Af} \left(\left(\frac{dk_1}{dT} + \frac{dk_2}{dT} \right) \tau \right)}{(1 + (k_1 + k_2) \cdot \tau)^2} = 0$$

$$\frac{dk_1}{dT} = \frac{E_1}{RT^2} A_1 e^{-\frac{E_1}{RT}} = \frac{E_1}{RT^2} k_1$$

$$\frac{dk_2}{dT} = \frac{E_2}{RT^2} \cdot k_2$$

$$\Rightarrow \frac{E_1}{RT^2} k_1 (1 + k_1 \tau + k_2 \tau) = k_1 \left(\frac{E_1}{RT^2} \cdot k_1 + \frac{E_2}{RT^2} k_2 \right) \cdot \tau$$

$$E_1 + E_1 k_1 \tau + E_1 k_2 \tau = E_1 k_1 \tau + E_2 k_2 \tau$$

$$\Rightarrow k_2(T_{opt}) = \frac{E_1}{(E_2 - E_1) \tau} = 0.075 \text{ s}^{-1} \Rightarrow \underline{\underline{T_{opt} = 338.6 \text{ K}}}$$

Bestäm värmeväxlararean A:

R09:4
Grp 2.

V.B över tanken:

$$\dot{Q}_{in} - \dot{Q}_{out} - \dot{Q}_{nyl} = \dot{Q}_r = 0$$

$$\begin{aligned}\dot{Q}_r &= R_1(-\Delta H)_1 + R_2(-\Delta H)_2 = r_1 \cdot V_r(-\Delta H)_1 + r_2 V_r(-\Delta H)_2 = \\ &= (k_1 c_A(-\Delta H)_1 + k_2 c_A(-\Delta H)_2) \cdot V_r\end{aligned}$$

c_A fås ur materialbalans:

$$c_A = \frac{c_{Af}}{1 + (k_1(T_{opt}) + k_2(T_{opt})) \cdot \tau} = \left\{ k_1(T_{opt}) = 0.1665 \text{ s}^{-1} \right\} = 2.744 \text{ kmol/m}^3$$

V.B över tanken:

$$\begin{aligned}q_p C_p (T_f - T_{ret}) - q_p C_p (T_{opt} - T_{ret}) - UA(T_{opt} - T_{nyl}) + \\ + (k_1(-\Delta H)_1 + k_2(-\Delta H)_2) \cdot c_A \cdot V_r = 0\end{aligned}$$

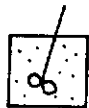
$$\Rightarrow \underline{\underline{A}} = \frac{q_p C_p (T_f - T_{opt}) + (k_1(-\Delta H)_1 + k_2(-\Delta H)_2) \cdot c_A \cdot V_r}{U(T_{opt} - T_{nyl})} = \underline{\underline{10.46 \text{ m}^2}}$$

3)



r_1 och r_2 är okända

labskala:

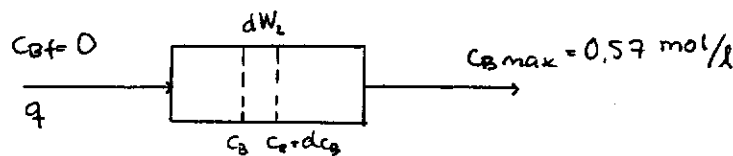


$$\begin{aligned}V_1 &= 1 \text{ l} \\ W_1 &= 10 \text{ g}\end{aligned}$$

industriell skala



Ideal tub:



M.B. m.a.p B över dW_2 :

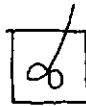
$$q \cdot c_B - q(c_B + dc_B) + (r_1 - r_2) dW_2 = 0$$

$$-q dc_B = -(r_1 - r_2) dW_2$$

$$\int_{c_B^+}^{c_{B,max}} \frac{1}{r_1 - r_2} dc_B = \frac{1}{q} \int_0^{W_2} dW_2$$

$$\frac{W_2}{q} = \int_{c_B^+}^{c_{B,max}} \frac{1}{r_1 - r_2} dc_B$$

ideal satsreaktor:



