

VRT VF TK

Sid: ~~38~~ 94 87

PLS: ~~38~~ 50: - 45:-

Uppgift 1 (materialbalans)

5 poäng

För framställning av sulfitkoksyra i en cellulosafabrik brännes 300 kg svavel per timma med luft (21% O₂ och 79% N₂) av temperaturen 15°C. Renheten hos det använda svavlet är 99,4%. Avgaserna nedkyls till 25°C och leds in i ett absorptionstorn, där all svaveldioxid och svaveltrioxid absorberas i kalkmjölk och ger råsyra. Avgasen efter absorptionstornet har temperaturen 25°C och trycket 100 kPa och är mättad med vattenånga (ångtryck 3,2 kPa).

En analys av den nedkylda bränngasen visar att gasen är torr och innehåller 17,4% SO₂ och 2,7% O₂ räknat på SO₃-fri gas. Avgasen efter absorptionstornet innehåller 2,8% O₂ räknat på torr gas. Den erhållna råsyran innehåller 7,05% SO₂, varav 1,15% är fri SO₂ och resten (5,9%) är bunden som vätesulfit. Kalken som används för beredning av kalkmjölken, innehåller 98% CaO och resten inert.

Gaserna kan betrakas som ideala. Procentangivelserna gäller volymprocent i gasfas och viktsprocent för övrigt. Svaveltrioxid kan förutom vid förbränningen även bildas vid absorptionen. Beräkna volymsflödet avgas från absorptionstornet i m³/h

Uppgift 2 (ideala reaktorer)

5 poäng

Vätskefasreaktionen 2A → B genomförs i en anläggning bestående av en ideal tank och en ideal tubreaktor seriekopplade i denna ordning.

Reaktionen är av andra ordningen m a p A och omsättningsgraden över hela anläggningen är 0,90. I övrigt gäller följande data

$$\begin{aligned}V_{\text{Tank}} &= 2 \text{ m}^3 \\V_{\text{tub}} &= 2 \text{ m}^3 \\q &= 1 \text{ m}^3/\text{s}\end{aligned}$$

Inflödet till första reaktorn består av A med koncentrationen $C_A^0 = 5 \text{ mol/m}^3$. Systemet arbetar under isoterma och isobara betingelser (samma i bägge reaktorerna).

Vilken omsättningsgrad erhålls om reaktorerna kopplas i omvänd ordning (tub + tank) vid i övrigt samma betingelser?

Uppgift 3 (reella reaktorer)

6 poäng

En gasfasreaktion av första ordningen planeras utförd kontinuerligt i ett tomt, uppvärmt rör av längden 20 m och tvärsnittsytan 1 m^2 . Längd-bredd-förhållandet hos reaktorn är emellertid inte stort nog för att undvika störningar genom axiell och radiell dispersion som leder till att selektiviteten blir lägre än vad som kan tolereras. För den skull planerar man att fylla reaktorn med sfäriska lika stora fyllkroppar. Man har att välja mellan fyllkroppar med diametern 0,10 m och 0,16 m. Reaktorbäddens porositet med de mindre fyllkropparna blir $\epsilon_B = 0,3$, dvs den fria gasvolymen är 30% av hela rörvolymen. Med de större fyllkropparna erhålles $\epsilon_B = 0,25$. Tätpackningen är olika effektiv i de båda fallen. Vid stationära driftsbetingelser är flödes hastigheten $0,3 \text{ m}^3/\text{s}$ räknat vid reaktionstemperaturen. Reaktionen sker vid isoterma betingelser och ger inte upphov till några volymsändringar. Gasen värmes momentant till reaktionstemperaturen vid inträdet i reaktorn. Vid den aktuella reaktionstemperaturen är hastighetskonstanten $k=0,1 \text{ s}^{-1}$. Koncentrationen av reaktanten i inflödet är 1 kmol/m^3 . I närvaro av fyllnadsmaterialet kan man bortse från den radiella dispersionen, medan den axiella dispersionen kan beskrivas med sambandet $Pe_a=2$, där Pe_a är Peclets tal för axiell dispersion.

Beräkna omsättningsgraden för de två fyllnadsmaterialen. Omsättningsgraden vid N seriekopplade lika stora ideala tankreaktorer kan för ett första ordningens förlopp skrivas

$$x = 1 - \frac{1}{(1 + \tau_n k)^N}$$

där $\tau_n = \tau/N$ och $\tau = \sum \tau_n$

Uppgift 4 (beskrivande)

7 poäng

- Ställ upp en allmän material- och värmebalans för en ideal satsreaktor. Alla införda beteckningar måste definieras. Ange också enhet på alla termer och beteckningar.
 - Diskutera skillnader i reaktorkapacitet för en ideal tankreaktor respektive en ideal tubreaktor för en nollte ordningens reaktion.
 - Diskutera begreppet "frihetsgrad" i samband med analys av materialbansschema för komplicerade processsystem.
 - Beskriv lösningsgången för dimensionering av en ideal adiabatisk tubreaktor för en given omsättningsgrad. Redogör vilka data du förutsätter vara kända. Alla införda beteckningar (med resp. enhet) måste definieras.
-

Uppgift 5 (beskrivande)

7 poäng

- a) Beskriv hur man mha mätning av uppehållstiden kan bestämma omsättningsgraden enligt dispersions-, tankserie- och segregerat flödesmodellerna.
 - b) Redogör huvudkoncepten för följande avsnitt av kursen:
 - värmebalanser
 - reaktorkapacitet
 - c) Beskriv ett lämpligt reaktorsystem för kinetiska mätningar
-

Uppgift 1 (materialbalans, ideal tankreaktor)

5 poäng

En autokatalytisk reaktion $A \rightarrow B$ skall genomföras i en ideal tankreaktor. Efter reaktorn är kopplad en separationsenhet. Från denna går två flöden, dels ett produktflöde innehållande bildad produkt B och något lite reaktant, dels ett recirkulationsflöde som endast innehåller reaktanten A. Det färska inflödet innehåller enbart reaktant A så när som på en liten mängd produkt B motsvarande omsättningsgraden $x_A = 10^{-6}$. Denna lilla mängd är nödvändig för att reaktionen skall starta. Utbytet över hela anläggningen är 99% räknat på mängden reaktant i det färska inflödet. Omsättningsgradens ändring över reaktorn är $x_A = 0,6$. Vidare gäller följande data

Hastighetsekvation,

$$r = k c_A c_B$$

Hastighetskonstantens värde vid aktuella betingelser,

$$k = 2 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$$

Koncentrationen av reaktant i färskt inflöde och recirkulationsflöde,

$$c_A = 4,3 \cdot 10^3 \text{ mol m}^{-3}$$

Densiteten är densamma i alla flöden

Molflödes hastighet i färskt inflöde,

$$F_A = 1,5 \cdot 10^3 \text{ mol A s}^{-1}$$

Beräkna reaktorns volym.

Uppgift 2 (ideal tubreaktor)

5 poäng

Två oberoende gasfasreaktioner sker i en ideal tubreaktor som arbetar isotermt vid 227°C (500 K) och isobart vid 5 bar.

Reaktionerna kan skrivas



och



Reaktion (1) är ett förlopp av första ordningen för vilket gäller

$$r_1 = k_1 c_A$$

och reaktion (2) är ett förlopp av nollte ordningen för vilket gäller

$$r_2 = k_2$$

Vid rådande processbetingelser gäller

$$k_1 = 10 \text{ s}^{-1}$$

$$k_2 = 0,03 \text{ kmol m}^{-3} \text{ s}^{-1}$$

Inflödet består av lika delar A och C och molflödes hastigheterna är $F_A = F_C = 5 \text{ mol/s}$. Hur stor måste reaktorvolymen V_r vara för att omsättningsgraden med avseende på A skall uppgå till $x_A = 0,5$?

Uppgift 3 (satsreaktor)

5 poäng

Lös följande uppgift som är hämtad ur den nytomna boken "The Engineering of Chemical Reactions" av Lanny D. Schmidt.

An irreversible aqueous reaction gave 90% conversion in a batch reactor at 40°C in 10 min and required 3 min for this conversion at 50°C.

- What is the activation energy for this reaction?
 - At what temperature can 90% conversion be obtained at 1 minute?
 - Find the rate coefficient assuming first order kinetics.
 - Assuming first order kinetics, find the times for 99% conversion at 40 and at 50°C.
 - Assuming first order kinetics, find the temperature to obtain 99% conversion in a time of 1 minute.
-

Uppgift 4 (beskrivande)

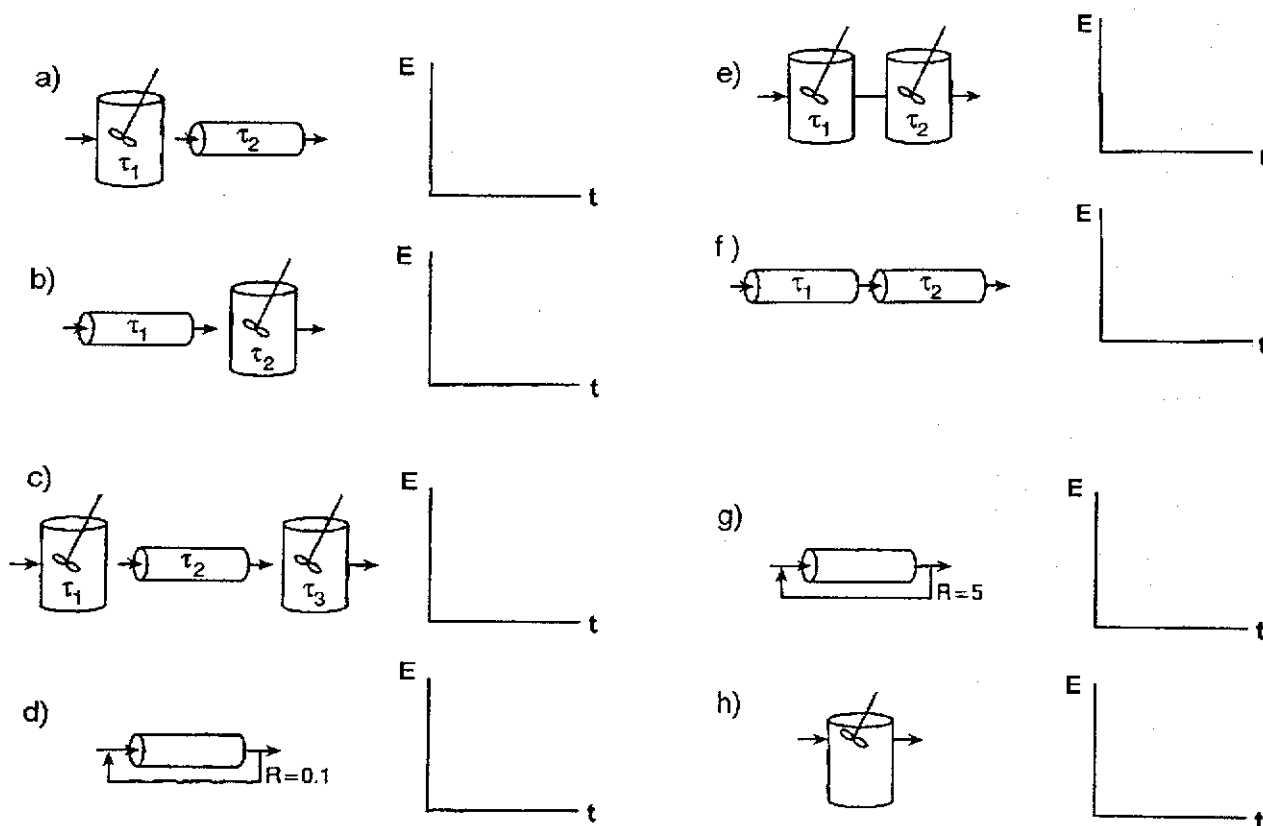
6 poäng

- Redogör kort för begreppet dispersionskoefficient.
 - Hur beräknar man omsättningsgraden för en icke-linjär process, som utförs i en reell reaktor? Möjlighet att genomföra spårämnesförsök finns.
 - Vid laminär strömning i ett tomt rör blir dispersionen av helt olika storleksordning om mediet är en vätska i stället för en gas. Vad beror denna skillnad på?
-

Uppgift 5 (beskrivande)

4 poäng

Rita frekvensfunktionen av uppehållstiden för följande reaktorsystem:



$\tau_1 = \tau_3 > \tau_2$ i uppgiften ovan!

Uppgift 6 (beskrivande)

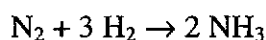
5 poäng

- a) Välj och diskutera den bästa reaktorkombinationen för en process där reaktionshastigheten går igenom ett maximum med ökande omsättningsgrad.
- b) För ovanstående reaktion, diskutera möjligheten att enbart använda en tubreaktor för att få maximal möjlig reaktorkapacitet.

Uppgift 1 (materialbalans, recirkulationsreaktor)

5 poäng

Till en reaktor för framställning av ammoniak enligt reaktionsformeln

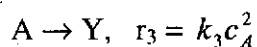
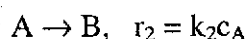


tillföres stökiometriska mängder av kväve och väte i det färska inflödet. Utöver kväve och väte innehåller det färska inflödet 0,3 % (molprocent) argon, som ej undergår någon reaktion i processen. Omsättningsgraden i reaktorn är 10 procent. Bildad ammoniak separeras fullständigt genom kondensering och inga okondenserade gaser, dvs N_2 , H_2 och Ar, medföljer den kondenserade ammoniaken. Den okondenserade gasen uppdelas i två strömmar. Den ena av dessa återför gasen till reaktorns inflöde; den andra är en avtappningström, som bortför så mycket gas ur systemet att ingen upplagring av argon sker. Den högsta argonhalt som tolereras i inflödet är 0,5%. Beräkna hur stor gasmängd som måste avtappas i förhållande till den gasmängd som går ut från kondensorn.

Uppgift 2 (ideala reaktorer)

5 poäng

Föreningen A reagerar i gasfas under bildning av föreningarna X, B och Y enligt schemat:



Föreningen B är den önskvärda produkten, medan X och Y är allvarliga miljögifter som är dyra att eliminera. Beräkna reaktorvolymen av den reaktor (ideal tubreaktor eller ideal tankreaktor) som vid omsättningsgraden $x_A = 0,90$ ger det högsta utbytet av B.

Reaktorn arbetar isobart vid trycket 4 bar och isotermt vid temperaturen 237°C. Reaktorinflödet består av rent A och inflödeshastigheten är 1 mol A/s vid ovanstående betingelser. Vid dessa gäller

$$k_1 = 0,0005 \text{ kmol m}^{-3} \text{ s}^{-1}$$

$$k_2 = 1 \text{ s}^{-1}$$

$$k_3 = 60 \text{ m}^3 \text{ kmol}^{-1} \text{ s}^{-1}$$

Uppgift 3 (ideal tubreaktor med recirkulation)

5 poäng

Eten (C_2H_4) framställs i industriell skala genom termisk krackning av etan (C_2H_6) enligt reaktionsformeln



Reaktionen är reversibel, men vi bortser från detta i föreliggande uppgift. Likaså bortser vi från alla bireaktioner. Etanet spädes med vattenånga och får passera en tubreaktor som kan anses vara ideal. Vattenångan deltar ej i reaktionen utan medverkar till att hålla tillbaka bireaktionerna genom att partialtrycket av etan sänkes och verkar dessutom som ett värmeöverförande medium. Reaktionen i det aktuella problemet sker isotermt vid 900°C och isobart vid 1,4 bar. Inflödes hastigheten av etan i det färska inflödet är 20 ton/h. Etanet spädes med vattenånga i proportionerna 0,6 mol vatten till 1 mol etan i det färska inflödet. Utflödet från reaktorn delas upp i två lika stora flöden; ett produktflöde och ett recirkulationsflöde. Det senare återför utan någon separation samtliga komponenter i detta flöde till reaktorinflödet. Omsättningsgraden med avseende på etan över reaktorn är 0,3. Kinetiska undersökningar i laboratorieskala har visat att krackningen av etan kan skrivas

$$r = k_c C_{\text{etan}}$$

Vid 900°C och 1,4 bar gäller att $k_c = 12,8 \text{ s}^{-1}$. Molvikten för etan är 30 kg/kmol. Beräkna reaktorns volym.

Uppgift 4 (uppehållstidsfördelning)

5 poäng

Ett nollte ordningens förlopp genomförs kontinuerligt i en ideal tankreaktor. Det reagerande systemet består av en emulsion, vilket innebär att flödet är segregerat.

Följande driftsbetingelser råder:

Reaktantkoncentration i inflödet:

$$1 \text{ kmol/m}^3$$

Medeluppehållstid i reaktorn:

$$100 \text{ s}$$

Hastighetskonstant:

$$9 \cdot 10^{-3} \text{ kmol}/(\text{m}^3 \cdot \text{s})$$

Problem:

Beräkna omsättningsgraden i utflödet. Gör samma beräkning för det fall att emulsionen bryts så att mikroblandning erhålles. Samma reaktionsbetingelser vad beträffar inflödeskoncentration och hastighetskonstant anses gälla för de båda fallen.

Uppgift 5 (beskrivande) **OBS! Ej för Kb-studenter**

10 poäng

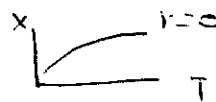
a) Hur och varför inför man T_{ref} i värmebalanser? Hur påverkar valet av T_{ref} den beräknade temperaturen ut från reaktorn? 1 p. 2 p.

b) Diskutera varför man kan, med hjälp av ett lämpligt val av återflöde, öka reaktorkapaciteten i en ideal tubreaktor då den kemiska reaktionen går genom ett maximum med ökande omsättningsgrad. 2 p.

c) För en endoterm jämviktsreaktion, visa i ett X-T diagram:

c1. jämviktskurvan 1,5 p.

c2. driftslinjen för en adiabatiskt arbetande reaktor samt några hastighetskonturer med angivande av det inbördes läget för $r_1 > r_2 > r_3$. 1,5 p.