R89.5
Erp2

M.B. u. ap B:

$$0 - 0 + (r_1 - r_2) \cdot W_1 = \frac{dn_B}{dt} = v_{r1} \frac{dc_B}{dt}$$

$$\Rightarrow \int_0^{c_{Bmax}} \frac{1}{r_1 - r_2} dc_B = \int_0^{t_{max}} dt \cdot \frac{W_1}{V_{r1}}$$

$$\frac{W_1}{V_{r1}} \cdot t_{max} = \int_0^{c_{Bmax}} \frac{1}{r_1 - r_2} dc_B \quad (1)$$

$$\Rightarrow \frac{W_2}{q} = \frac{W_1}{V_{r1}} \cdot t_{max}$$

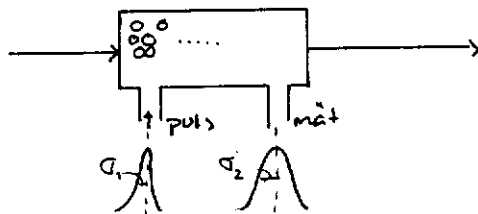
$$\dot{m}_{out} = F_{out} \cdot M_B = q \cdot c_{Bmax} \cdot M_B \Rightarrow q = \frac{\dot{m}_{out}}{c_{Bmax} \cdot M_B}$$

$$\frac{W_2}{c_{Bmax} \cdot M_B} = \frac{\dot{m}_{out}}{c_{Bmax} \cdot M_B} \cdot \frac{W_1}{V_{r1}} \cdot t_{max} = \underline{\underline{87.72 \text{ kg}}}$$

$$\underline{\underline{\tau}} = \frac{V_{r2}}{q} = \frac{W_2 / \rho_{uat}}{\frac{\dot{m}_{out}}{c_{Bmax} \cdot M_B}} = \underline{\underline{1.5 \text{ min}}}$$

5) a)

Pachad bädd.



öppen mätsträcka.

$$\langle t \rangle = \frac{L}{v} \left(1 + 2 \frac{Dea}{v \cdot L} \right) \quad (1)$$

$$\frac{\sigma^2}{\langle t \rangle^2} = 2 \frac{Dea}{v \cdot L} + 8 \left(\frac{Dea}{v \cdot L} \right)^2 \Rightarrow \left(\frac{Dea}{v \cdot L} \right)^2 + \frac{1}{4} \frac{Dea}{v \cdot L} - \frac{1}{8} \frac{\sigma^2}{\langle t \rangle^2} = 0$$

$$\Rightarrow \frac{Dea}{v \cdot L} = -\frac{1}{8} \pm \sqrt{\frac{1}{64} + \frac{1}{8} \frac{\sigma^2}{\langle t \rangle^2}} \quad (2)$$

$$\sigma^2 = \sigma_2^2 - \sigma_1^2 \quad \text{Antag att } \sigma^2 \text{ beror linjärt på } L.$$

~~Iterera~~ Iterera mellan (1) o (2). Gissa start på $\langle t \rangle$

$$\langle t \rangle_1 = 300 \text{ s} \cdot \left\{ \left(\frac{L}{v} \right) \right\} \quad \left(\frac{Dea}{v \cdot L} \right)_1 = 1.943 \cdot 10^{-4} \quad (-0.25 \text{ andra roken})$$

$$\langle t \rangle_2 = 300.12 \text{ s} \quad \left(\frac{Dea}{v \cdot L} \right)_2 = 1.941 \cdot 10^{-4}$$

$$\underline{\underline{Dea}} = \frac{Dea}{v \cdot L} \cdot v \cdot L = \underline{\underline{5.842 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}}}$$

$$\sigma^2 \sim L^2 ?$$

$$\sigma^2 = A \cdot L + B \left(\frac{D_{ea}}{v} \right)^4 \cdot \frac{1}{L^2} + C \cdot \left(\frac{D_{ea}}{v} \right)^3 \cdot \frac{1}{L} = A \cdot L$$