- d) För isoterma och icke-isoterma processer, redogör vad som krävs av material- och värmebalanserna för att man skall få mer än en stationär driftspunkt. 3P
-

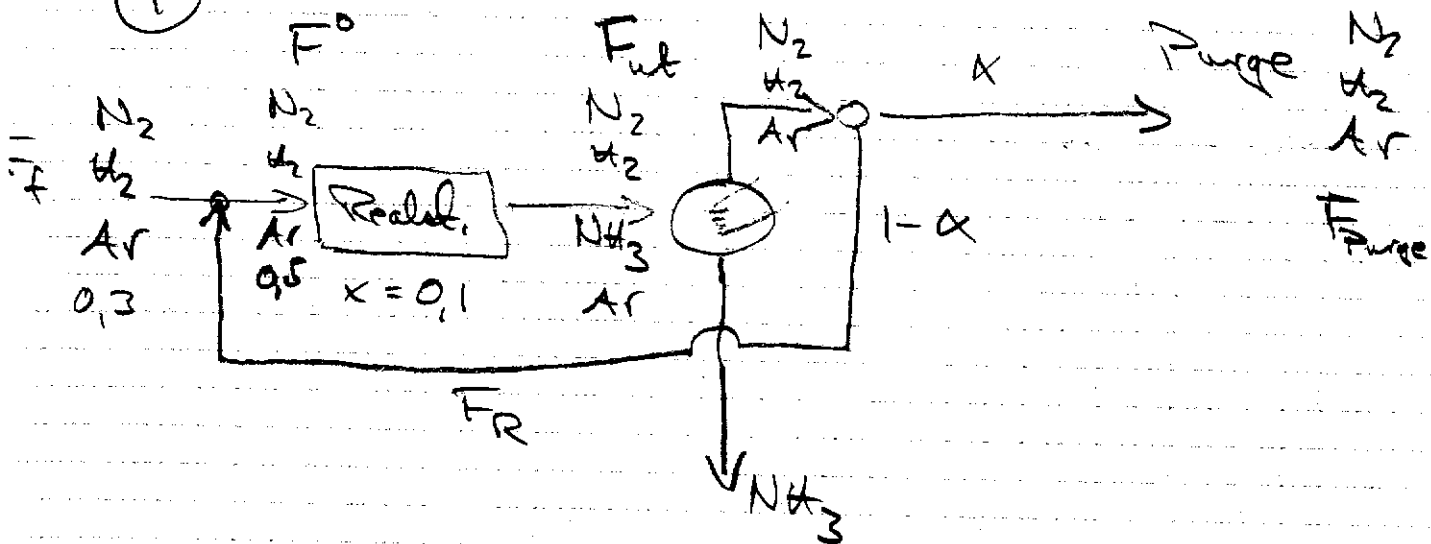
Uppgift 6 (beskrivande) **OBS! Endast för Kb-studenter**

10 poäng

- a) Hur och varför inför man T_{ref} i värmebalanser? Hur påverkar valet av T_{ref} den beräknade temperaturen ut från reaktorn? 2P
- b) Diskutera varför man kan, med hjälp av ett lämpligt val av återflöde, öka reaktorkapaciteten i en ideal tubreaktor då den kemiska reaktionen går genom ett maximum med ökande omsättningsgrad. 2P
- c) Vid undersökning av strömningsförhållanden i reella reaktorer används vanligtvis puls- eller stegmetoden. Redogör principerna för dessa metoder. Vad är lättast att bestämma från dessa experimentella försök, medeluppehållstiden eller variansen? 3P
- d) För katalytiska gas-vätske reaktioner diskutera för- och nackdelar med pluggflödesreaktorer av fastbäddtyp och kontinuerligt omrörd reaktor. 3P
-

98-08-22

①



$$F_T = 100 \text{ mol/s}$$

$$F_{Arf} = 0,3 \text{ mol/s}$$

$$F_{N_2f} = \frac{1}{4} \cdot (100 - 0,3) = 24,925 \text{ mol/s}$$

$$F_{H_2f} = \frac{3}{4} \cdot (100 - 0,3) = 74,775 \text{ mol/s}$$

Tot

$$Ar: F_{Arf} - F_{ArPur} = 0 \Rightarrow F_{ArPur} = 0,3 \text{ mol/s}$$

$$N_2: F_{N_2f} - F_{N_2Pur} - R = 0$$

$$H_2: F_{H_2f} - F_{H_2} - 3R = 0$$

$$F_R = \frac{1-\alpha}{\alpha} \cdot F_{Pur}$$

$$F_{ArR} = \frac{1-\alpha}{\alpha} \cdot F_{ArPur} = \frac{1-\alpha}{\alpha} \cdot 0,3 \text{ mol/s}$$

Balans. plat.

$$F_{Ar}^o = F_{Arf} + F_{ArR} = 0,3 + \frac{1-\alpha}{\alpha} \cdot 0,3 = \frac{0,3}{\alpha}$$

$$(1-\alpha)F_{Arut} = 0,3 + (1-\alpha)F_{ArR}$$

$$F_{N_2}^0 = F_{N_2f} + \underbrace{F_{N_2R}}_{(1-\alpha)F_{N_2ut}} = 24,925 + (1-\alpha)F_{N_2ut} \quad (1)$$

$$F_{H_2}^0 = F_{H_2f} + (1-\alpha)F_{H_2ut} = 74,775 + (1-\alpha)F_{H_2ut} \quad (2)$$

Reaktor

$$F_{N_2}^0 - F_{N_2ut} - R = 0$$

$$F_{H_2}^0 - F_{H_2ut} - 3R = 0$$

$$F_{Ar}^0 - F_{Arut} = 0$$

In i (1) och (2) [Bl. plöt + reaktor]

$$F_{N_2}^0 = 24,925 + (1-\alpha)(F_{N_2}^0 - R) \quad (*)$$

$$F_{H_2}^0 = 74,775 + (1-\alpha)(F_{H_2}^0 - 3R)$$

$$F_{Ar}^0 = 0,3 + (1-\alpha)F_{Ar}^0$$

Oms. grad

$$F_{N_2}^0 \alpha = R$$

$$F_{tot}^0 = F_{N_2}^0 + F_{H_2}^0 + F_{Ar}^0 = 99,7 + (1-\alpha)(F_{N_2}^0 - F_{N_2}^0 \alpha) + (1-\alpha)(F_{H_2}^0 - 3F_{N_2}^0 \alpha) + 0,3 + (1-\alpha)F_{Ar}^0$$

$$F_{\text{tot}}^{\circ} = 100 + (1-\alpha) \left[F_{\text{tot}}^{\circ} - 4F_{N_2}^{\circ} x \right]$$

$$F_{\text{tot}}^{\circ} (1-1+\alpha) = 100 - (1-\alpha) 4F_{N_2}^{\circ} x \quad (3)$$

~~sub in our grad i (*) \Rightarrow~~

$$F_{N_2}^{\circ} = 24,925 + (1-\alpha) F_{N_2}^{\circ} (1-x)$$

$$F_{N_2}^{\circ} (1 - (1-\alpha)(1-x)) = 24,925 \quad (4)$$

~~sub in (4) i (3) \Rightarrow~~

$$F_{\text{tot}}^{\circ} \alpha = 100 - (1-\alpha) 4 \cdot \frac{24,925}{1 - (1-\alpha)(1-x)} \cdot x$$

dan

$$\frac{F_{Ar}^{\circ}}{F_{\text{tot}}^{\circ}} = \frac{\frac{0,3}{\alpha}}{100 - (1-\alpha) 4 \cdot \frac{24,925}{1 - (1-\alpha)(1-x)} \cdot x} = 0,005$$

$$\Rightarrow \alpha = \underline{\underline{0,13}}$$

$$F_{N_2}^{\circ} = 114,86$$

$$F_{H_2}^{\circ} = 344,59$$

$$F_{Ar}^{\circ} = 2,308$$

$$P = 11,486$$

$$0,3 = 0,5 - \frac{(1-x) \cdot 0,4985}{1 - (1-x)(1-x)} \cdot x$$

$$\frac{(1-x) \cdot 0,4985 \cdot x}{1 - (1-x)(1-x)} = 0,2$$

$$(1-x) \cdot 0,4985 \cdot x = 0,2 - 0,2(1-x)(1-x)$$

$$(1-x)(0,4985x + 0,2(1-x)) = 0,2$$

$$1-x = \frac{0,2}{0,4985x + 0,2(1-x)} = \frac{0,2}{0,4985 \cdot 0,1 + 0,2 \cdot 0,9}$$

$$= 0,8701$$

$$\Rightarrow x = 0,1299 \approx \underline{\underline{0,13}}$$

$$\begin{aligned} F_{fN_2} &= 24,925 \\ w_2 &= 74,775 \\ Ar &= 0,3 \end{aligned} \quad \left. \vphantom{\begin{aligned} F_{fN_2} \\ w_2 \\ Ar \end{aligned}} \right\} 100$$

$$\begin{aligned} F^0_{N_2} &= 114,925 \\ w_2 &= 344,775 \\ Ar &= 2,3101 \end{aligned} \quad \left. \vphantom{\begin{aligned} F^0_{N_2} \\ w_2 \\ Ar \end{aligned}} \right\} 462,0101$$

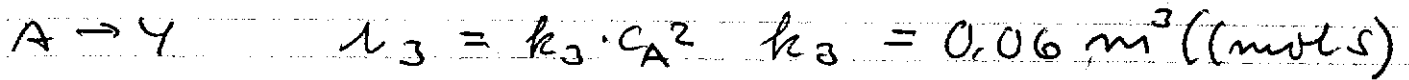
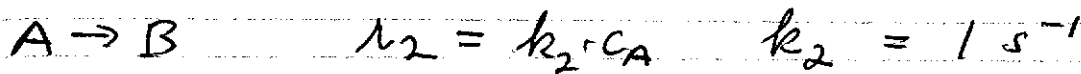
$$\begin{aligned} F_{wtN_2} &= 103,4325 \\ w_2 &= 310,2975 \\ Ar &= 2,3101 \end{aligned} \quad \left. \vphantom{\begin{aligned} F_{wtN_2} \\ w_2 \\ Ar \end{aligned}} \right\} 416,0401$$

$$\begin{aligned} F_{\text{pure } N_2} &= 13,4325 \\ w_2 &= 40,2975 \\ Ar &= 0,3 \end{aligned} \quad \left. \vphantom{\begin{aligned} F_{\text{pure } N_2} \\ w_2 \\ Ar \end{aligned}} \right\} 54,03$$

$$\begin{aligned} F_{R N_2} &= 90,00 \\ w_2 &= 270,00 \\ Ar &= 2,0101 \end{aligned} \quad \left. \vphantom{\begin{aligned} F_{R N_2} \\ w_2 \\ Ar \end{aligned}} \right\} 362,0101$$

$$R = 11,4925$$

$$\alpha = 0,1299$$

Problem 2.

$$T = 510 \text{ K}$$

$$P = 4 \cdot 10^5 \text{ Pa}$$

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

$$x_A = 0.9$$

$$C_{Af} = P/RT = \frac{4 \cdot 10^5}{8.314 \cdot 510} = 94.33 \text{ mol/m}^3$$

$$C_A^{in} = C_{Af}(1 - x_A) = 9.433 \text{ mol/m}^3$$

$$q = \frac{F_{Af}}{C_{Af}} = 0.0106 \text{ m}^3/\text{s}$$

Balansen over reaktorolymer dV_r :

$$q \frac{dC_A}{dV_r} = -(r_1 + r_2 + r_3) \quad \left. \begin{array}{l} \text{gesamband mellem} \\ C_A \text{ och } C_B. \end{array} \right\}$$

$$q \frac{dC_B}{dV_r} = r_2$$

$$\frac{dC_B}{dC_A} = - \frac{r_2}{r_1 + r_2 + r_3} = - \frac{k_2 C_A}{k_1 + k_2 C_A + k_3 C_A^2} = f(C_A)$$

$$C_B = C_{Bsub} = \int_{C_A^{in}}^{C_A^{out}} \frac{k_2 C_A}{k_1 + k_2 C_A + k_3 C_A^2} dC_A = \int_{C_A^{in}}^{C_A^{out}} f(C_A) dC_A$$

$$C_{B \text{ tank}} = \frac{k_2 C_A^{in} (C_A^{out} - C_A^{in})}{k_1 + k_2 C_A^{in} + k_3 (C_A^{in})^2} = f(C_A^{in}) (C_A^{out} - C_A^{in})$$

Plotta $\frac{dc_B}{dc_A} = f(C_A) \text{ mod } C_A!$

2.

Plotten visar att:

ytan under kurvan $f(C_A)$ mellan gränserna C_{A+} och C_A^{ut} ger C_{Btub}

Rektangelytan med höjden $f(C_A^{ut})$ ger C_{Btank}

$\therefore C_{Btank} > C_{Btub}$

Tankreaktionsvolym:

$$V_{tank} = \frac{F_{0f} \cdot K_A}{k_1 + k_2 \cdot C_A^{ut} + k_3 \cdot (C_A^{ut})^2} = \underline{\underline{0.0598 \text{ m}^3}}$$

~~0.0598~~

Konc. av B:

$$C_B^{ut} = k_2 \cdot \frac{V_2}{q} \cdot C_A^{ut} = \underline{\underline{52.44 \text{ mol/m}^3}}$$

$$F_B^{ut} = 0.5554 \frac{\text{mol}}{\text{s}}$$

Tubreaktionsvolym:

$$V_{tub} = q \cdot \int_{C_A^{ut}}^{C_{A+}} \frac{dc_A}{k_1 + k_2 \cdot C_A + k_3 \cdot C_A^2} = 0.0089 \text{ m}^3$$

$$C_{Btub}^{ut} = \int_{C_A^{ut}}^{C_{A+}} \frac{k_2 C_A}{k_1 + k_2 C_A + k_3 C_A^2} dc_A = 23.95 \text{ mol/m}^3$$

$$F_B^{ut} = 0.2538 \frac{\text{mol}}{\text{s}}$$

Integraler:

3,

$$\int \frac{dx}{a+bx+cx^2} = \frac{1}{\sqrt{-q}} \ln \frac{2cx+b-\sqrt{-q}}{2cx+b+\sqrt{-q}} \quad (q < 0)$$

$$q = 4ac - b^2$$

$$\int \frac{x dx}{a+bx+cx^2} = \frac{1}{2c} \ln(a+bx+cx^2) - \frac{b}{2c} \int \frac{dx}{a+bx+cx^2}$$

– Teknikparkens Konferenscenter –

$$F_B = k_2 \int C_A$$

$$dF_B = k_2 C_A dV_2$$

$$dV_2 = - \frac{q dC_A}{k_2 C_A} =$$

$$dF_B = \frac{-k_2 q \cdot C_A dC_A}{k_2 C_A} = \left| \int_{C_{A1}}^{C_{A2}} \frac{C_A dC_A}{C_A} \right| = F_B$$

~~$dF_B =$~~

$$dV_2 = - \frac{dF_A}{k_2 C_A} = \frac{F_A dx_A}{\sum x_i}$$

$$dF_B = k_2 \cdot C_{A1} (1-x_A) \frac{F_A dx_A}{\sum x_i}$$

$$F_B = k_2 C_{A1} \frac{F_A}{q C_{A1}} \int \frac{(1-x_A) dx_A}{\sum x_i}$$

$$k_2 V_2 = \int \frac{dF_B}{C_A} = \frac{F_{A1} \cdot RT}{P} \int \frac{dF_B}{F_A}$$

$$C_A = \frac{F_A}{F_{A1}} \cdot C_{A1} = \frac{F_A}{F_{A1}} \cdot \frac{P}{RT}$$

% KRTgk Tentamen 98-08-22 Uppgift 2

```
clear all
close all
global k1 k2 k3
```

% Ideala reaktorer

```
% Reaktionen: A --> X    r1 = k1
%               A --> B    r2 = k2*cA
%               A --> Y    r3 = k3*cA^2
```

% DATA

```
k1=0.5;    % hast.konst.    mol m-3 s-1
k2=1;     % hast.konst.    s-1
k3=0.06;  % hast.konst.    m3 mol-1 s-1
FAf=1.0;  % molflödeshast. mol s-1
xA=0.9;   % omsättningsgrad
1e5;     % totaltryck      Pa
T=510;   % temperatur      K
R=8.314; % gaskonstant     m3 Pa mol-1 K-1
cAf=P/R/T;
cAut=cAf*(1-xA);
q=FAf/cAf;
```

% Samband mellan koncentrationerna av A och B.

```
% fBA=dcB/dcA=r2/(r1+r2+r3)
```

```
cA=0:1:100;
```

```
cA12=[cAut,cAf];
```

```
fBA=k2*cA./(k1+k2*cA+k3*cA.^2);
```

```
fBA12=k2*cA12./(k1+k2*cA12+k3*cA12.^2);
```

```
figure(1)
```

```
plot(cA, fBA, cA12, fBA12, '*'), xlabel('cA'), ylabel('dcB/dcA'), title('dcB/dcA vs cA')
```

```
hold on
```

```
plot([cA12(1) cA12(1)], [0 fBA12(1)], [cA12(2) cA12(2)], [0 fBA12(1)])
```

```
hold on
```

```
plot([cA12(1) cA12(2)], [fBA12(1) fBA12(1)])
```

```
gtext('cAut'), gtext('cAf'), gtext('rektangelyta=cBtank'), gtext('underkurva-yta=cBtub')
```