b) X_{reell} för r = k · c

$$\frac{1 - X_{reell}}{1 - X_{ideal}} = (1 + (k \cdot \tau)^2) \frac{D_{ea}}{v_0 \cdot L}$$

$$v_0 = 0.01 \text{ m/s}$$

↑
för packad bädd

X_{ideal} fr. M.B över tub:

$$-q dc = k \cdot c \cdot dV_r$$

$$\int_{c_{in}}^{c_{ut}} \frac{1}{c} dc = - \int_0^{V_r} \frac{k}{q} dV_r$$

$$\ln \frac{c_{ut}}{c_{in}} = - \frac{k \cdot V_r}{q}$$

$$\frac{c_{ut}}{c_{in}} = e^{-k \cdot \tau}$$

$$X_{ideal} = 1 - \frac{c_{ut}}{c_{in}} = 1 - e^{-k \cdot \tau} = 0.99752$$

$$1 - X_{reell} = (1 - X_{ideal}) (1 + (k \cdot \tau)^2) \frac{D_{ea}}{v \cdot L} = 2.496 \cdot 10^{-3}$$

$$\underline{\underline{X_{reell} = 0.9975}}$$

CHALMERS TEKNISKA HÖGSKOLA

Kemisk reaktionsteknik

Tentamen i Kemisk reaktionsteknik

lördagen den 27 maj 1995 kl 14.15 - 19.15 i mn

Said Irandoust är anträffbar för frågor på telefonankn. 3023 och kommer dessutom att vara i tentamenslokalen någon gång mellan 16.00 och 16.30.

Granskning av tentamensrättningen kan ske tidigast den 15/6 1995.

Tillåtna hjälpmedel

Valfri räknare (OBS! inga egna anteckningar)
Formelsamling utgiven av institutionen
TEFYMA
Standard Mathematical Tables
beta Mathematics Handbook
Physics Handbook
Handbook of Chemistry and Physics

Vi ber dig att efter tentamen fylla i den resterande delen av kursenkäten. Kursenkätblanketten sitter fast längst bak i tentan. Avskilj denna och lämna in den separat.

Lycka till!

Postadress

412 96 GÖTEBORG

Gatuadress

Kemigården 3

Leveransadress

Kemivägen 10

Fax

031-772 30 35

Telefon

031-772 30 30

Uppgift 1 (materialbalans)

6 poäng

I en anläggning för syntes av ammoniak ur kväve och väte består det färskt flödet av (mol%) 74% H_2 , 24,5% N_2 och 1,5% inert förening. Utflödet från reaktorn separeras i en frysanläggning och ger ett 75% utbyte av ren ammoniak räknat på den mängd ammoniak som finns i reaktorutflödet. Separatorm har sålunda två flöden ut, ett med ren ammoniak och ett med resterande gas som återförs via en splitter till reaktorns inflöde. I splittern tas en viss mängd gas ut ur systemet för att hålla mängden inert ämne på en konstant nivå i systemet. Avtappningen ur systemet avpassas så att reaktorinflödet (färskt inflöde plus recirkulationsflöde) innehåller 18% inert förening och att omsättningsgraden över reaktorn är 65% m.p. N_2 .

- a) Är problemet lösbart? Motivera mha frihetsgradsanalys.
- b) Om problemet är lösbart, ställ upp det ekvationssystem som krävs för att kunna beräkna sammansättningen i recirkulationsflödet (lösning av ekvationssystemet ej nödvändigt).

Svar: a) Ja
b) 44% H_2
11% N_2
12% inert
5 poäng

Uppgift 2 (ideal tank- och tubreaktor)

5 poäng

Den homogena gasfasreaktionen $A \rightarrow R + 2S$ skall utföras isotermt och isobart vid 650 °C och 0,3 MPa i ett reaktorsystem bestående av två lika stora seriekopplade reaktorer, en ideal tank och en ideal tub. Slutomsättningsgraden av reaktanten A skall vara 0,75.