% Tankreaktor

% Reaktorvolym

```
Vtank=FAf*xA/(k1+k2*cAut+k3*cAut^2)
```

3-konc

```
cBtank=k2*cAut*Vtank/q
```

% Tubreaktor

% Reaktorvolym

```
Int1=quad('int19808',cAut,cAf);
```

```
Vtub=q*Int1
```

% B-konc.

```
Int2=quad('int29808',cAut,cAf);
```

```
cBtub=Int2
```

%

```
% SVAR: Tankreaktorvolym = 0.0598 m3    cBtank = 52.44 mol m-3
```

```
% Tubreaktorvolym = 0.0089 m3    cBtub = 23.95 mol m-3
```

$$c_{Af} = 94.33 \text{ mol/m}^3$$

$$c_{Aut} = 9.433 \text{ mol/m}^3$$

$$q = 0.0106 \text{ m}^3/\text{s}$$

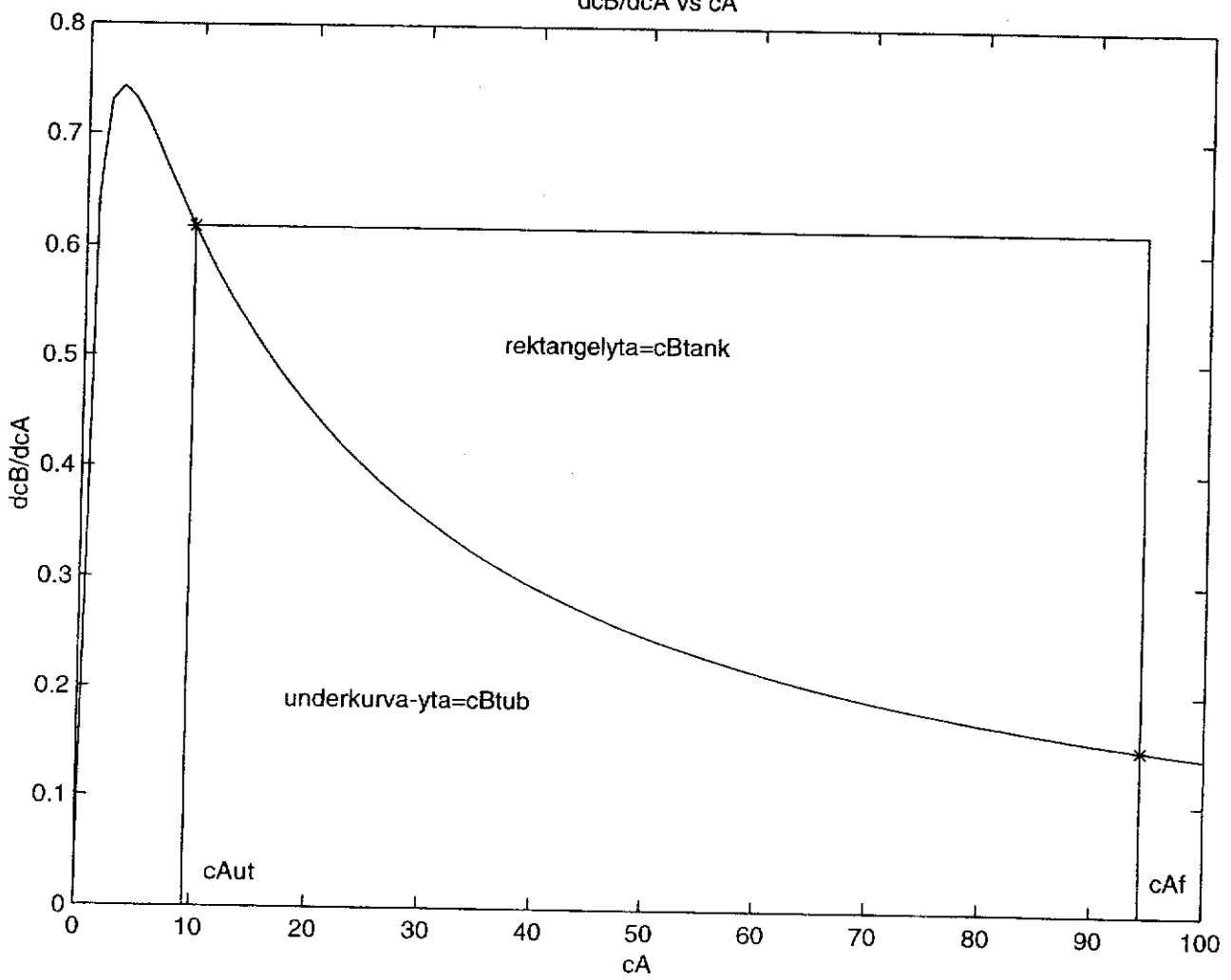
$$F_B = 0.5584 \text{ mol/s}$$

$$F_B = 0.2538 \text{ mol/s}$$

```
function Int2=int29808(cA)
global k1 k2 k3
Int2=k2*cA./(k1+k2*cA+k3*cA.^2);
```

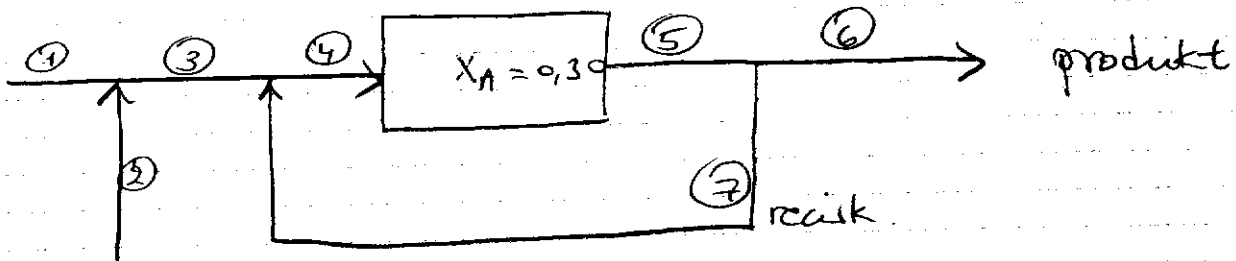
```
function Int1=int19808(cA)
global k1 k2 k3
Int1=1./(k1+k2*cA+k3*cA.^2);
```

dcB/dcA vs cA



3) Uppgift 3 Tentamen 980822 Tub med recirkulation (1)

... omsättningsgraden över reaktorn är 0,3 med avseende på reaktorinflödet.
 etan.



$$F_{A1} = \frac{20000}{3600} \cdot \frac{1}{30} \cdot \frac{\text{kg}}{\text{s}} \cdot \frac{\text{kmol}}{\text{kg}} = 0,1852 \frac{\text{kmol}}{\text{s}}$$

$$F_{A3} = F_{A1}$$

$$F_{A5} = (1-0,3) \cdot F_{A4}$$

$$F_{A6} = F_{A7} = 0,5 \cdot F_{A5} = 0,5 \cdot (1-0,3) \cdot F_{A4}$$

$$F_{A4} = F_{A3} + F_{A7} = 0,1852 + 0,5(1-0,3) \cdot F_{A4}$$

$$\Rightarrow F_{A4} = \frac{0,1852}{1-0,5(1-0,3)} = 0,2849 \frac{\text{kmol}}{\text{s}}$$

$$\Rightarrow F_{A5} = 0,7 \cdot 0,2849 = 0,1994 \frac{\text{kmol}}{\text{s}}$$

$$F_{A6} = F_{A7} = 0,0997 \frac{\text{kmol}}{\text{s}}$$

MB map A över dV_r

$$F_{A4}(1-x) - F_{A4}(1-x-dx) - r dV_r = 0 \left[\frac{\text{kmol}}{\text{s}} \right]$$

$$F_{A4} dx = r dV_r$$

$$\frac{V_r}{F_{A4}} = \int_0^{0,3} \frac{dx}{r} = \int_0^{0,3} \frac{1}{k'c_A} dx$$

Uttryck C_A mha molflöden!

$$C_A = \frac{F_A}{F_{tot}} \cdot \frac{P}{RT}$$

Sök F_B och F_C !

$$F_B^{(5)} = F_B^{(4)} + (F_A^{(4)} - F_A^{(5)}) = F_B^{(4)} + 0,0855$$

$$F_B^{(7)} = 0,5 \cdot F_B^{(5)} = 0,5 \cdot F_B^{(4)} + 0,5 \cdot 0,0855$$

$$F_B^{(4)} = F_B^{(7)} - 0,5 \cdot F_B^{(4)} + 0,5 \cdot 0,0855$$

$$F_B^{(4)} = \frac{0,5 \cdot 0,0855}{0,5} = 0,0855$$

$$F_C^{(4)} = F_B^{(4)}$$

$$P = 0,0855$$

I reaktorn gäller

$$\left\{ \begin{aligned} F_A &= F_A^{(4)} (1-x) \\ F_B &= F_B^{(4)} + F_A^{(4)} \cdot x \\ F_C &= F_C^{(4)} + F_A^{(4)} \cdot x \\ F_{H_2O} &= \dots + F_{H_2O}^{(7)} \end{aligned} \right.$$

Se (4)

$$F_{tot} = F_A^{(4)} + F_B^{(4)} + F_C^{(4)} + F_{H_2O} + \underline{F_A^{(4)} \cdot x}$$

(3)

$$V_r = F_{A(4)} \int_0^{0,3} \frac{1}{k_c \cdot c_A} dx =$$

$$= F_{A(4)} \int_0^{0,3} \frac{1}{k_c \cdot 10^{-3} \frac{F_{A(4)}(1-x)}{F_{A(4)}(1+x) + F_{B(4)} + F_{C(4)} + F_{H_2O}} \cdot \frac{P}{RT}} dx$$

$$= \frac{F_{A(4)} \cdot RT \cdot 0,3}{10^{-3} k_c \cdot P \cdot F_{A(4)}} \int_0^{0,3} \frac{F_{A(4)}(1+x) + F_{B(4)} + F_{C(4)} + F_{H_2O}}{(1-x)} dx$$

↑
omvandla $c_A \left[\frac{\text{mol}}{\text{m}^3} \right]$ till $\left[\frac{\text{kmol}}{\text{m}^3} \right]$

$$= A \cdot \int_0^{0,3} \frac{0,2849(1+x) + 0,0855 + 0,0855 + 0,2222}{(1-x)} dx$$

$$= A \int_0^{0,3} \frac{0,6781 + 0,2849x}{1-x} dx =$$

$$= \left\{ \begin{array}{l} \beta \text{ nr 50} \\ \text{sid 144} \end{array} \right\} = A \cdot \left[\frac{0,2849 \cdot x}{-1} - \frac{0,963}{1} \ln |1-x| \right]_0^{0,3}$$

$$= A \cdot \left[\frac{0,2849 \cdot 0,3}{-1} - \frac{0,963}{1} \ln(1-0,3) + 0 + 0 \right]$$

$$A \cdot \left[-0,08547 + 0,3435 \right] = A \cdot 0,25801$$

$$A = \frac{F_{A(4)} \cdot RT}{10^{-3} k_c \cdot P \cdot F_{A(4)}} = \frac{8,3145 \cdot (900 + 273)}{10^{-3} \cdot 12,8 \cdot 1,4 \cdot 10^5} = 5,44$$

$$V_r = A \cdot \int = 5,44 \cdot 0,25801 = \underline{\underline{1,40 \text{ m}^3}}$$

Vatten

F_{H_2O} igencum reaktom =

$= F_{H_2O} \textcircled{4} = F_{H_2O} \textcircled{3} + F_{H_2O} \textcircled{7}$

$F_{H_2O} \textcircled{3} = 0,6 \cdot 0,1852 = 0,1111 \frac{\text{kmol}}{\text{s}}$

$F_{H_2O} \textcircled{5} = F_{H_2O} \textcircled{4}$

$F_{H_2O} \textcircled{7} = 0,5 \cdot F_{H_2O} \textcircled{5} = 0,5 \cdot F_{H_2O} \textcircled{4}$

$\Rightarrow F_{H_2O} \textcircled{4} = F_{H_2O} \textcircled{3} + 0,5 \cdot F_{H_2O} \textcircled{4}$

$\Rightarrow F_{H_2O} \textcircled{4} = \frac{F_{H_2O} \textcircled{3}}{0,5} = \frac{0,1111}{0,5} = 0,2222 \frac{\text{kmol}}{\text{s}}$

4

$r = k$ segr. flöde id. tank

$$C_A^0 = 1 \text{ kmol/m}^3$$

$$\tau = 100 \text{ s}$$

$$k = 9 \cdot 10^{-3} \text{ kmol/m}^3 \text{ s}$$

Östkt. X_{ut} v. segr. flöde

X_{ut} v. mikrokol.
m. C_A^0, k

~~id. tank~~
id. tank MB
emulsion vätskes
mikrokol.

$$C_A^0 - q C_A^0 - k \cdot V = 0 \quad 1$$

$$C_A^0 (1 - X) = k \tau \Rightarrow$$

$$C_A^0 X = k \tau \Rightarrow$$

$$X = \frac{k \tau}{C_A^0} = \frac{9 \cdot 10^{-3} \cdot 100}{1} = 0.9$$

~~segr~~ $C(t) = C_0 - k \cdot t \quad | \quad C=0 \text{ ut} = \frac{C_0}{k} \quad | \quad \text{id. tank } E = \frac{1}{\tau} e^{-t/\tau}$

$$\langle C \rangle = \int_0^{\infty} C E dt = \int_0^{\frac{C_0}{k}} (C_0 - kt) E dt$$

$$= \int_0^{\frac{C_0}{k}} (C_0 - kt) \frac{1}{\tau} e^{-t/\tau} dt = \int_0^{\frac{C_0}{k}} (C_0 - kt) \frac{1}{\tau} e^{-t/\tau} dt + 1$$

$$= C_0 - k \tau + e^{-C_0/k\tau} \cdot k \tau = 1 - 9 \cdot 10^{-3} \cdot 100$$

$$+ 0.9 e^{-1/0.9} = 0.396$$

$$X = 1 - \frac{0.396}{1} = 1 - 0.396 = 0.60405$$

c_0/k

~~$$\int_0^{\infty} (c_0 - kt) e^{-t/\tau} dt =$$~~

$$\int x e^{ax} dx$$

$$= \frac{e^{ax}}{a^2} (ax - 1)$$

~~$$= \frac{c_0}{k} + k\tau e^{-c_0/k\tau}$$~~

~~$$= \frac{1}{0.9} \cdot 10 \cdot 100 + 0.1 \cdot 10 \cdot 100 e^{-1/0.9 \cdot 100}$$~~

 c_0/k

$$\frac{1}{\tau} \int_0^{\infty} (c_0 - kt) e^{-t/\tau} dt = \frac{1}{\tau} \int_0^{\infty} (c_0 e^{-t/\tau} - kt e^{-t/\tau})$$

$$= \frac{1}{\tau} \left[c_0 \cdot -\tau e^{-t/\tau} - k\tau e^{-t/\tau} \left(-\frac{1}{\tau} t - 1 \right) \right]_0^{\infty}$$

$$= -c_0 e^{-\frac{c_0}{k\tau}} - k\tau e^{-\frac{c_0}{k\tau}} \left(-\frac{c_0}{k\tau} - 1 \right)$$

$$- \left(-c_0 - k\tau \cdot (-1) \right) =$$

$$e^{-\frac{c_0}{k\tau}} \left(-c_0 + k\tau \left(\frac{c_0}{k\tau} + 1 \right) \right) + c_0 - k\tau$$

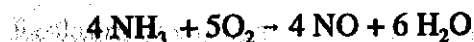
$$= e^{-c_0/k\tau} \cdot k\tau + c_0 - k\tau$$

23/maj - 93

Uppgift 1 (materialbalans)

4 poäng

Kväveoxid (NO) framställs genom katalytisk oxidation av ammoniak (NH_3) med rent syre (O_2).
Reaktionen följer stökiometriskt sambandet



Det färsk inflödet till en reaktor för framställning av kväveoxid innehåller endast torr ammoniak och syre med 20% överskott av syre. Omsättningsgraden med avseende på ammoniak uppgår till $x_{\text{NH}_3} = 0,70$ över själva reaktorn. Efter reaktorn finns en separeringsenhet (bl a destillationstorn) från vilken går tre strömmar. Dessa strömmar består av ren ammoniak som återförs till reaktorinflödet, vatten innehållande 5 mol % ammoniak samt en produktström som enbart innehåller kväveoxid och syre.

Beräkna mängden kväveoxid i produktflödet per 100 mol införd färsk ammoniak, dvs utbytet för anläggningen.

Uppgift 2 (ideala reaktorer)

6 poäng

Produkten R skall framställas ur råmaterialen A och B i en isoterm process genom följande homogena reaktion i vätskefas:



Vid processen nedbrytes samtidigt ~~den bildade produkten R~~ ^{reaktanten A} enligt reaktionen:



Beräkna reaktorvolym och tillhörande medeluppehållstid om processen utföres i en

- a) ideal satsreaktor
- b) ideal tubreaktor
- c) ideal kontinuerligt arbetande tankreaktor

Processen skall genomföras vid 60°C vid vilken temperatur hastighetskonstanterna har värdena $k_1 = 0,05 \text{ min}^{-1}$ och $k_2 = 0,025 \text{ min}^{-1}$. Ingående lösning innehåller 1,20 mol/liter av A och 15,00 mol/liter av B, men inget R eller S. Föreningen A har molvikten 80 g/mol och B molvikten 18 g/mol. Tid för växling av charge och uppkörning uppgår till 30 min vid satsreaktorn.

Produktionen av den önskade produkten R skall uppgå till 100 kg R/tim. Halten av R i produktflödet måste vara 0,60 mol/l.

Uppgift 3 (reaktorstabilitet)

OBS! Ej för Kb-studenter

4 poäng

I en tankreaktor med volymen 750 l sker en 1:a ordningens irreversibel reaktion



Reaktorn är kylmantlad med en kylvattentemperatur uppgående till 270 K.

Bestäm reaktorns stationära driftpunkter samt omsättningen vid den övre driftpunkten. Visa om den övre driftpunkten är stabil eller instabil.

Övriga data:

- $q = 50 \text{ l/min}$
 $c_{A0} = 2,2 \text{ mol/l}$
 $k = 6 \cdot 10^5 \exp(-5529/T) \text{ min}^{-1}$
 $U = 10,4 \text{ cal/(cm}^2 \text{ h } ^\circ\text{C)}$ (värmegenomgångskoefficienten)
 $A = 0,5 \text{ m}^2$ (värmeväxlararen)
 $\Delta H = -50\,000 \text{ cal/mol A}$
 $C_p = 0,3 \text{ cal/(g } ^\circ\text{C)}$ konstant inom aktuellt temperaturområde
 $\rho = 1,05 \text{ g/cm}^3$ konstant inom aktuellt temperaturområde
 $T_0 = 285 \text{ K}$

Uppgift 4 (beskrivande)

OBS! Ej för Kb-studenter

10 poäng

- a) Gasfasreaktionen $A \rightarrow R$ med hastighetsekvationen $r = k \cdot c_A$ skall genomföras i en ideal adiabatisk tubreaktor. För denna process önskas en 90%-ig omsättning av reaktanten A.

Ställ upp de nödvändiga ekvationerna och förklara hur man kan beräkna reaktorvolymen då följande indata är givna:

Indata: ΔH vid T_{ref} , $c_{pj}(T)$, $k(T)$, q_f , c_{Af} (enbart A i reaktorinflödet), totaltrycket P (isobar process).

- b) Förklara varför reaktionshastigheten för en exoterm jämviktsprocess går genom ett maximum med ökande omsättningsgrad.
- c) Varför används seriekopplade reaktorer vid exoterma jämviktsprocesser? Diskutera också varför dessa reaktorer industriellt oftast är adiabatiska.
- d) Vad menas med fasplansanalys i reaktorsammanhang? Diskutera för några olika reaktantinitialhalter och initialtemperaturer inne i en ideal tankreaktor, hur systemet svänger in mot olika stationära driftpunkter vid uppstart.

Uppgift 5 (reella reaktorer)

6 poäng

För genomförandet av homogenfasreaktionen



användes liggande cylindrisk reaktor försedd med bafflar. Halten A i ingående lösning = 8 mol/l. Vid temperaturen 40°C har hastighetskonstanten k värdet 0,125 l mol⁻¹ min⁻¹.

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

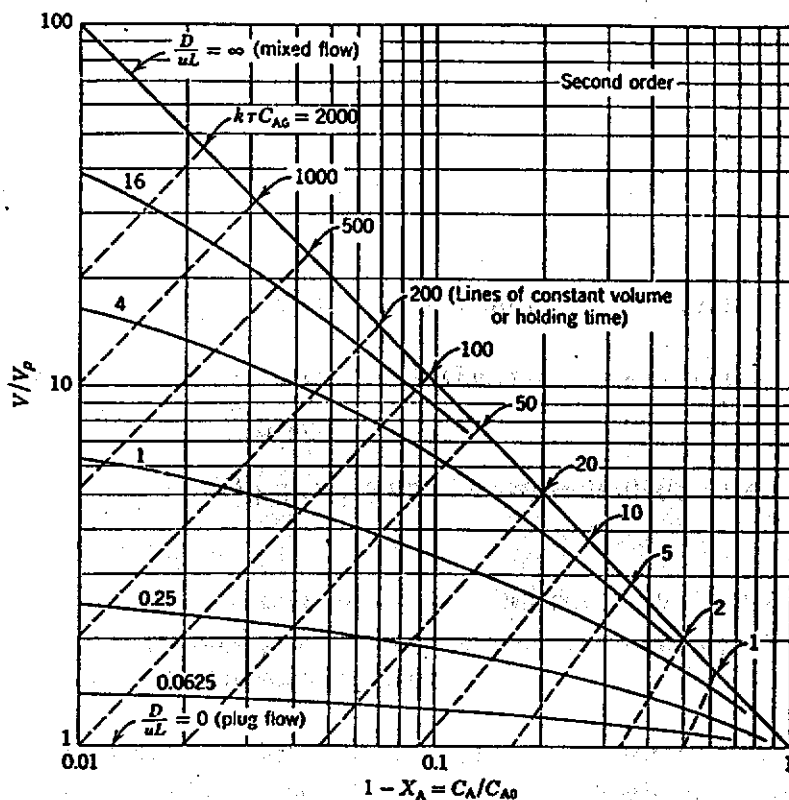
t/min	E(t) · 10 ⁴	t/min	E(t) · 10 ⁴
0	0	26	314,5
2	6,6	28	264,8
4	16,5	30	215,2
6	33,1	32	182,1
8	82,8	34	145,7
10	165,5	36	105,9
12	364,1	38	76,13
14	480,0	40	46,34
16	529,6	42	23,17
18	546,2	44	9,39
20	529,6	46	4,97
22	463,4	48	2,32
24	390,6	50	0,99

Vidare har ur samma frekvensfunktion medeluppehållstiden bestämts till 21,06 min samt variansen i uppehållstiden till 58,43 min². Reaktorn antas ur dispersionssynpunkt vara sluten.

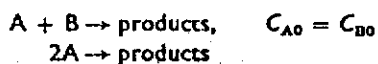
Beräkna omsättningen av komponent A för följande blandningsmodeller:

- Segregationsmodellen
- Dispersionsmodellen
- Tankseriemodellen

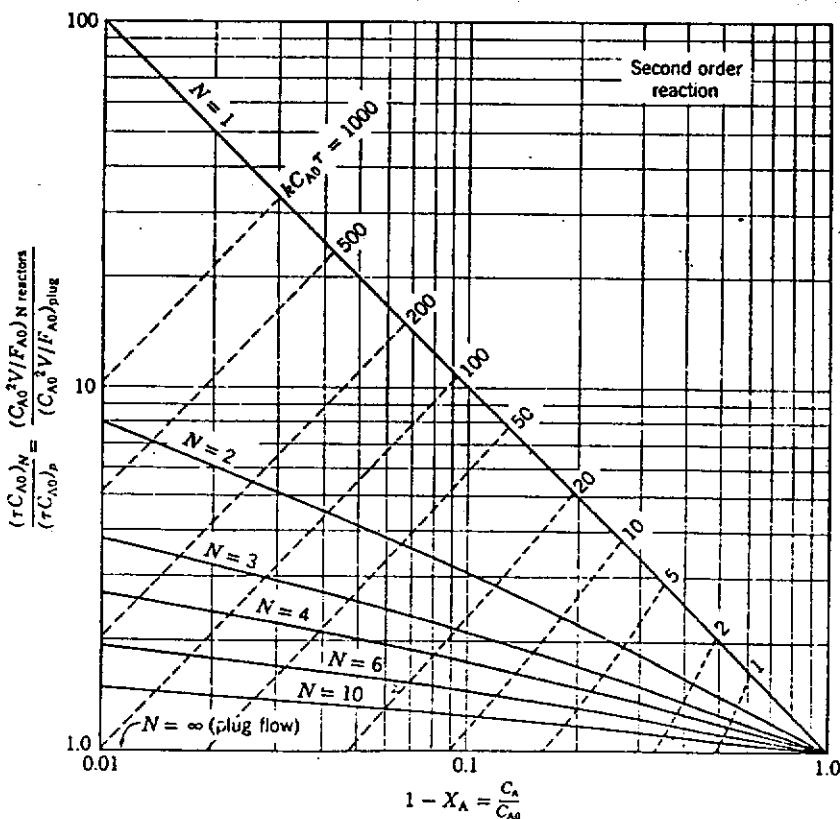
Obs! Bifogade diagram (se nästa sida) får användas för lösning av uppgiften.



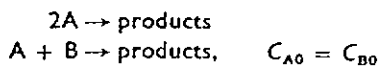
Comparison of real and plug flow reactors for the second-order reactions



assuming negligible expansion; from Levenspiel and Bischoff (1959, 1961).



Comparison of performance of a series of N equal-size mixed reactors with a plug flow reactor for elementary second-order reactions



with negligible expansion. For the same processing rate of identical feed the

Uppgift 6 (beskrivande)

OBS! Enbart för Kb-studenter

10 poäng

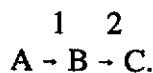
- a) Gasfasreaktionen $A \rightarrow R$ med hastighetsekvationen $r = k \cdot c_A$ skall genomföras i en ideal adiabatisk tubreaktor. För denna process önskas en 90%-ig omsättning av reaktanten A.

Ställ upp de nödvändiga ekvationerna och förklara hur man kan beräkna reaktorvolymen då följande indata är givna:

Indata: ΔH vid T_{ref} , $c_{pj}(T)$, $k(T)$, q_p , c_{Af} (enbart A i reaktorinflödet), totaltrycket P (isobar process).

- b) Diskuter, vilka reaktorer, ideal tank- eller ideal tubreaktor, är att föredraga ur kapacitetssynvinkel vid en kontinuerlig enzymatisk process. Processen är autokatalytisk, vilket innebär att hastigheten har ett maximum då omsättningsgraden ändras.

- c) Diskutera hur man kan, med hjälp av ett lämpligt val av temperaturnivå, maximera selektiviteten med avseende på den önskade produkten B i de konsekutiva reaktionerna



E_1 (aktiveringsenergin för bildandet av B) > E_2 (aktiveringsenergin för bildandet av C)

- d) Diskutera integralreaktors nackdelar vid kinetiska mätningar.

Uppgift 7 (ideal tankreaktor, material- och värmebalans) **OBS! Enbart för Kb-studenter** 4 poäng

En gasfasreaktion $2A + 3B \rightarrow C + 2D$ sker i en ideal tankreaktor. Reaktionshastigheten skrivs: $r = k c_A c_B$. Inflödet består av enbart A och B.

Använd följande storheter

$$F_A^o, F_B^o \text{ mols}; x_A$$

$$\langle c_{pA} \rangle^T, \langle c_{pB} \rangle^T, \langle c_{pC} \rangle^T, \langle c_{pD} \rangle^T, \langle c_{pA} \rangle^{Tf}, \langle c_{pB} \rangle^{Tf} \{J/(mol K)\}$$

$$T \{K\}, T_f \{K\}; T_{ref}; \Delta H \{J/mol\} \text{ given vid } T_{ref}$$

$$P \{Pa\}; R \{Pa m^3/(mol K)\}; V \{m^3\}; k \{m^3/(mol s)\}$$

och ställ upp:

- Materialbalans för A
- Materialbalans för B
- Materialbalans för C
- Materialbalans för D
- Värmebalans för reaktorn

Svar till tentamensuppgifter: KRT-GK 1998-05-23

1) Utbytet $\eta = 0,927$

2) a) $V_r = 1,37 \text{ m}^3$ $\tau = 48,5 \text{ min}$
b) $V_r = 0,52 \text{ m}^3$ $\tau = 18,5 \text{ min}$
c) $V_r = 1,13 \text{ m}^3$ $\tau = 40 \text{ min}$

3) En driftpunkt vid $T = 615 \text{ K}$ där $x = 0,999$. Denna driftpunkt är stabil!

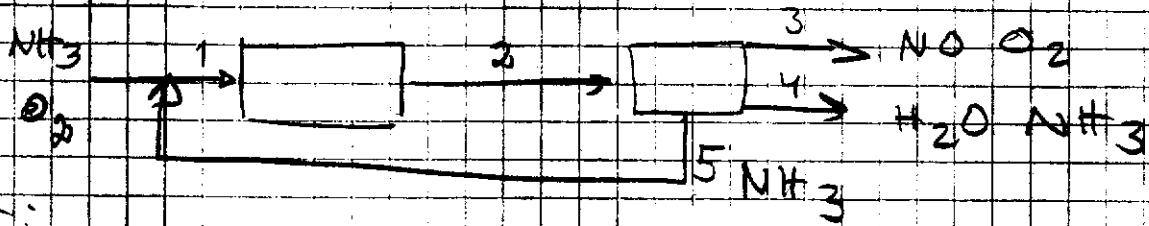
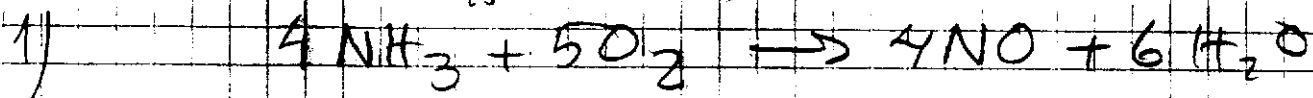
4) beskrivande!

5) a) $x = 0,973$ b) $x = 0,977$ c) $x = 0,966$ (för 8 ideala tankar)

6) beskrivande!

7) beskrivande!

$$48 - 05 = 23$$



Given:

in 20% overshoot $\text{O}_2 \Rightarrow \frac{5}{4} \cdot 1,2 \cdot n_{\text{NH}_3}^f$

i 4 5 mol% NH_3

$x_{\text{reak}} = 0,7$

Zeit: $\frac{n_{\text{NO}}^3}{n_{\text{NH}_3}^f}$

to EMB over systemet map

N: $n_{\text{NO}}^3 + n_{\text{NH}_3}^4 = n_{\text{NH}_3}^f$

H: $n_{\text{H}_2\text{O}}^4 \cdot 2 + n_{\text{NH}_3}^4 \cdot 3 = n_{\text{NH}_3}^f \cdot 3$

$n_{\text{H}_2\text{O}}^4 = 0,95 \cdot n_{\text{tot}}^4$

$n_{\text{NH}_3}^4 = 0,05 \cdot n_{\text{tot}}^4$

i H-balc. $2 \cdot 0,95 \cdot n_{\text{tot}}^4 + 3 \cdot 0,05 \cdot n_{\text{tot}}^4 = 3 \cdot n_{\text{NH}_3}^f$

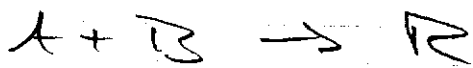
$\Rightarrow n_{\text{tot}}^4 = \frac{3 \cdot n_{\text{NH}_3}^f}{2 \cdot 0,95 + 3 \cdot 0,05} = \frac{3 \cdot n_{\text{NH}_3}^f}{2,05}$

N: $\Rightarrow n_{\text{NO}}^3 = n_{\text{NH}_3}^f - n_{\text{NH}_3}^4 = n_{\text{NH}_3}^f \left(1 - \frac{3 \cdot 0,05}{2,05} \right)$

$= \frac{38}{41} \cdot n_{\text{NH}_3}^f$

per 100 mol $n_{\text{NH}_3}^f \Rightarrow n_{\text{NO}}^3 = 92,68 \text{ mol}$

$\Rightarrow \text{afbyte } \eta = 0,927$



$$r_1 = k_1 C_A \quad k_1 = 0,05 \text{ min}^{-1}$$

$$r_2 = k_2 C_A \quad k_2 = 0,025 \text{ min}^{-1}$$

Sols

MB A

$$\frac{dC_A}{dt} = -(k_1 + k_2) C_A$$

$$C_A = C_{Af} e^{-(k_1 + k_2)t}$$

R:

$$\frac{dC_R}{dt} = k_1 C_A = k_1 C_{Af} e^{-(k_1 + k_2)t}$$

$$C_R = k_1 C_{Af} \int_0^t e^{-(k_1 + k_2)t} dt =$$

$$= k_1 C_{Af} \left[\frac{1}{-(k_1 + k_2)} e^{-(k_1 + k_2)t} \right]_0^t$$

$$= \frac{k_1 C_{Af}}{k_1 + k_2} (1 - e^{-(k_1 + k_2)t})$$

$$\equiv \frac{1}{2} C_{Af}$$

$$e^{-(k_1 + k_2)t} = 1 - \frac{k_1 + k_2}{2k_1} = 1 - \frac{0,05 + 0,025}{2 \cdot 0,05}$$

$$= 0,25$$

$$t = \underline{18,48 \text{ min}}$$

$$t_{\text{batch}} = 18,48 + 30 = 48,48 \text{ min}$$

$$\dot{m}_R = \frac{V_r}{t_{\text{batch}}} \cdot C_R \cdot M_R$$

$$V_r = \frac{\dot{m}_R t_{\text{batch}}}{C_R M_R} = \frac{100 \cdot 10^3 \text{ g/h} \cdot \frac{48,48}{60} \text{ h}}{0,6 \text{ mol/l} \cdot 98 \text{ g/mol}}$$
$$= 1374 \text{ l} = \underline{\underline{1,37 \text{ m}^3}}$$

$$\frac{C_A}{C_{A0}} = e^{-(k_1 + k_2)t} = e^{-(0,05 + 0,025) \cdot 18,48}$$
$$= 0,25$$

$$x_A = 1 - 0,25 = \underline{\underline{0,75}}$$

$$S = \frac{r_1}{r_2} = \frac{k_1 C_A}{k_2 C_A} = \frac{0,05}{0,025} = 2$$

Tubs

$$A: -q dc_A = (k_1 + k_2) C_A dV_r$$

$$\tau = \frac{V_r}{q} \quad d\tau = \frac{dV_r}{q}$$

$$-dc_A = (k_1 + k_2) C_A d\tau$$

$$\frac{dc_A}{d\tau} = -(k_1 + k_2) C_A$$

$$R: -q dc_R + k_1 C_A dV_r = 0$$

$$-dc_R + k_1 C_A d\tau = 0$$

$$\frac{dc_R}{d\tau} = k_1 C_A$$

Samma som för subreaktor

$$\Rightarrow \tau = 18,48 \text{ min}$$

$$x_A = 0,75$$

$$S = 2$$

Reaktorvolym från prod. krav

$$\dot{m}_R = \frac{V_r \cdot q}{\tau} C_R M_R$$

$$V_r = \frac{\dot{m}_R \tau}{C_R M_R} = \frac{100 \cdot 10^3 \text{ g/h} \cdot \frac{18,48}{60} \text{ h}}{0,6 \text{ g/l} \cdot 98 \text{ g/mol}} = 524 \text{ l}$$
$$= \underline{\underline{0,52 \text{ m}^3}}$$

Tank

$$A: \quad q C_{Af} - q C_A - (k_1 + k_2) C_A V_r = 0$$

$$C_{Af} - C_A = (k_1 + k_2) C_A \tau$$

$$C_A = \frac{C_{Af}}{1 + (k_1 + k_2) \tau}$$

$$R: \quad -q C_R + k_1 C_A V_r = 0$$

$$C_R = k_1 C_A \tau = \frac{k_1 C_{Af} \tau}{1 + (k_1 + k_2) \tau} = \frac{k_1 C_{Af}}{\frac{1}{\tau} + k_1 + k_2}$$

$$\frac{1}{\tau} = \frac{k_1 C_{Af}}{C_R} - k_1 - k_2 =$$

$$= \frac{0,05 \cdot 1,2}{0,6} - 0,05 - 0,025 = 0,025$$

$$\tau = \underline{\underline{40 \text{ min}}}$$

PSS from front

$$V_r = \frac{\dot{m}_R \tau}{C_R M_R} = \frac{100 \cdot 10^3 \text{ g/h} \cdot \frac{40}{60} \text{ h}}{0,6 \text{ mol/l} \cdot 98 \text{ g/mol}} = 1134 \text{ l}$$
$$= \underline{\underline{1,13 \text{ m}^3}}$$

$$\frac{C_A}{C_{Af}} = \frac{1}{1 + (k_1 + k_2)\tau} = \frac{1}{1 + (0,05 + 0,025) \cdot 40} = 0,25$$

$$x_A = 1 - 0,25 = \underline{\underline{0,75}}$$

$$S = \frac{k_1 C_A}{k_2 C_A} = \frac{0,05}{0,025} = \underline{\underline{2}}$$

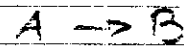
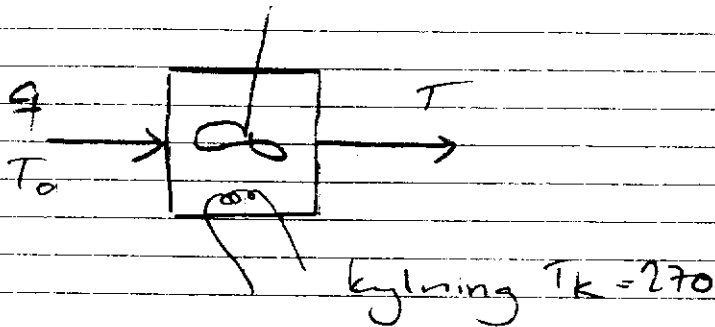
	<u>Sals</u>	<u>Two</u>	<u>Tambak</u>
$V_r \text{ (m}^3\text{)}$	1,37	0,52	1,13
$\tau \text{ (min)}$	48,48	18,48	40
x_A	0,75	0,75	0,75
S_{21}	2	2	2

Reaktor stabilitet

(3)

tid.

uppgift 3 tenta 980523



$$r = k C_A$$

VB över reaktorn

$$in - ut + reagerat - kylning = 0$$

$$\dot{Q} C_p (T_0 - T_{ref}) - \dot{Q} C_p (T - T_{ref}) + r V_r (-\Delta H) - U A (T - T_k) = 0$$

VB ger $Q_b = Q_r$

$$Q_r = r V_r \cdot (-\Delta H) = 6 \cdot 10^5 \cdot \exp\left[-\frac{5529}{T}\right] C_A V_r (-\Delta H)$$

$$Q_b = \dot{Q} C_p (T - T_0) + U A (T - T_k) \quad \left(\frac{\text{cal}}{\text{min}}\right)$$

MB över reaktorn

$$Q_r = \dot{Q} C_A^0 x \cdot (-\Delta H)$$

$$\dot{Q} C_{A0} - \dot{Q} C_A - r V_r = 0 \quad \left[\frac{\text{mol}}{\text{min}}\right]$$

$$\dot{Q} C_{A0} - \dot{Q} C_A - k C_A V_r = 0$$

$$C_A = \frac{\dot{Q} C_{A0}}{\dot{Q} + k V_r} = \frac{C_{A0}}{1 + k \tau}$$

Alternativt

$$\dot{Q} C_{A0} - \dot{Q} C_{A0} (1-x) - k C_{A0} (1-x) V_r = 0$$

$$\dot{Q} - \dot{Q} + \dot{Q} x - k V_r + k x V_r = 0 \quad \text{H)}$$

$$x = \frac{k V_r}{\dot{Q} + k V_r} = \frac{k \tau}{1 + k \tau} \quad \text{I)}$$

2(3)

$$\Rightarrow Q_r = k C_A V_r (-\Delta H) = 6 \cdot 10^5 \exp\left(-\frac{5529}{T}\right) \frac{7 \cdot 4^0}{7 + k V_r} V_r (-\Delta H)$$

Plotta Q_r och Q_b

Stärningspkt ger en driftpunkt för

$$\left\{ \begin{array}{l} T = 615 \text{ K} = 342^\circ \text{C} \\ C_A = 0,0018 \end{array} \right.$$

$$\Rightarrow x = 1 - \frac{C_A}{C_{A0}} = 0,9992$$

Stabilitet

Ikke - adiabatisk \Rightarrow kolla båda villkor.