Beräkna volymerna för följande alternativ: a) tuben först, b) tanken först, vid en produktion av 1 mol S/s vid ovan angivna betingelser. Ingående flöde till reaktorsystemet innehåller 50 % A och resten inert. Reaktionen är av första ordningen m.p. reaktanten A med hastighetskonstanten $k = 0,01 \text{ s}^{-1}$.

Svar: a) 4 m³
b) 4 m³

Uppgift 3 (ideal semi-satsreaktor)

6 poäng

En katalytisk vätskeprocess utförd i satsreaktor startas oftast genom att satsa reaktant i reaktorn mha pumpning. När reaktionsvolymen är uppnådd så satsas mängden katalysator i. Med detta förfaringssätt erhålles ingen reaktion under själva påfyllandet. För att påskynda reaktionen kan man satsa katalysatorn med en gång och låta reaktionen fortgå under påfyllningen. Först fyller man dock på en viss volym reaktantlösning ($V_{r0} \text{ m}^3$) för att katalysatorn skall kunna blandas ordentligt. Under ett sådant förfaringssätt kommer alltså reaktanten att ha reagerat till viss del när vi har uppnått den önskvärda reaktionsvolymen ($V_r \text{ m}^3$). Inflödet till reaktorn består av enbart reaktanten A.

Beräkna omsättningsgraden av reaktant A när reaktorn precis har blivit full. Följande övriga förutsättningar gäller:

1:a ordningens reaktion:

Hastighetskonstant:

Koncentration av reaktant i inflödet till reaktorn:

Volymflöde hastighet av reaktant till reaktorn vid påfyllning:

Reaktionsvolym vid full reaktor:

Reaktionsvolym då katalysator satsas:

Katalysatormängd satsad:

 $A \rightarrow B$ $k = 0,1 \text{ m}^3/(\text{s}\cdot\text{kg kat.})$ $c_{Af} = 0,5 \text{ kmol/m}^3$ $q_f = 0,1 \text{ m}^3/\text{s}$ $V_r = 5,0 \text{ m}^3$ $V_{r0} = 0,5 \text{ m}^3$ $W = 0,5 \text{ kg}$ Svar: $x = 0,35$

Uppgift 4 (portransport)

5 poäng

Katalysatorpartikelstorleken inverkan på reaktionshastigheten vid omvända vattengaskonverteringen



studerades i avsikt att eliminera inverkan av porrdiffusionsmotståndet vid senare mätserier. Följande försöksserier med tre olika kornstorlekar genomfördes i en differentialreaktor (kan beräkningsmässigt betraktas som en ideal tank):

Försök	1	2	3	4	5	6
Medelkornstorlek/mm	0,06	0,06	0,31	0,31	0,80	0,80
Gassammansättning i utgående flöde %						
CO	2,5	2,3	2,3	2,2	0,90	1,0
CO ₂	24,9	24,6	23,9	23,8	23,0	22,4

Utred vilken kornstorlek som inte får överskridas för att inflytandet av porrdiffusion på den totala reaktionshastigheten skall kunna försummas. Fullständig motivering krävs.

Gemensamma data vid ovanstående försök:

Temperatur:	495°C
Tryck:	0,1 MPa
Ingående flödes hastighet av H ₂ :	1,50 · 10 ⁻⁵ m ³ /s
Ingående flödes hastighet av CO ₂ :	0,5 · 10 ⁻⁵ m ³ /s
Katalysatormängd:	6 · 10 ⁻⁵ kg.