Villkor 2

$$V_A + 7 \gamma C_p > \left(\frac{\partial Q_r}{\partial T}\right)_x (1-x) = \left(\frac{\partial Q_r}{\partial T}\right)_{T_S}$$

$$\Rightarrow \left(\frac{\partial Q_b}{\partial T}\right)_S > \left(\frac{\partial Q_r}{\partial T}\right)_S \quad \frac{C_r}{dT} = 72$$

kolla i figur \Rightarrow uppfyllt

Villkor 1

$$V_A + 7 \gamma C_p (2 + k \tau) > \left(\frac{\partial Q_r}{\partial T}\right)_x$$

$$V_A = 1,9026 \cdot 10^7 \quad \frac{\text{cal}}{\text{min} \cdot ^\circ \text{C}}$$

$$Q_r = k C_{A0} (1-x) V_r (-\Delta H) = 6 \cdot 10^5 \exp\left[-\frac{5529}{T}\right] C_{A0} (1-x) V_r (-\Delta H)$$

$$\Rightarrow H_L = \left(\frac{\partial Q_r}{\partial T}\right)_x = \frac{5529}{T^2} \cdot 6 \cdot 10^5 \cdot \exp\left[-\frac{5529}{T}\right] C_{A0} (1-x) V_r (-\Delta H)$$

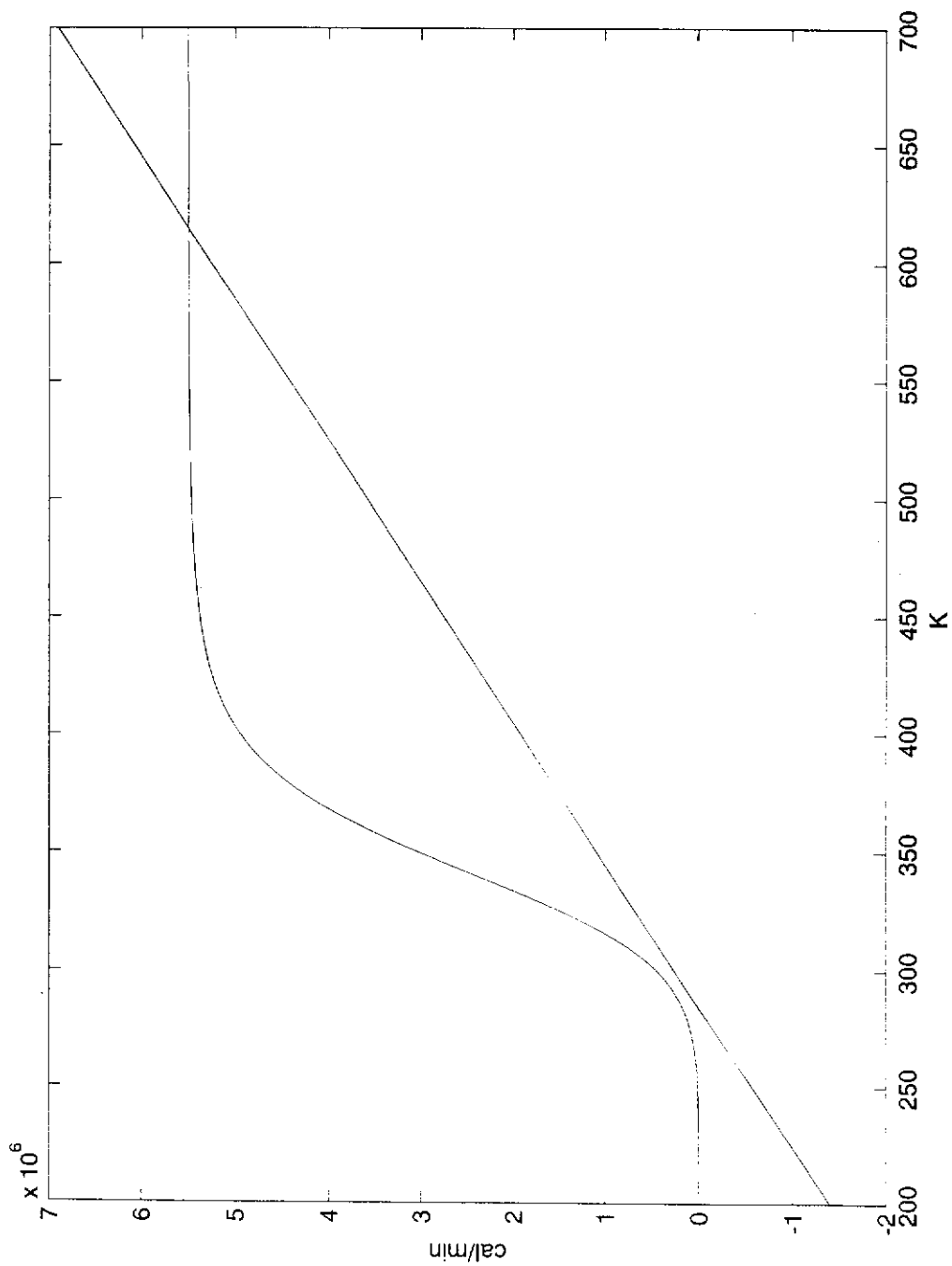
3(3)

$$H_L = 7,9043 \cdot 10^4$$

$$V_h = 1,9026 \cdot 10^7$$

⇒ Stabil punkt.

UPPG 3 980523



Tenta 980523
Uppg 3 Stabilitet

T (K)	Qb 1.0e+006 *	<i>f/a</i>	Qr 1.0e+006 *
200	-1.3994		0.0000
250	-0.5686		0.0123
300	0.2622		0.4503
350	1.0931		3.0453
400	1.9239		4.9465
450	2.7548		5.3706
500	3.5856		5.4615
550	4.4164		5.4858
600	5.2472		5.4939
650	6.0781		5.4970
700	6.9089		5.4984

% KRTgk Tentamen 98-05-23 Uppgift 5

% Reella reaktorer

% Reaktionen 2A --> R $r = k * c_A$

% DATA

```

cAf = 8.0 ; % mol/l
k = 0.125; % l/(mol*min)
tm = 21.06; % min
s = 7.66; % min
ts = [0:2:48 50]'; % observerad spårämnestid, min
E = [0 6.6 16.5 33.1 82.8 165.5 364.1 480.0 529.6 546.2 529.6 463.4
390.6...

```

```

314.5 264.8 215.2 182.1 145.7 105.9 76.13 46.34 23.17 9.39 4.97 2.32 0.99]]*1.0e-4
; % Uppehållstidsfördelning
plot(ts,E),xlabel('ts,min'),ylabel('E.min-1'),title('Frekvensfunktion')

```

% Beräkningar

```

tmedel=trapz(ts,ts.*E); % = tm
var=trapz(ts,(ts-tmedel).^2.*E); % = s^2

```

% Tankseriemodellen

```

N=tmedel^2/var; % antalet tankar
Ntot=ceil(N); % antalet hela tankar
cA(1)=cAf;
for i=1:Ntot
    cA(i+1)=(sqrt(8*k*tmedel/Ntot*cA(i)+1)-1)/4/k/tmedel*Ntot;
end
omstank=1-cA(Ntot+1)/cAf;
disp(' '),disp(' ')
disp(['Exakt beräknad omsättningsgrad för ',num2str(Ntot),' st ideala tankar: ',num2str(
omstank)])

```

$N=8 \quad 0.9662 = x_A$

% Parametrar för lösning med diagram

```

disp(' ')
disp('Tankseriemodell: Parametrar för lösning med diagram.')
disp(['antal tankkar N = ',num2str(N),' k*tmedel*cAf = ', num2str(k*tmedel*cAf)])
disp(['eller 2*k*tmedel*cAf = ',num2str(2*k*tmedel*cAf)])
disp('Diagram ger omstank = 0.935 eller 0.960')

```

% Dispersionsmodellen

```

% Beräkning av dispersionsparametern p=Dea/vl
p = fsolve('uppg5disp',0.1,[],[],tmedel,var);
disp(' ')
disp('Dispersionsmodell: Parametrar för lösning med diagram. ')
disp(['Dea/vL = ', num2str(p),' k*tmedel*cAf = ', num2str(k*tmedel*cAf)])
disp(['eller 2*k*tmedel*cAf = ',num2str(2*k*tmedel*cAf)])
disp('Diagram ger omsdisp = 0.940 eller 0.965')

```

% Segregationsmodellen

```

omsseg = 1-trapz(ts,1./(2*k*ts*cAf+1).*E);
disp(' ')
disp(['Segregationsmodell: omsseg = ',num2str(omsseg)])

```

$x_A = 0.9732$

% Idel tubreaktor

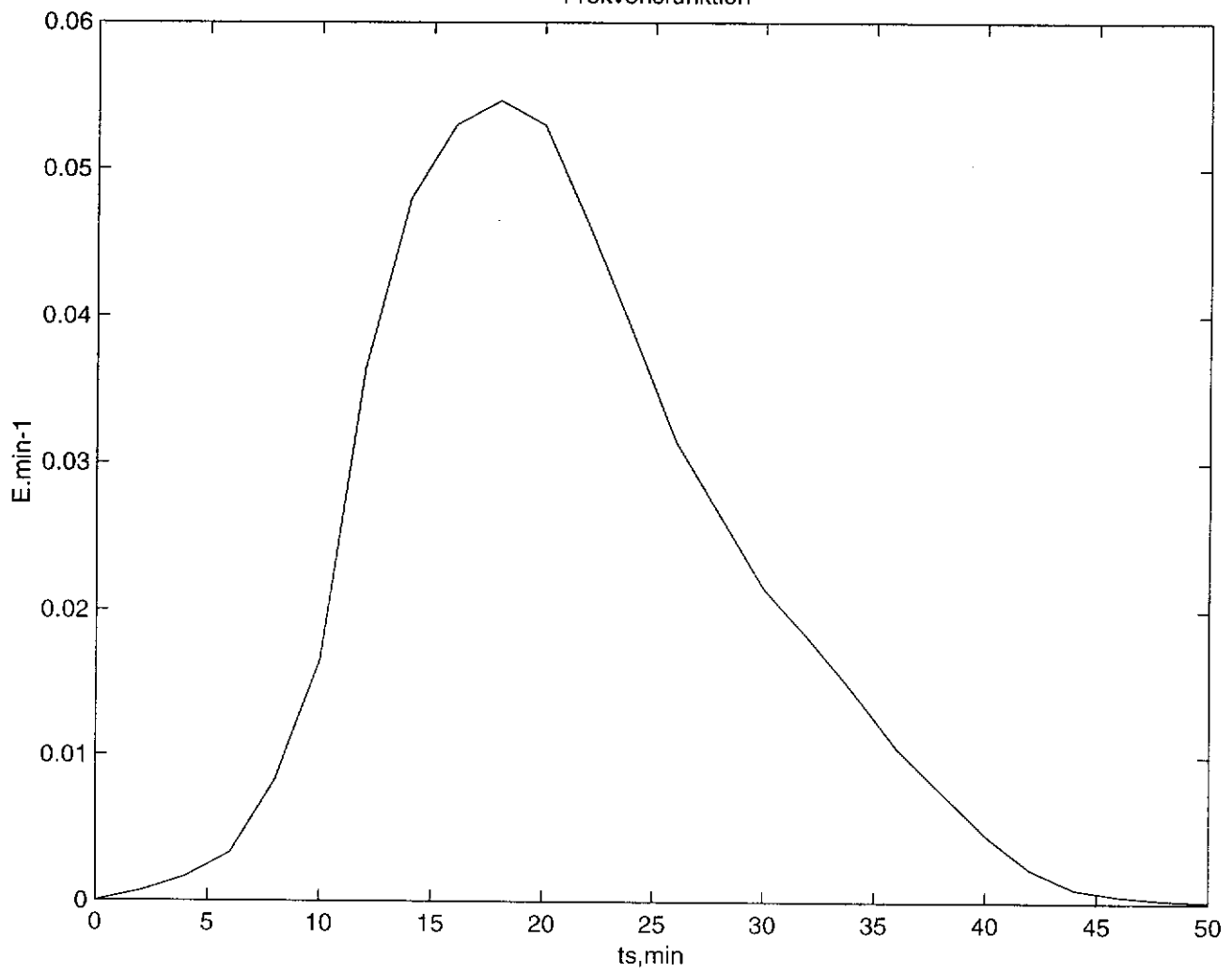
```

omstub=1-1/(2*k*cAf*tmedel+1);
disp(' ')
disp(['Ideal tubreaktor: omstub = ',num2str(omstub)])

```

$x_A = 0.9768$

Frekvensfunktion



% Funktionsfil för beräkning av dispersionskoefficient

```
function f = uppg5disp(p,tmedel,var)
f = 2*p -2*p^2*(1-exp(-1/p))-var/tmedel^2;
```

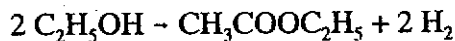

Uppgift 1 (materialbalans)

5 poäng

Framställning av acetaldehyd (CH_3CHO) genom katalytisk dehydrering av etanol ($\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$) sker enligt reaktionsformeln



Etanolen reagerar även under bildning av etylacetat ($\text{CH}_3\text{COOC}_2\text{H}_5$) genom sidoreaktionen



Vid temperaturen 330°C i reaktorn och med koppar(II)nitrat som katalysator reagerar 85% av etanolen, varvid erhålles en blandning av etanol, acetaldehyd, etylacetat och väte. Viktsförhållandet mellan acetaldehyd och etylacetat i denna blandning är 7,3:1. Gasen nedkyls i en kolonn, varifrån tre kondensat uttages, nämligen acetaldehyd som innehåller 5 vikt % etanol, ren etylacetat samt ren etanol, vilken återförs till reaktorinflödet. Det färska inflödet består av ren etanol.

Beräkna

- Förhållandet mellan recirkulerad och tillförd färsk etanol.
- Etanolmängden som tillförs reaktorn räknat per 100 kg framställd etanolhaltig acetaldehyd.

Uppgift 2 (tankreaktor, optimering)

5 poäng

En anläggning för tillverkning av produkten R ur reaktanten A med hjälp av reaktionen $\text{A} \rightarrow \text{R}$ består av en ideal tankreaktor och en i serie med reaktorn kopplad separator, som separerar produkten R från oreagerad reaktant A. Separationen sker fullständigt och oreagerad A återföres till reaktorns inflöde. Det färska inflödet består enbart av A (inget lösningsmedel) och koncentrationen av A i detta flöde uppgår till 1 kmol/m^3 . Kostnaden för A är 1 USD/kmol. Koncentrationen av A i återflödet är också 1 kmol/m^3 . Drifkostnaden för reaktorn är $8 \text{ USD} + 0,01 \text{ USD per m}^3$ reaktorvolym och drifkostnaden för separatoren är $8 \text{ USD} + 0,1 \text{ USD/m}^3$ ingående flöde till separatoren.

Man önskar framställa 100 kmol R/h. Vad blir den lägsta kostnaden för framställning av 100 kmol R/h? Densiteten i flödena är oberoende av sammansättningen.

Hastighetsekvationen är $r = k \cdot c_A \cdot c_R$.

Hastighetskonstanten är $k = 0,1 \frac{\text{m}^3}{\text{kmol} \cdot \text{h}}$.

Uppgift 3 (tubreaktor)

5 poäng

I en industriell anläggning genomföres en heterogen katalytisk gasfasprocess vid atmosfärstryck i tre parallella lika stora rörreaktorer, som kan betraktas som ideala. Det elementära förloppet vid den katalytiska reaktionen kan skrivas



Inflödet till reaktorerna utgörs av en blandning av reaktanten A och en inert förening S, som inte påverkar reaktionsförloppet men som har en skyddande inverkan på katalysatorn genom att minska deaktiveringen av denna. En av de tre reaktorerna var installerad senare än de övriga för att höja produktionskapaciteten föranledd av en tillfälligt ökad efterfrågan på produkten R. Efter en relativt kort driftstid fann man att det använda konstruktionsmaterialet i den tredje reaktorn ej svarade mot specifikationerna. Reaktorn måste tagas ur drift och kunde ej repareras. Inflödet till de två kvarvarande reaktorerna höjdes med 50% för att i någon mån kompensera för den minskade produktionskapaciteten. Vid normal drift med tre reaktorer fick reaktionen förlöpa till 75% utbyte, dvs till 75% av den omsättningsgrad som erhålles vid jämvikt. Hur stort blir utbytet med de två återstående reaktorerna då flödes hastigheten höjts med 50%? Vid beräkningen förutsättes att temperaturen och katalysatorns aktivitet är konstanta över hela katalysatorskikten. Vid de aktuella driftsbetingelserna gäller jämviktssambandet

$$K_p = p_R^2 / p_A^2 = 4$$

Nettohastigheten för förloppet kan skrivas

$$r = k_1 p_A^2 - k_{-1} p_R^2 = k_1 (p_A^2 - p_R^2 / K_p)$$

Uppgift 4 (reaktorstabilitet)

5 poäng

En första ordningens irreversibel reaktion (A → B) i vätskefas skall genomföras kontinuerligt i en ideal tankreaktor försedd med kylare.