Inert gas:

Varierande mängd

Uppgift 5 (uppehållstidsfördelning, icke-ideal reaktor)

4 poäng

För en isoterm arbetande reaktor har halten spårämne i utflödet, efter en tillsatt puls i reaktorinflödet, mätts och data ges i nedanstående tabell:

<u>t/min</u>	<u>pulssvar/(mg/l)</u>
0,1	0,2
0,2	0,17
1,0	0,15
2,0	0,125
5,0	0,07
10	0,02
30	0,001

a) Vilken typ av ideal flödesreaktor liknar denna reaktor mest? Motivera.

b) För en första ordningens isoterm reaktion ($A \rightarrow R$, $k = 0,15 \text{ min}^{-1}$) bestäm omsättningsgraden av reaktanten A i en icke-ideal reaktor med uppehållstidsfördelning som ovan. Inflödet innehåller rent A.

Svar: a) Tank

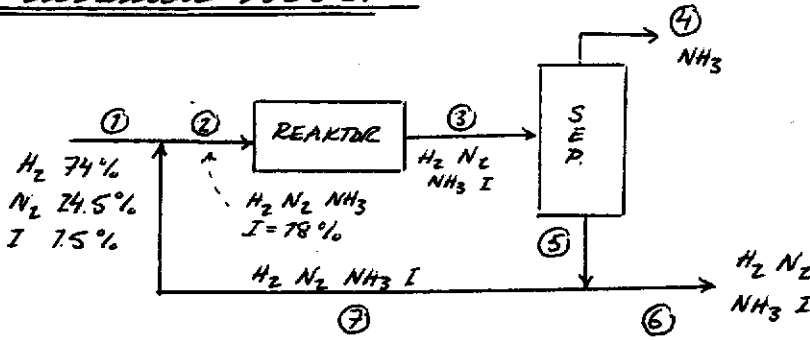
b) $x = 0,42$

Uppgift 6 (beskrivande)

4 poäng

- a) Redogör varför industriella exoterma jämviktsprocesser ofta utföres adiabatiskt.
- b) Beskriv hysteresisfenomenet vid tändning och släckning av en ideal tankreaktor som arbetar under adiabatiska betingelser då koncentrationen av reaktanten i inflödet tillåts variera.
-

1.



a) Frihetsgradsanalys över anläggningen

Antal variabler: $3 + 4 + 4 + 1 + 4 + 4 + 4 + 1 = 25$
reaction

Balanskv. $4 + 4 + 4 + 4 = 16$
bl pld reaktor sep. delupplut

Specificerade flödesvariabler $2 + 1 = 3$

Hjälpsamband: Omsättningsgrad = 1

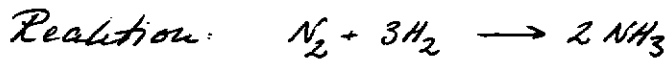
Utbytte = 1

Delningsförh. = 3

$\Sigma = 1$

Räknetas \Rightarrow antal frihetsgrader = 0 LÖSBART!

b) Räknetas: 100 mol/s färsk inflöde: $F_{1, \text{tot}} = 100 \text{ mol/s}$



Inför reaktionsomsättning $R \text{ mol/s}$ mop N_2

Delningsförh. $y = \frac{F_2}{F_6}$ Produktflöde NH_3 : $F_{2, NH_3} = z$

Flöden

Komponent:	1	2	3	6	7
H_2	74	$y(74 - 3R) + 74$		$74 - 3R$	$y(74 - 3R)$
N_2	24.5	$y(24.5 - R) + 24.5$		$24.5 - R$	$y(24.5 - R)$
I	1.5	$1.5(1 + y)$		1.5	$y \cdot 1.5$
NH_3		$y(2R + z)$	$(1 + y)(2R - z) + z$	$2R - z$	$y(2R - z)$
		$\Sigma = 100(1 + y) - y(2R + z)$			

Inert in reaktor: $\frac{1.5(1+y)}{100(1+y) - y(2R+z)} = 0.78$

Omsättningsgrad: $\frac{R}{y(24.5-R) + 24.5} = 0.65$
(över reaktorn)

Utbytte $0.75[(1+y)(2R-z) + z] = z$
(över hela anläggningen)