Reaktionsbetingelserna är följande:

Reaktorns volym:	10 m ³
Reaktantkoncentration i inflödet:	5 kmol m ⁻³
Flödes hastighet:	10 ⁻² m ³ s ⁻¹
Reaktionsentalpi:	-20 kJ mol ⁻¹ (oberoende av temp.)
Hastighetskonstant:	10 ¹³ exp(-12000/T), s ⁻¹
Lösningens densitet:	850 kg m ⁻³ (oberoende av temp. och omsättningsgrad)
Värmekapacitivet för lösningen:	2200 J kg ⁻¹ K ⁻¹ (oberoende av temp. och omsättningsgrad)
Produkten av kyltan (A) och värmegenomgångskoefficienten (U):	9000 J s ⁻¹ K ⁻¹
Kylmediets temperatur (konstant):	310 K
Inflödets temperatur:	310 K

forts.

Uppgift 4, forts

För det utvecklade reaktionsvärmets (Q_r) beroende av reaktortemperaturen under ovanstående betingelser gäller följande sammanhörande värden (se tabellen) vid stationära betingelser:

T/K	$Q_r \cdot 10^{-5}$ s/J
290	0,1
300	0,4
310	1,4
320	3,4
330	6,1
340	8,2
350	9,3

Beräkna reaktorns driftstemperatur och angiv omsättningsgraden i denna. Är driftspunkten stabil?

Uppgift 5 (uppehållstidsfördelning)

5 poäng

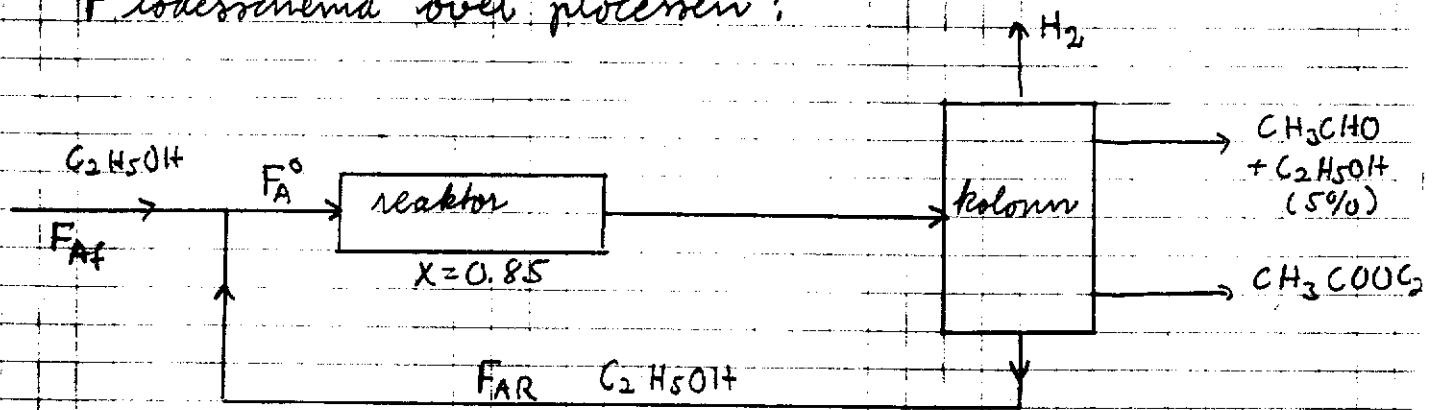
Man vill bestämma blandningseffektiviteten i en reaktorkaskad bestående av sex lika stora seriekopplade reaktorer försedda med omrörare. Vid tiden $t = 0$ tillsättes en puls av syralösning i inflödet till den första reaktorn. Syrakoncentrationen i utflödet från den sista reaktorn mäts med tio minuters mellanrum. Sammanhörande värden på tid och syrakoncentration finns i Tabell 1.

Tabell 1 Syrakoncentrationen i utflödet från den sjätte reaktorn

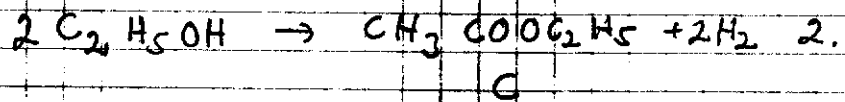
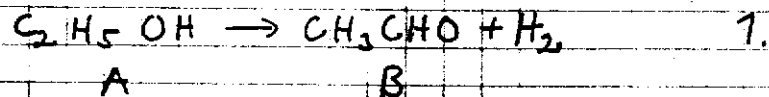
tid/ min.	syrakoncentration/ (kg/m ³)
0	0
10	1,63
20	3,96
30	3,00
40	1,39
50	0,51
60	0,10
70	0

Beräkna hur många seriekopplade ideala tankreaktorer som reaktorkaskaden motsvarar.

Flödeschema över processen:



Reaktioner:



Reaktionsbas: Fly etanolhaltig acetaldehyd.

Molfördeshastigheter vid omsättningsgraden X i reaktorn:

$$F_A = F_{Af} - \xi_1 - 2\xi_2$$

$$\xi_1 = \text{mol omsatt vid reaktion 1}$$

$$\text{och } F_A = F_{Af} - F_A^0 \cdot X$$

$$\xi_2 = \text{mol omsatt vid reaktion 2}$$

$$F_B = \xi_1$$

$$F_C = \xi_2$$

$$F_{Af} = F_A + F_B + 2F_C$$

Vidare gäller:

$$F_A = \frac{0.05F}{M_A}$$

$$M_A = 46.1 \frac{\text{kg}}{\text{kmol}}$$

$$M_B = 44.06 \frac{\text{kg}}{\text{kmol}}$$

$$F_B = \frac{0.95F}{M_B}$$

$$M_C = 88.1 \frac{\text{kg}}{\text{kmol}}$$

$$\frac{F_B \cdot M_B}{F_C \cdot M_C} = 7.3 \quad \Rightarrow \quad F_C = \frac{0.95F}{M_C \cdot 7.3}$$

$$F_{Af} = \frac{0.05F}{M_A} + \frac{0.95F}{M_B} + 2 \cdot \frac{0.95F}{7.3M_C}$$

$$F_{Af} = 2.560 \cdot F$$

$$F_A^0 \alpha = F_{Af} - F_A = \frac{2.560F}{100} - \frac{5F}{100 \text{ MA}} = \frac{2.452}{100} F$$

$$F_A^0 = \frac{2.452}{100 \cdot 0.85} F = \frac{2.885}{100} F$$

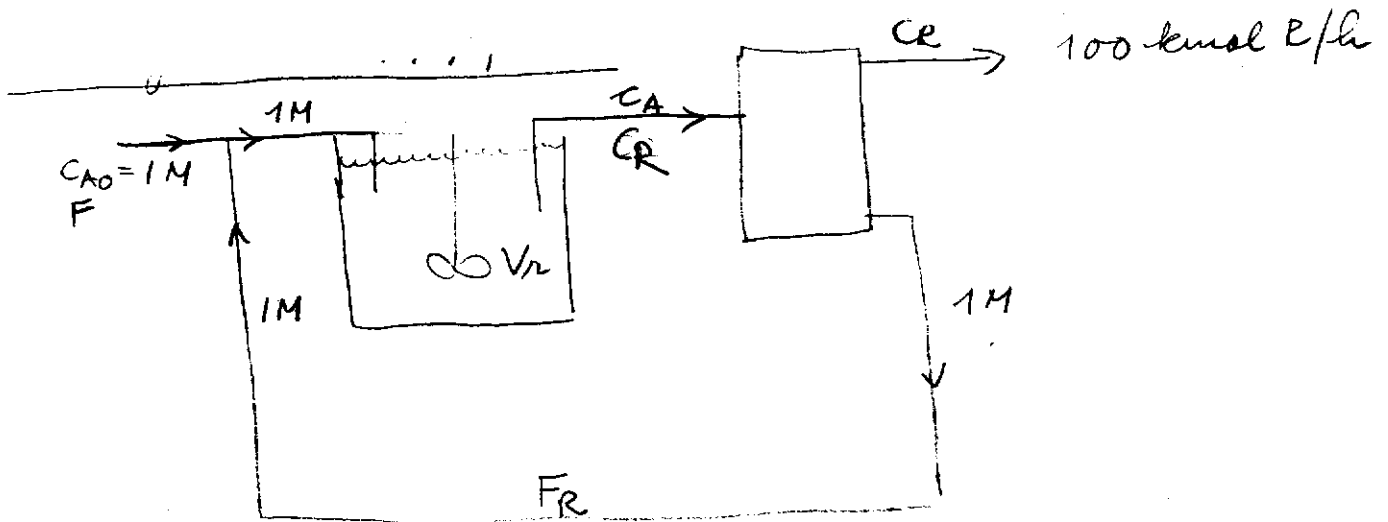
$$F_{AR} = F_A^0 - F_{Af} = \frac{0.325}{100} F$$

$$\frac{F_{AR}}{F_{Af}} = \frac{0.325}{2.560} = \frac{1}{7.88}$$

$$F = 100 \text{ kg}$$

$$F_A^0 = 2.885 \text{ kmol} = 2.885 \cdot 46.1 = \underline{\underline{133.0 \text{ kg}}}$$

u 299. (2) 1998-01-16



A → R

$$C_e = C_{A0} - C_A = 1 - C_A$$

utflöde av R = friskt inföde av A % 100 = $C_{A0} \cdot F$

men $c_{A0} = 1$ ger $F = 100 \text{ m}^3/\text{h}$

4,

Balans av A över reaktorn

$$(100 + F_R) \cdot 1 - (100 + F_R) c_A - 0,1 c_A (1 - c_A) V_R = 0$$

Balans av A över separatorn

$$(100 + F_R) c_A = F_R \cdot 1$$

Kostnad: C (per timme) USD/h

$$C = \underset{\text{råvara}}{100} + 8 + 0,01 V_R + 8 + 0,1 (100 + F_R)$$

$$= 100 + 16 + 10 + 0,01 V_R + 0,1 F_R$$

$$= 126 + 0,01 V_R + 0,1 F_R$$

Separatorbalansen ger

$$c_A = \frac{F_R}{100 + F_R}$$

och/eller

$$F_R = \frac{100 c_A}{1 - c_A}$$

Reaktorckv. ger

$$(100 + F_R)(1 - c_A) = 0,1 c_A (1 - c_A) V_R$$

$$V_R = \frac{100 + F_R}{0,1 c_A} = \frac{1000}{c_A (1 - c_A)}$$

$$C = 126 + 0,01 \frac{1000}{c_A(1-c_A)} + 0,1 \frac{100c_A}{1-c_A}$$

$$C = 126 + \frac{10}{c_A(1-c_A)} + \frac{100c_A}{1-c_A}$$

$$C = 126 + \frac{10 + 100c_A^2}{c_A(1-c_A)}$$

$$\frac{dc}{dc_A} = \frac{c_A(1-c_A)20c_A - (10 + 100c_A^2)(1-2c_A)}{[c_A(1-c_A)]^2}$$

$$dc/dc_A = 0 \text{ ger}$$

$$2c_A^2(1-c_A) = (10 + 100c_A^2)(1-2c_A)$$

Prövning ger

(givet var $c_A \approx 0,4$)

c_A	VL	HL
0,4	0,192	0,232
0,42	0,204	0,188
0,41	0,198	0,210

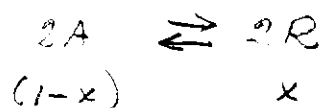
Rätt lösning $c_A = 0,414$

$$C = 126 + \frac{10}{0,41 \cdot 0,59} + \frac{10 \cdot 0,41}{0,59} = \underline{\underline{174,4 \text{ dollar/t}}}$$

(Obs! r_{max} erhålls för $c_A = 0,5M$)

mpg. (3) 198-01-16

Bas: 1 mol A



$$\Sigma \text{ mol} = 1+S$$

Med inert gas S: 5 mol per 1 mol A = infödet

$$r = k_1 p_A^2 - k_{-1} p_R = k_1 (p_A^2 - p_R^2 / K_p)$$

$$r = k_1 (p_A^2 - p_R^2 / 4)$$

$$p_A = (1-x)/(1+S)$$

$$p_R = x/(1+S)$$

$$r = \frac{k_1}{(1+S)^2} \left\{ (1-x)^2 - \frac{x^2}{4} \right\}$$

$$r = \frac{k_1}{(1+S)^2} \left(1-x + \frac{1}{2}x \right) \left(1-x - \frac{1}{2}x \right)$$

3

$$r = \frac{k_1}{(1+S)^2} (1-0,5x)(1-1,5x)$$

$$\frac{W}{F_A} = \frac{(1+S)^2}{k_1} \int_0^x \frac{dx'}{(1-0,5x')(1-1,5x')}$$

Med hjälp av tabell för standardintegraler erhålls

$$\frac{W}{F_A} = \frac{(1+S)^2}{k_1} \frac{1}{-0,5-1,5} \ln \frac{1-0,5x}{1-1,5x}$$

$$\frac{W}{F_A} = \frac{(1+S)^2}{k_1} \ln \frac{(1-0,5x)}{1-1,5x} \quad \underline{\text{chw 1}}$$

Beräkning av x vid 75% utbyte

$$p_2^2 / p_A^2 = 4 \text{ ger } p_R / p_A = 2$$

Vid 100% utbyte, dvs jämvikt erhålls

$$\frac{x}{1-x} = 2$$

$$x = 2/3$$

$$75\% \text{ utbyte ger } x = \frac{3}{4} \cdot \frac{2}{3} = 0,5$$

se också chw (1)

$$\frac{W}{F_A} = A \ln \frac{(1-0,5x)}{(1-1,5x)}$$

Kan sator mängden är densamma före och efter
och även av F_A till 1,5.

(4)

Vid normaldrift med tre reaktorer
gäller för varje reaktor:

$$W = F_A \cdot A \cdot \ln 3$$

Vid drift av två reaktorer med ökat flöde
gäller för varje reaktor:

$$W = 1,5 F_A \cdot A \cdot \ln \frac{1-0,5x}{1-1,5x}$$

För beräkning av x gäller

$$\ln 3 = 1,5 \ln \frac{1-0,5x}{1-1,5x}$$

eller

$$\log 3 = 1,5 \log \frac{1-0,5x}{1-1,5x}$$

$$\frac{0,4771}{1,5} = 0,317$$

$$\log \frac{1-0,5x}{1-1,5x} = 0,317$$

$$\frac{1-0,5x}{1-1,5x} = 2,08$$

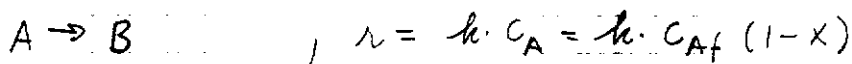
$$x = 0,41$$

$$\text{utbytet} : \frac{0,41 \cdot 3}{2} = \underline{\underline{0,61}} \text{ - dvs } 61\%$$

Uppgift 4

1998-01-16

Extern irreversibel reaktion i en icke-adiabatisk ideal tankreaktor.



Materialbalans m.a.p. A:

$$q C_{Af} - q C_{Af} (1-x) - r V_R = 0$$

$$q C_{Af} \cdot x = r V_R = k \cdot C_{Af} \cdot (1-x) \cdot V_R$$

$$x = k (1-x) \cdot \frac{V_R}{q} = k \tau (1-x)$$

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

$$x = \frac{k \tau}{1 + k \tau}$$

Värmebalans:

Standardtemp = inflödestemp. = T_f

Reaktionsvärme per tidsenhet:

$$\begin{aligned} Q_R(T) &= r V_R (-\Delta H) = k \cdot C_{Af} (1-x) V_R (-\Delta H) = q C_{Af} \cdot x (-\Delta H) = \\ &= q \cdot C_{Af} \cdot \frac{k \tau}{1 + k \tau} (-\Delta H) \quad \text{7/8} \end{aligned}$$

Bortfört värme per tidsenhet:

$$Q_f(T) = q \rho C_p (T - T_f) + U A (T - T_K) = (q \rho C_p + U A) T - q \rho C_p T_f - U A T_K$$

7/8

U = värmegenomgångskoefficient

A = värmeyta

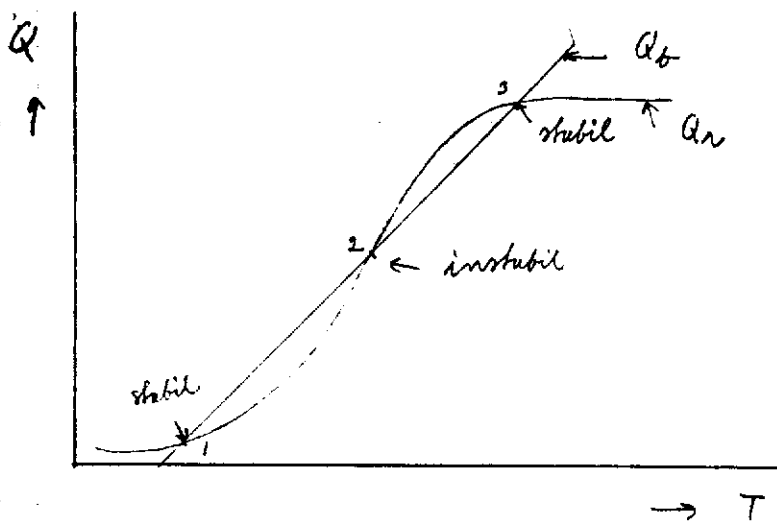
T_K = kylmediets temperatur (konstant)

$\Phi_{TmK} = T - T_K$ = logaritmisk medeltemperaturskillnad över värmeytan

Vid stationär drift:

$$Q_R(T) = Q_f(T)$$

4)



Stationära tillstånd 1 och 3 är stabila, dvs om det reglerade systemet utsätts för en störning (ex. liten ändring av temp) så återgår det till starttillståndet 1 eller 3. Tillståndet 2 är instabilt, systemet återgår ej efter en störning utan stannar i väg.

Villkor för stabil drift:

$$1. UA + q \cdot \rho \cdot C_p (2 + kT) > \left(\frac{\partial Q_r}{\partial T} \right)_c = \left(\frac{dQ_r}{dT} \right)_s \cdot \frac{1}{1-X} \quad (17.57)$$

$$2. UA + q \cdot \rho \cdot C_p > \left(\frac{\partial Q_r}{\partial T} \right)_c (1-X) = \left(\frac{dQ_r}{dT} \right)_s \quad (17.58)$$

index "s" anger stationär driftpunkt.

$$\frac{dQ_r}{dT_s} = \left(\frac{\partial Q_r}{\partial T_s} \right)_X + \left(\frac{\partial Q_r}{\partial X} \right)_T \left(\frac{dX}{dT_s} \right)$$

Villkor 2 nödvändigt för både adiabatiska och icke-adiabatiska reaktorer.

Villkor 1 tillkommer för icke-adiabatiska reaktorer.

E nklare stabilitetsvillkor (Tammregel):

$$\Delta T_c > \Delta T_{ov} \quad (17.70)$$

$$\Delta T_c = \frac{RT^2}{E} = \text{kritisk temperaturstegring.}$$

Tammregeln gäller under förutsättning att $UA \gg q \rho C_p$, dvs huvuddelen av det tillförda värmnet avlägsnas genom strömmen.