2. Gasfasreaktion $A \rightarrow 2R + S$ $r = kC_A$

Givet: $x_A = 0.75$ $y_{Fj} = 0.5$
 $F_S^{ut} = 1 \text{ mol/s}$ $k = 0.07 \text{ s}^{-1}$
 $y_{Fj} = 0.5$

Sökt: Bestäm reaktorvolymerna för systemen

- a) Tub-tank
 - b) Tank-tub
- $V_{tub} = V_{tank}$ i båda fallen

$F_S^{ut} = 2F_{Fj}x_A \Rightarrow F_{Fj} = \frac{F_S^{ut}}{2x_A} = \frac{2}{3} \text{ mol/s}$

$F_A^{ut} = F_{Fj}(1-x_A) = \frac{2}{3}(1-0.75) = \frac{1}{6} \text{ mol/s}$

Beräkna F_{tot} :

$$F_A = F_A$$

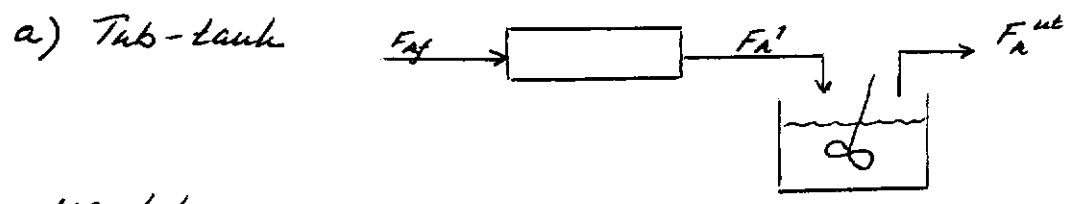
$$F_R = F_{Fj} - F_A$$

$$F_S = 2(F_{Fj} - F_A)$$

$$F_L = F_{Fj}$$

$$F_{tot} = 4F_{Fj} - 2F_A$$

$C_A = \frac{F_A \cdot P}{F_{tot} RT} = \frac{F_A \cdot P}{4F_{Fj} - 2F_A RT}$



MB tub

$F_A - (F_A + dF_A) - k \frac{F_A}{4F_{Fj} - 2F_A} \frac{P}{RT} dV_{tub} = 0$

$$V_{\text{tub}} = -\frac{RT}{kP} \int_{F_A}^{F_A^1} \frac{4F_{A1} - 2F_A}{F_A} dF_A = -\frac{RT}{kP} \left[4F_{A1} \ln F_A - 2F_A \right]_{F_A}^{F_A^1} \stackrel{\text{Rö 9.3}}{=} \stackrel{\text{Grp 3}}{=} \\ = \frac{RT}{kP} \left[4F_{A1} \ln \frac{F_{A1}}{F_A^1} - 2F_{A1} + 2F_A^1 \right]$$

MB tank

$$F_A^1 - F_A^{\text{ut}} - k \frac{F_A^{\text{ut}}}{4F_{A1} - 2F_A^{\text{ut}}} \frac{P}{RT} V_{\text{tank}} = 0$$

$$V_{\text{tank}} = \frac{RT}{kP} \frac{(F_A^1 - F_A^{\text{ut}})(4F_{A1} - 2F_A^{\text{ut}})}{F_A^{\text{ut}}}$$

$$V_{\text{tub}} = V_{\text{tank}} \Rightarrow$$

$$4F_{A1} \ln \frac{F_{A1}}{F_A^1} - 2F_{A1} + 2F_A^1 = \frac{(F_A^1 - F_A^{\text{ut}})(4F_{A1} - 2F_A^{\text{ut}})}{F_A^{\text{ut}}}$$

$$\Rightarrow 4F_{A1}F_A^{\text{ut}} \ln \frac{F_{A1}}{F_A^1} - 2F_{A1}F_A^{\text{ut}} + 2F_A^1F_A^{\text{ut}} = 4F_{A1}F_A^1 - 2F_A^1F_A^{\text{ut}} - 4F_{A1}F_A^{\text{ut}} + 2(F_A^{\text{ut}})^2$$

$$\Rightarrow F_A^1 = \frac{4F_{A1}F_A^{\text{ut}} \ln(F_{A1}/F_A^1) + 2F_{A1}F_A^{\text{ut}} - 2(F_A^{\text{ut}})^2}{4F_{A1} - 4F_{A1}^{\text{ut}}}$$

Insätt av siffror:

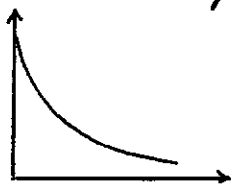
$$F_A^1 = \frac{\frac{2}{3} \cdot \frac{1}{6} \ln \frac{2}{3F_A^1} + \frac{1}{2} \cdot \frac{2}{3} \cdot \frac{1}{6} - \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{6^2}}{\frac{2}{3} - \frac{1}{6}} = \frac{2}{9} \ln \frac{2}{3F_A^1} + \frac{1}{12}$$

$$\text{Gissa } F_A^1 = 0.2 \Rightarrow HL = 0.351$$

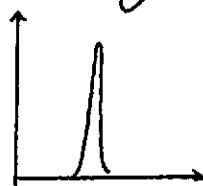
$$\Rightarrow HL = 0.278$$

$$\text{Dä för } \underline{V_{\text{tub}} = 3.98 \text{ m}^3 = V_{\text{tank}}}$$

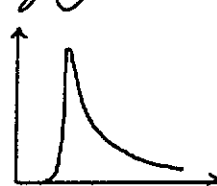
b) Linjär process \Rightarrow blandningsmodell saknar betydelse
Samma uppehållstidsfördelning för tub-tank och tank-tub



tank



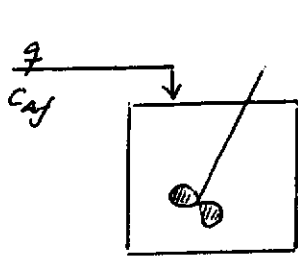
tub



tank-tub el. tub-tank

$$\text{Dä för } \underline{V_{\text{tank}} = V_{\text{tub}} = 4 \text{ m}^3}$$

3 Semi-batchreaktor



$c_A = c_{Af}(1 - x_A)$

$W = 0.5 \text{ kg}$

Tanken fylld: $t = t_1 \quad V_1 = 5 \text{ m}^3$

$q = 0.1 \text{ m}^3/\text{s}$

$c_{Af} = 0.5 \text{ kmol/m}^3$

$k = 0.1 \text{ m}^3/\text{s} \cdot \text{kg kat}$

$t_0 = 0$

$V_0 = 0.5 \text{ m}^3$

Sökt: Bestäm x_A när tanken blivit fylld

MB totalt $q = \frac{dV}{dt} \Rightarrow V = V_0 + qt$

map A $q c_{Af} - k c_A W = \frac{d n_A}{dt} = V \frac{d c_A}{dt} + c_A \frac{dV}{dt}$

$\Rightarrow \frac{d c_A}{dt} + \frac{q + kW}{V_0 + qt} c_A = \frac{q c_{Af}}{V_0 + qt} \quad (1)$

Låt $f'(t) = \frac{q + kW}{V_0 + qt} \Rightarrow f(t) = \int_0^t \frac{q + kW}{V_0 + qt} dt = \left(1 + \frac{kW}{q}\right) \ln(V_0 + qt)$

$e^{f(t)} = e^{\left(1 + \frac{kW}{q}\right) \ln(V_0 + qt)} = (V_0 + qt)^{1 + \frac{kW}{q}}$

Mult. $e^{f(t)}$ med ekv. (1)

$e^{f(t)} \frac{d c_A}{dt} + f'(t) e^{f(t)} c_A = e^{f(t)} \frac{q c_{Af}}{V_0 + qt}$