4) 1. Beräkning av driftpunkten.

$$Q_n(T) = q \cdot c_{Af}(-\Delta H) \cdot \frac{kT}{1+kT}$$

$$Q_n(T) = 10^{-2} \cdot 5 \cdot 10^3 \cdot 20 \cdot 10^3 \cdot \frac{kT}{1+kT} = 10^6 \frac{kT}{1+kT} \quad \text{J/s}$$

$$T = \frac{V_1}{q} = \frac{10}{10^2} = 10^3 \text{ s}$$

$$k = 10^{13} \exp(-12000/T) \text{ s}^{-1}$$

T K	$k \cdot 10^5$ s^{-1}	$\frac{kT}{1+kT}$	$Q_n(T) \cdot 10^{-5}$ J/s
290	1.07	0.011	0.11
300	4.25	0.041	0.41
310	15.44	0.134	1.34
320	51.76	0.341	3.41
330	161.24	0.617	6.17
340	469.85	0.825	8.25
350	1287.96	0.928	9.28

Tabellens värden ger kurvan $Q_n = f(T)$ (se diagram)

$$Q_f(T) = q \rho c_p (T - T_f) + UA(T - T_k)$$

$$Q_f(T) = 10^{-2} \cdot 850 \cdot 2200 (T - 310) + 9000 (T - 310) \quad \text{J/s}$$

$$Q_f(T) = 18.7 \cdot 10^3 (T - 310) + 9 \cdot 10^3 (T - 310) = 27.7 \cdot 10^3 (T - 310)$$

$$Q_f(T) = 27.7 \cdot 10^3 T - 85.87 \cdot 10^5$$

$$T = 310 \Rightarrow Q_f = 0$$

$$T = 345 \quad Q_f = 9.695 \cdot 10^5 \text{ J/s}$$

Den röda linjen $Q_f = f(T)$ läggs in i diagrammet
 Skärningen mellan linjen och kurvan ger driftpunkten
 Drifttemperatur: $T = 339 \text{ K}$

4)

$$Q_n = Q_f = 27.7 \cdot 10^3 \cdot 339 - 85.87 \cdot 10^5 = 8.03 \cdot 10^5 \text{ J/s}$$

$$x = \frac{Q_n}{q \cdot C_{Af} (-\Delta H)}$$

$$x = \frac{8.03 \cdot 10^5}{10^2 \cdot 5 \cdot 10^3 \cdot 20 \cdot 10^3} = \underline{\underline{0.803}}$$

2. Analys av driftpunktens stabilitet.

$$Q_n = q \cdot C_{Af} (-\Delta H) \cdot x$$

$$Q_u = k \cdot C_{Af} (1-x) V_2 (-\Delta H)$$

$$\left(\frac{dQ_n}{dT} \right)_s = q \cdot C_{Af} (-\Delta H) \frac{dx}{dT}$$

$$x = \frac{kT}{1+kT}$$

$$k = k_0 \cdot e^{-E/RT^2}; \quad \frac{dk}{dT} = k_0 \cdot \frac{E}{RT^2} \cdot e^{-E/RT} = k \cdot \frac{E}{RT^2}$$

$$\frac{dx}{dT} = \frac{T}{1+kT} \frac{dk}{dT} - \frac{kT}{(1+kT)^2} \cdot T \cdot \frac{dk}{dT}$$

$$\frac{dx}{dT} = \frac{E}{RT^2} \left(\frac{kT}{1+kT} - \frac{(kT)^2}{(1+kT)^2} \right) = \frac{E}{RT^2} x(1-x)$$

$$\left(\frac{dQ_n}{dT} \right)_s = q \cdot C_{Af} (-\Delta H) \cdot x(1-x) \cdot \frac{E}{RT^2} = Q_n \cdot (1-x) \cdot \frac{E}{RT^2}$$

$$\left(\frac{\partial Q_n}{\partial T} \right)_x = Q_n \cdot \frac{E}{RT^2} \quad \left(\frac{E}{R} = 12000 \right)$$

$$\left(\frac{dQ_n}{dT} \right)_s = \frac{8.03 \cdot 10^5 \cdot 12000 \cdot 0.197}{339^2} = 16.52 \cdot 10^3 \text{ J/sK}$$

$$\left(\frac{\partial Q_n}{\partial T} \right)_x = \frac{8.03 \cdot 10^5 \cdot 12000}{339^2} = 83.85 \cdot 10^3 \text{ J/sK}$$

Stabilitetsvillkor:

$$UA + q \rho C_p (2 + kT) > \left(\frac{\partial Q_n}{\partial T} \right)_x$$

$$k_{339} = 4.234 \cdot 10^{-3}$$

$$4) UA + \eta \rho C_p (2 + kT) = 9 \cdot 10^3 + 18.7 \cdot 10^3 (2 + 4.234 \cdot 10^{-3} \cdot 10^3) = 129.12 \cdot 10^3 \text{ J/}^\circ\text{K}$$

Stabilitetsvillkor 2:

$$UA + \eta \rho C_p > \left(\frac{dQ_c}{dT} \right)_s$$

$$UA + \eta \rho C_p = 27.7 \cdot 10^3 \text{ J/}^\circ\text{K}$$

Båda villkoren uppfyllda, driftpunkten stabil

Test av sumregel:

$$\Delta T_c > \Delta T_m$$

$$\Delta T_m = \frac{339 - 310}{T - T_K} = 29 \text{ K}$$

$$\Delta T_c = \frac{RT^2}{E} = \frac{339^2}{12000} = 9.6 \text{ K}$$

Villkoret ej uppfyllt. Bevis på att sumregelns förutsätter

$$UA \gg \eta \rho C_p$$

$$(UA = 9 \cdot 10^3 \text{ J/}^\circ\text{K}, \quad \eta \rho C_p = 18.7 \cdot 10^3 \text{ J/}^\circ\text{K})$$

Uppg. 5 1998-01-16

Eftersom $\Delta t_1 = \Delta t_2 = \dots = \Delta t_n = \Delta t$
och $c_1 = c_n = 0$ - gäller

$$\langle t \rangle = \frac{\sum t c}{\sum c}$$

$$\sigma_t^2 = \left(\frac{\sum t^2 c}{\sum c} \right) - \langle t \rangle^2$$

t	t^2	c	tc	t^2c
0	0	0	0	0
10	100	1,63	16,3	163
20	400	3,96	79,2	1584
30	900	3,00	90,0	2700
40	1600	1,39	55,6	2224
50	2500	0,51	25,5	1275
60	3600	0,10	6,0	360
70	4900	0	0	0
Σ		10,59	272,6	8306

$$\langle t \rangle = \frac{272,6}{10,59} = 25,74 \text{ min}$$

$$\sigma_t^2 = \frac{8306}{10,59} - (25,74)^2 = 121,8$$

$$N = \frac{\langle t \rangle^2}{\sigma_t^2} = \frac{662,5}{121,8} = \underline{\underline{5,44 \text{ } \Delta t}}$$

Uppgift 1 (optimering, ideal tankreaktor)

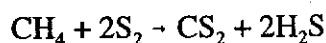
6 poäng

Adrian Emilsson (utexaminerad från CTH 1984), som är teknisk chef för AB KRT ställs ofta inför besvärliga processtekniska problem (jfr rapporter i tidigare tentamina). Företaget tillverkar en farmaceutisk produkt B (sekretesskäl gör att vi får införa fiktiva benämningar) ur utgångsföreningen A. Reaktionen kan skrivas $A \rightarrow B$ och utföres i vätskefas. Man vet att reaktionshastigheten kan skrivas $r = k c_A c_B$, dvs processen är autokatalytisk. Emilsson har tänkt sig att utföra processen kontinuerligt i två seriekopplade tankreaktorer, försedda med mycket effektiva omrörare. Inflödet till reaktorläggningen består av en lösning, som enbart innehåller föreningen A. Reaktionen skall drivas till en omsättningsgrad av 90% och temperaturen skall vara densamma i bägge reaktorerna. På grund av det ansträngda konjunkturläget vill man att reaktorvolymerna skall väljas så att den totala reaktorvolymen blir så liten som möjligt. Reaktoroptimering är inte Emilssons starka sida, vilket han är väl medveten om. Han vänder sig därför till en nyanställd ingenjör vid företaget. Vilket inbördes optimalt volymförhållande mellan reaktorerna bör väljas och vilken blir omsättningsgraden i de olika reaktorerna? Stationär drift anses råda och reaktorerna kan betraktas som ideala tankreaktorer.

Uppgift 2 (ideal tubreaktor)

6 poäng

Den homogena reaktionen mellan svavelånga (S_2) och metan (CH_4) har studerats vid trycket 1 bar i en ideal tubreaktor av kvarts med volymen 25 cm^3 . Reaktorns diameter är så liten att omblandningen i axiell led kan försummas. Reaktionen mellan metan och svavel kan skrivas



Vid 600°C är reaktionen ett förlopp av andra ordningen och reaktionshastigheten kan skrivas $r = k_p p_{CH_4} p_{S_2}$. Vid en viss försöksserie som varade 10 min bildades totalt 0,1 g koldisulfid (CS_2). Strömningshastigheten i ingående flöde i detta experiment är 0,2 mol S_2/h och 0,1 mol CH_4/h . Halten koldisulfid (CS_2) och svavelväte (H_2S) kan försummas i ingående flöde. Uppvärmningen av inflödet sker momentant till 600°C , likaså sker avkylningen av utflödet momentant. Beräkna hastighetskonstanten k_p i enheten $\text{mol}/(\text{cm}^3 \text{ bar}^2 \text{ h})$ vid 600°C med ledning av ovanstående data. Molvikten för metan är 16 kg/kmol och för koldisulfid 76 kg/kmol .

Uppgift 3 (optimering, adiabatisk jämviktsprocess)

7 poäng

Den reversibla vätskefasreaktionen $A \rightleftharpoons R$ skall genomföras kontinuerligt i två seriekopplade ideala adiabatiska tankreaktorer försedda med mellankylare. Inflödet till den första reaktorn innehåller enbart A och temperaturen i inflödet är 298 K . Omsättningsgraden i utflödet från den andra reaktorn är $(x_A)_2 = 0,8$.

Beräkna de driftsförhållande som minimerar den totala reaktorvolymen. I uppgiften ingår att beräkna: Omsättningsgraden i den första reaktorn samt temperaturerna i reaktorerna. Uppgiften förutsättes lösas med hjälp av bifogat diagram och nedanstående uppgifter.

forts.

Uppgift 3, forts.

Data

$$k_f = \exp(17,2 - 11600/RT) \text{ min}^{-1}$$

$$k_b = \exp(41,9 - 29600/RT) \text{ min}^{-1}$$

Energienheten i aktiveringsenergin är calorier, dvs $R = 1,987 \text{ cal}/(\text{mol K})$.

Reaktionsentalpin, $-\Delta H = 18000 \text{ kcal}/\text{kmol}$ (oberoende av temperaturen).

Flödets densitet, $\rho = 1000 \text{ kg}/\text{m}^3$ (oberoende av temperatur och sammansättning).

Flödets specifika värme, $c_p = 0,238 \text{ kcal}/(\text{kg K})$ (oberoende av temperatur och sammansättning).

Inflödets sammansättning är $c_{Af} = 1 \text{ kmol}/\text{m}^3$ och $c_{Rf} = 0$.

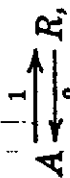
Övriga data framgår av diagrammet (sid 3). I detta är enheten för hastigheten $\text{kmol}/(\text{m}^3 \text{ min})$.

För att minska omfattningen av den numeriska behandlingen har i tabellen på omstående sida sammanställts sammanhörande värden för den adiabatiska reaktionen i den första reaktorn. Enheterna i tabellhuvudet har utelämnats för att spara utrymme. Enheterna är samstämmiga med dem som förekommer i övrigt i texten.

x	T	1/(RT ²)	k _f	k _b	r	1/r	r ²	k _f E _f	k _b E _b
0,50	336	4,46·10 ⁻⁶	0,84	0,088	0,376	2,66	0,141	9744	2605
0,55	340	4,35·10 ⁻⁶	1,03	0,15	0,382	2,62	0,146	11832	4144
0,60	343	4,25·10 ⁻⁶	1,26	0,25	0,356	2,81	0,127	14268	6808
0,65	347	4,16·10 ⁻⁶	1,52	0,40	0,272	3,67	0,074	17168	11248
0,70	351	4,08·10 ⁻⁶	1,76	0,58	0,122	8,21	0,015	20416	17168

Figur 1

Reversible first order:

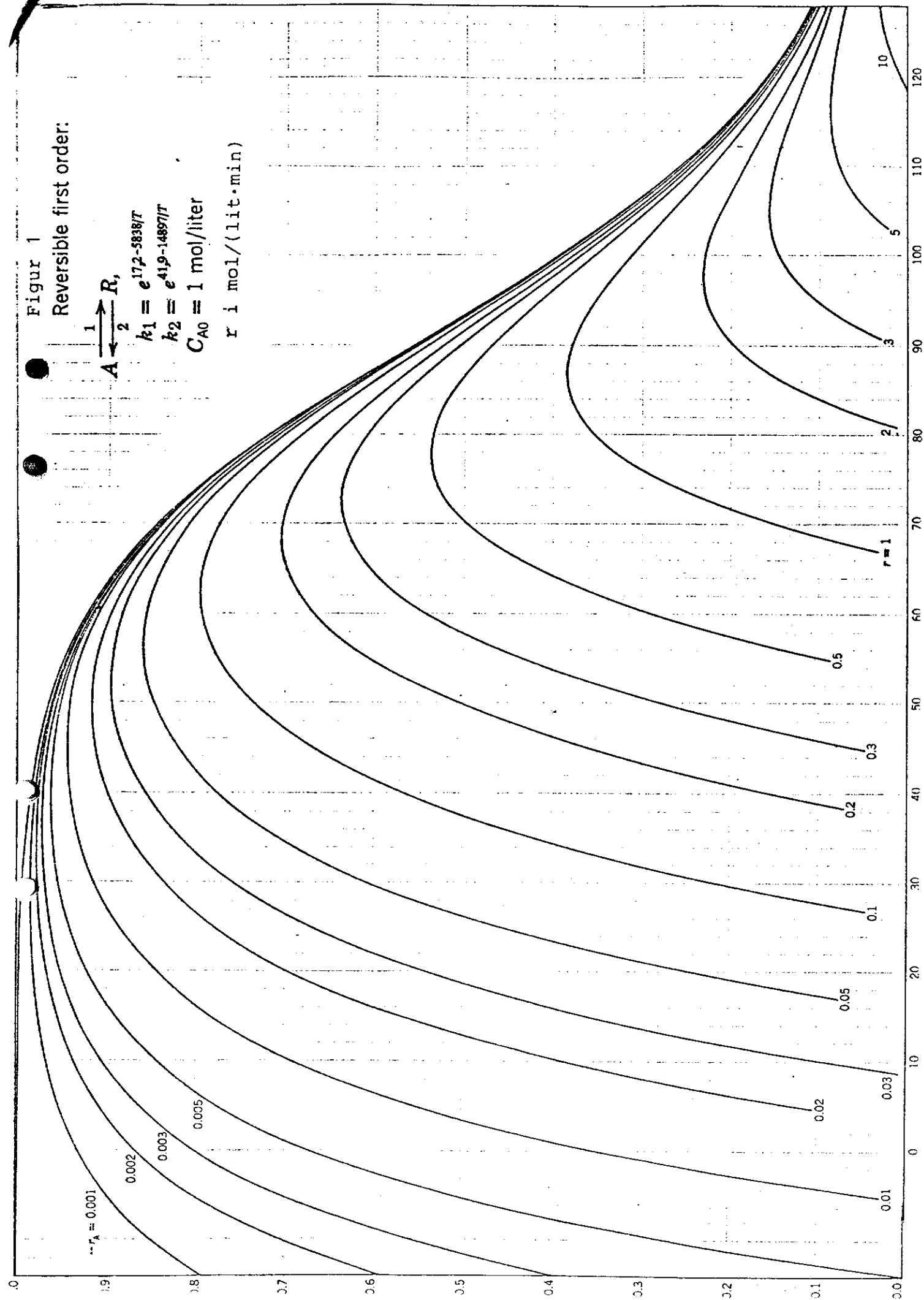


$$k_1 = e^{172-5838/T}$$

$$k_2 = e^{419-14897/T}$$

$$C_{A0} = 1 \text{ mol/liter}$$

$$r \text{ i mol/(lit}\cdot\text{min)}$$



Uppgift 4 (uppehållstidsfördelning)

5 poäng

Ett steg-svarsförsök med en kontinuerligt arbetande reaktor utfört enligt principen "sluten mätsträcka" spårämneskoncentrationen i utflödet som funktion av tiden enligt tabellen nedan. Tiden $t=0$ motsvarar tidpunkten för stegändringen i inflödet. Beräkna ur dessa data uppehållstidsfördelningens medelvärde varians samt avgör i vad mån tankseriemodellen och dispersionsmodellen är användbara beräkningsmodeller för denna reaktor.

forts.