$\Rightarrow \frac{d}{dt} \left(e^{f(t)} c_A \right) = e^{f(t)} \frac{q c_{Af}}{V_0 + qt}$

$e^{f(t)} c_A = \int_0^{t_1} e^{f(t)} \frac{q c_{Af}}{V_0 + qt} dt = \int_0^{t_1} q c_{Af} (V_0 + qt)^{\frac{kW}{q}} dt =$

$= \left\{ \begin{array}{l} V = V_0 + qt \quad t=0 \Rightarrow V=V_0 \\ dV = q dt \quad t=t_1 \Rightarrow V=V_1 \end{array} \right\} = \int_{V_0}^{V_1} c_{Af} V^{\frac{kW}{q}} dV =$

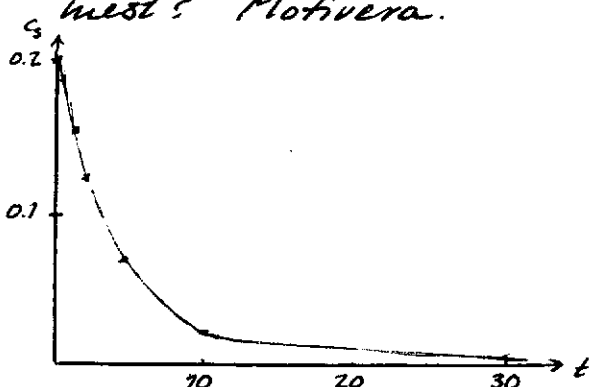
$= \frac{c_A}{1 + \frac{kW}{q}} \left(V_1^{1 + \frac{kW}{q}} - V_0^{1 + \frac{kW}{q}} \right) = 3.609 \Rightarrow c_A = 0.323$

$\Rightarrow x_A = 1 - \frac{c_A}{c_{Af}} = \underline{\underline{0.354}}$

5. Upphållstidsfördelning, icke-ideal reaktor

t (min)	pulssvar c_s (mg/L)	$\frac{c_A(t)}{c_{A0}}$	$\frac{c_A(t) E(t)}{c_{A0}}$
0.1	0.2	0.985	0.193
0.2	0.17	0.970	0.162
1.0	0.15	0.861	0.126
2.0	0.125	0.741	0.091
5.0	0.07	0.472	0.032
10	0.02	0.223	0.004
30	0.001	0.011	≈ 0

a) Vilken typ av ideal flödesreaktor liknar reaktorn mest? Motivera.



Reaktorn liknar en ideal tank



$$b) E(t) = \frac{c_s(t)}{\int_0^{\infty} c_s(t) dt} \quad \int_0^{\infty} c_s(t) dt \approx \sum_{i=1}^{n-1} \Delta t_i \frac{c_s(t_i) + c_s(t_{i+1})}{2}$$

$$= 0.1 \frac{0+0.2}{2} + 0.1 \frac{0.2+0.17}{2} + 0.8 \frac{0.17+0.15}{2} + \dots = 1.0275$$

Reaktion: $A \rightarrow R$ $r = kc_A$, $k = 0.15 \text{ min}^{-1}$

kinetisk process - behandla som segregerat flöde

MB översattsreaktor: $\frac{dc_A}{dt} = -kc_A \Rightarrow \frac{c_A}{c_{A0}} = e^{-kt}$

$$\frac{\langle c_A \rangle}{c_{A0}} = \int_0^{\infty} \frac{c_A(t) E(t)}{c_{A0}} dt \approx \sum_{i=1}^{n-1} \Delta t_i \frac{c_A(t_i) E(t_i) + c_A(t_{i+1}) E(t_{i+1})}{2 c_{A0}}$$

$$= 0.1 \frac{0+0.193}{2} + 0.1 \frac{0.193+0.162}{2} + 0.8 \frac{0.162+0.126}{2} + \dots = 0.57$$

$$x_A = 1 - \frac{\langle c_A \rangle}{c_{A0}} = 1 - 0.57 = \underline{\underline{0.43}}$$