Uppgift 4, forts.**Resultat av steg-svarsförsök**

t/min	$c_s/\mu\text{mol m}^3$
1	0,002
3	0,011
5	0,016
10	0,022
15	0,031
20	0,038
25	0,040
30	0,041

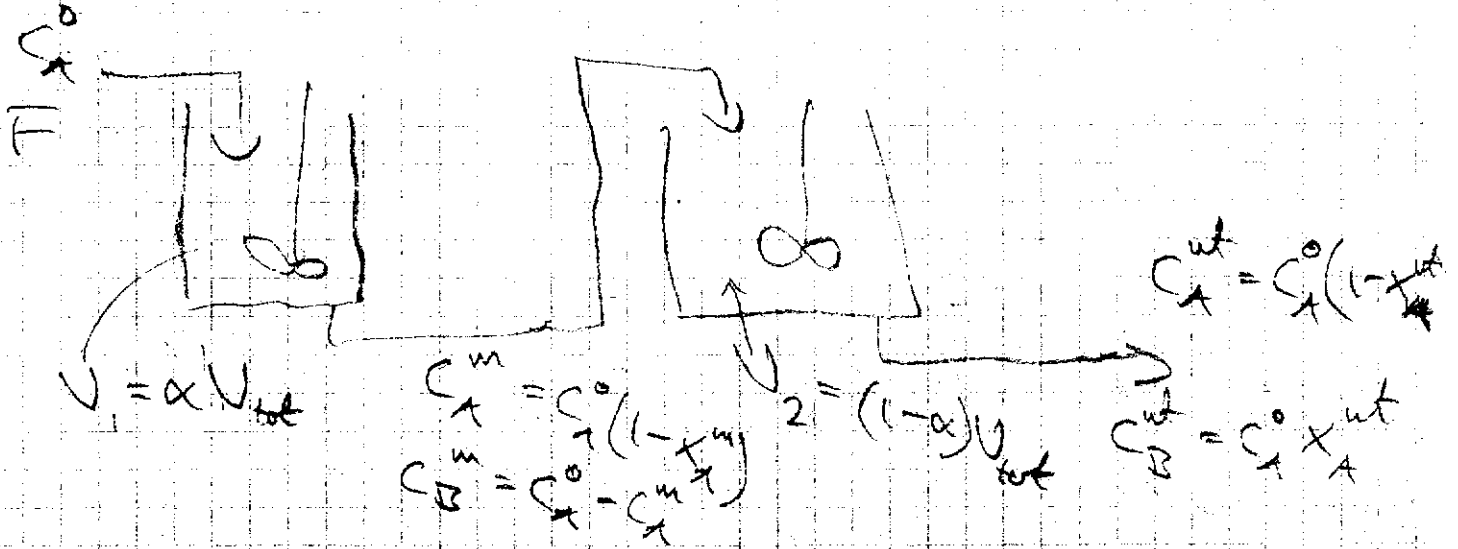
Uppgift 5 (beskrivande)

6 poäng

- Angiv minst fyra olika situationer då en recirkulation av reaktorutflödet (efter eventuell separation) till reaktorns inflöde är befogad.
- Vad är fasplananalys och på vilket sätt ger en sådan information om en process' stabilitet?
- Beskriv hysteresisfenomenet vid tändning och släckning av en ideal tankreaktor som arbetar under adiabatiska betingelser, då koncentrationen av reaktanten i inflödet tillåts variera.

① 97-09-06

$$r = k C_A C_B$$



Reaktor 1 MB map A

$$F C_A^0 - F C_A^m - r V_1 = 0$$

$$F (C_A^0 - C_A^m) = k C_A^m C_B^m V_1$$

$$C_B^m = C_A^0 - C_A^m$$

$$F = k C_A^0 (1 - x_A^m) \alpha V_{tot} \quad (1)$$

Reaktor 2 MB map A

$$F C_A^m - F C_A^ut - k C_A^ut C_B^ut V_2 = 0$$

$$F \cancel{C_A^0} (x_A^m - x_A^ut) = k \cancel{C_A^0} (1 - x_A^ut) C_A^0 x_A^ut V_2$$

$$F (x_A^ut - x_A^m) = k C_A^0 (1 - x_A^ut) x_A^ut (1-\alpha) V_{tot} \quad (2)$$

Eliminera V_{tot} genom att dela (2) med (1)

$$x_A^ut - x_A^m = \frac{k C_A^0 (1 - x_A^ut) x_A^ut (1-\alpha) V_{tot}}{k C_A^0 (1 - x_A^m) \alpha V_{tot}}$$

ist ut & som funktion av x_A

$$\frac{(x_A^{ut} - x_A^m)(1 - x_A^m)}{(1 - x_A^{ut})x_A^{ut}} = \frac{1 - \alpha}{\alpha} = \frac{1}{\alpha} - 1$$

$$\frac{1}{\alpha} = 1 + \frac{(x_A^{ut} - x_A^m)(1 - x_A^m)}{(1 - x_A^{ut})x_A^{ut}} \quad (3)$$

• Lös ut V_{tot} från (1)

$$V_{tot} = \frac{F}{k_{cc}^0 (1 - x_A^m) \alpha} = \left\{ \text{sätt in (3)} \right\}$$

$$= \frac{F}{k_{cc}^0} \left[\frac{1}{1 - x_A^m} + \frac{(x_A^{ut} - x_A^m)(1 - x_A^m)}{(1 - x_A^{ut})x_A^{ut}(1 - x_A^m)} \right]$$

• Sök minsta ^{totala} reaktorvolymer \Rightarrow minimera

• V_{tot} m.a.p x_A^m

$$\frac{dV_{tot}}{dx_A^m} = \frac{F}{k_{cc}^0} \left[\frac{1}{(1 - x_A^m)^2} - \frac{1}{(1 - x_A^{ut})x_A^{ut}} \right] = 0$$

$$\Rightarrow (1 - x_A^m)^2 = (1 - x_A^{ut})x_A^{ut}$$

$$x_A^m = 1 - \sqrt{(1 - x_A^{ut})x_A^{ut}} = 1 - \sqrt{(1 - 0,9) \cdot 0,9}$$

$$\underline{x_A^m = 0,7}$$

Är detta optimum verkligen ett min

$$\frac{d^2 V_{tot}}{d(x_A^m)^2} \sim \frac{1}{(1-x_A^m)^3} > 0 \text{ för } x_A^m = 0,7$$

∴ minimum

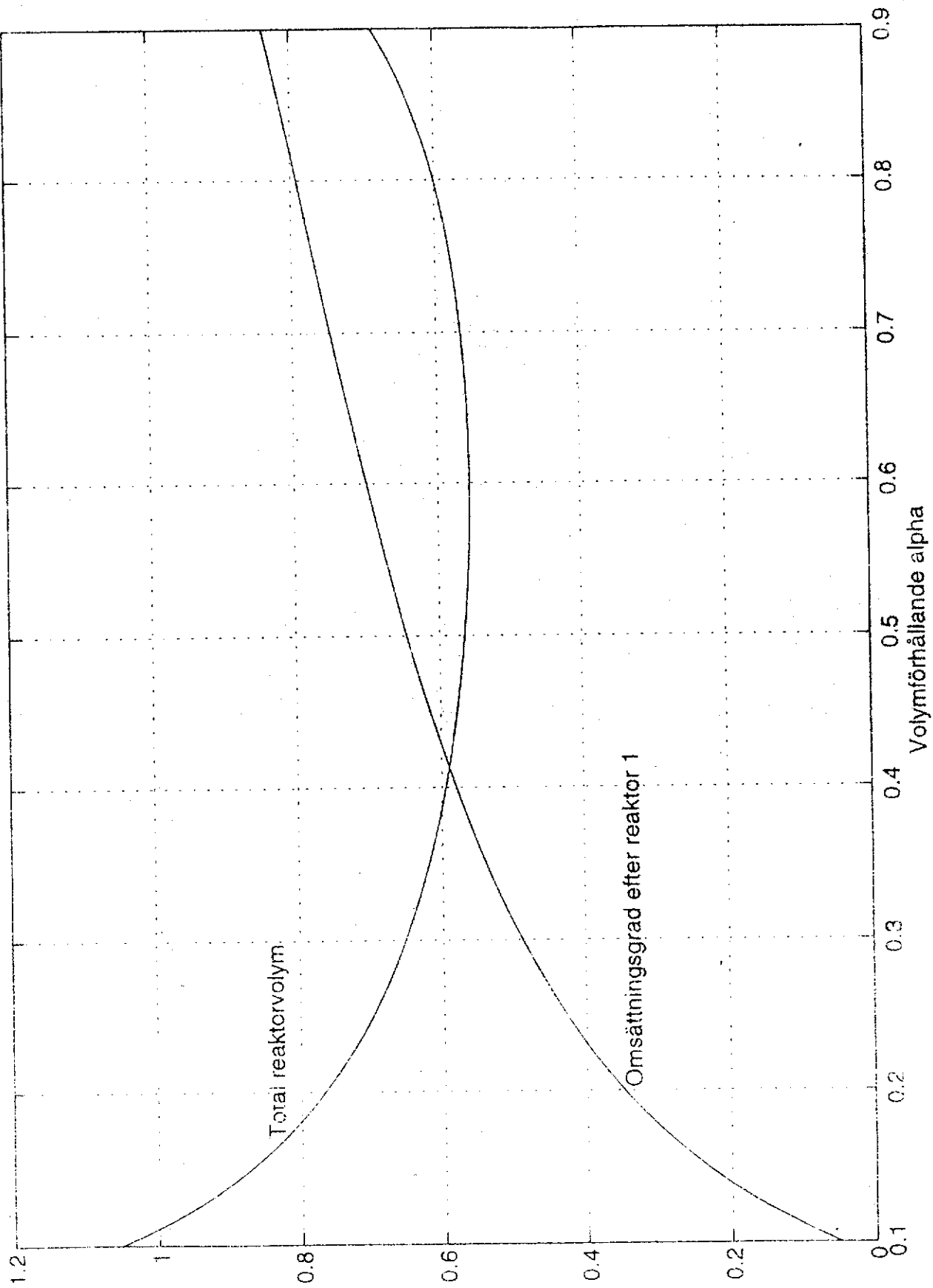
□ Sök volymförh. α för detta x_A^m
Använd elev. (3)

$$\frac{1}{\alpha} = 1 + \frac{(0,9 - 0,7)(1 - 0,7)}{(1 - 0,9) \cdot 0,9} = \frac{5}{3}$$

$$\alpha = \frac{3}{5} = \underline{\underline{0,6}}$$

Svar: Volymförhållandet bör vara
reaktor 1 : 60% av totala volymer
" 2 : 40% " " "
Omsättningsgraden i reaktor 1 är 70%
" " " 2 : 90%.

Uppgift 1. 1997-09-06



1997-09-06

Reaktionshastigheten kan skrivas

①

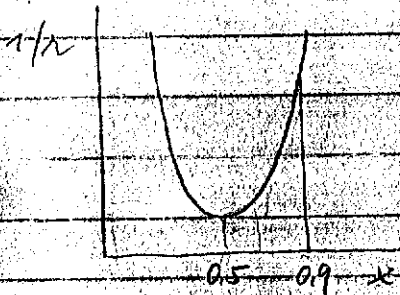
$$r = k c_0^2 (1-x)x$$

Derivera r med x

$$\frac{dr}{dx} = k c_0^2 [(1-x) + x(-1)]$$

$$\frac{dr}{dx} = 0 \text{ för } x = 0.5 \text{ dvs}$$

1/2 går genom ett minimum för $x = 0.5$



Det kan vara lätt att föledas att tro att den första reaktorn skall dimensioneras så att omsättningsgraden blir $x = 0.5$ för denna reaktor. Detta är fel, det rätta värdet erhålles genom följande beräkning:

$$q c_0 - q c_0 (1-x) = k c_0^2 (1-x)x V_1 = 0 \quad (1)$$

$$q c_0 (1-x) = q c_0 (1-0.9) = k c_0^2 (1-0.9) 0.9 V_2 = 0 \quad (2)$$

Forts

(Vant!)

ur (1) erhalls:

$$q \cos x = k c_0^2 (1-x) x V_1$$

$$\frac{V_1 k c_0}{q} = \frac{x}{(1-x)x} = \frac{1}{1-x}$$

ur (2) erhalls:

$$\frac{0,9-x}{0,09} = \frac{V_2 k c_0}{q}$$

$$\sum \frac{V k c_0}{q} = \frac{1}{1-x} + \frac{0,9-x}{0,09}$$

$$\frac{d\Sigma}{dx} = \frac{1}{(1-x)^2} - \frac{1}{0,09}$$

$$\frac{d\Sigma}{dx} = 0 \quad \text{fur}$$

$$(1-x)^2 = 0,09$$

$$1-x = \pm 0,3 \quad (- \text{ger } x = 1,3)$$

$$x = 0,7$$

$$\frac{V_1 k c_0}{q} = \frac{1}{0,3} = 3,33$$

$$\frac{V_2 k c_0}{q} = \frac{0,2}{0,09} = 2,22$$

$$\text{d.h. } V_1/V_2 = \frac{3,33}{2,22} = \underline{\underline{1,5:1}}$$

(Vaus!)

Med $x = 0,5$ hade erhållits

$$V_1/V_2 = 2/4.44 = 0,45$$

För $x = 0,7$ erhålles $\sum \frac{V_n}{q} k_{co} = 5,55$

För $x = 0,5$ erhålles $\sum \frac{V_n}{q} k_{co} = 6,44$

②

1997-09-06



$$r = k_p \cdot p_{\text{CH}_4} \cdot p_{\text{S}_2}$$

MB map CH_4 over dV_r (mol/s):

$$F_j^\circ \cdot dx_j = -v_j \cdot r \cdot dV_r$$

$$\frac{V_r}{F_{\text{CH}_4}^\circ} = \frac{1}{k_p} \int_0^{x_{\text{CH}_4}} \frac{dx_{\text{CH}_4}}{p_{\text{CH}_4} \cdot p_{\text{S}_2}} \quad (1)$$

$$F_{\text{CH}_4} = F_{\text{CH}_4}^\circ \cdot (1 - x_{\text{CH}_4}) = 0,1(1 - x) \quad \frac{\text{mol}}{\text{h}}$$

$$F_{\text{S}_2} = F_{\text{S}_2}^\circ - 2 \cdot F_{\text{CH}_4}^\circ \cdot x_{\text{CH}_4} = 0,2(1 - x) \quad \text{---}$$

$$F_{\text{CS}_2} = F_{\text{CH}_4}^\circ \cdot x_{\text{CH}_4} = 0,1 \cdot x \quad \text{---}$$

$$F_{\text{H}_2\text{S}} = 2 \cdot F_{\text{CH}_4}^\circ \cdot x_{\text{CH}_4} = 0,2 \cdot x \quad \text{---}$$

$$F_{\text{tot}} = 0,3 \quad \text{mol/h}$$

$$p_{\text{CH}_4} = y_{\text{CH}_4} \cdot p = \frac{0,1(1-x)}{0,3} \cdot p$$

$$p_{\text{S}_2} = \frac{0,2(1-x)}{0,3} \cdot p$$

$$(1) \Rightarrow \frac{V_r}{F_{CH_4}^0} = \frac{4,5}{K_p} \int_0^{x_{CH_4}^{ut}} \frac{dx}{(1-x)^2} \quad (2)$$

under 10 min bildas 0,1 gr. CS_2

$$\Rightarrow F_{CH_4}^0 \cdot x_{CH_4}^{ut} = F_{CS_2}^{ut}$$

$$0,1 \cdot x_{CH_4}^{ut} = \frac{0,1 \cdot 6}{76} \frac{\text{mol } CS_2}{h}$$

$$\Rightarrow x_{CH_4}^{ut} = 0,0789$$

$$(2) \Rightarrow K_p \approx 1,54 \cdot 10^{-3} \left[\frac{\text{mol}}{\text{bar}^2 \cdot \text{cm}^3 \cdot h} \right]$$

1997-09-06

(1)

③

$$\tau_1 = \frac{x_1}{r(x_1, T)} \quad , \quad \tau_2 = \frac{x_2 - x_1}{r(x_2, T)}$$

$$x_2 = 0,80 \text{ och konstant}$$

$$\text{Sålunda } r(x_2, T) = r(x_2, T_{\text{opt}}) = r_m(x_2)$$

Enligt diagrammet erhålles $r_m(0,80) = 0,1 \text{ kmol/m}^3 \text{ min}$
 $(T_{\text{opt}})_2 = 335 \text{ K} \rightarrow 62^\circ \text{C}$

$$\Sigma \tau = \frac{x_1}{r(x_1, T)} + \frac{0,8 - x_1}{r_m(0,8)}$$

Min($\Sigma \tau$) erhålles för

$$\frac{\partial(\Sigma \tau)}{\partial x_1} = \frac{1}{r(x_1, T)} - \frac{x_1}{r^2(x_1, T)} \frac{dr(x_1, T)}{dx_1} - \frac{1}{r_m(0,8)} = 0$$

där $r_a(x_1, T)$ betecknar att r avser en adiabatisk process så att x_1 beror av T via en värmebalans

$$\frac{dr(x_1, T)}{dx_1} = \frac{\partial r(x_1, T)}{\partial x_1} + \frac{\partial r(x_1, T)}{\partial T} \frac{dT}{dx_1}$$

$$r = k_f(1-x) - k_b x$$

$$\left[\frac{\partial r(x_1, T)}{\partial x_1} \right]_T = -(k_f + k_b)$$

$$\left(\frac{\partial r}{\partial T} \right)_{x_1} = \frac{1}{RT^2} [(1-x_1) k_f E_f - x_1 k_b E_b]$$

3) Värmebalans

$$C_p \rho (T - T_f)'' = 1 \cdot x (-\Delta H)$$

$$\frac{\text{kcal}}{\text{kg K}} \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \text{K} = \frac{\text{kmol}}{\text{m}^3} \frac{\text{kcal}}{\text{kmol}}$$

$$\frac{\text{kcal}}{\text{m}^3} = \frac{\text{kcal}}{\text{m}^3}$$

$$0,238 \cdot 1000 (T - T_f) = x_1 \cdot 18000$$

$$T = T_f + \frac{18 x_1}{0,238}$$

$$\frac{dT}{dx_1} = \frac{18}{0,238}$$

$$\frac{\partial (ZT)}{\partial x_1} = 0 \quad \text{ger}$$

$$x_1 = \frac{\frac{1}{r(x_1, T)} - \frac{1}{r_m(0,8)}}{\frac{da r(x_1, T)}{dx_1}} \cdot r^2(x_1, T)$$

$$r_1 = \frac{\frac{1}{r(x_1, T)} - 0,1}{\left\{ -(k_f + k_b) + \frac{1}{RT^2} [(1-x_1)k_f E_f - x_1 k_b E_b] \right\} \frac{18}{0,238}} r^2(x_1, T)$$

Löses genom passningsräkning (se hjälp tabell i tal-texten)

$x_1 = 0,6$ ger löysra ledet

$$HL = \frac{2,83 - 10}{-(1,23 + 0,23) + 4,25 \cdot 10^6 (0,4 \cdot 14268 - 0,6 \cdot 6808) \frac{18}{0,238}} \cdot 0,125$$

$HL = 0,95$

$x_1 = 0,65$

$$HL = \frac{3,62 - 10}{-1,86 + 4,16 \cdot 10^6 (0,35 \cdot 17168 - 0,65 \cdot 11248) \frac{18}{0,238}} \cdot 0,076$$

$HL = 0,21$

Linjär interpolation ger $x_1 = 0,62$

T_1 erhålles ur värmebalansen

$$T_1 = 298 + \frac{18 \cdot 0,62}{0,238} = 345K \Rightarrow 72^\circ C$$

Uppgift 4

Sökes:

$$\langle t \rangle = \int_0^1 t dF$$

$$\sigma_t^2 = \int_0^1 t^2 dF - \langle t \rangle^2$$

$$N_c = \langle t \rangle^2 / \sigma_t^2$$

D/uL nr

$$\sigma_t^2 / \langle t \rangle^2 = 2(D/uL) - 2(D/uL)^2 (1 - e^{-uL/D})$$

Trapetsformeln ger

$$\langle t \rangle = (t_0 + t_1) \frac{\Delta F_1}{2} + (t_1 + t_2) \frac{\Delta F_2}{2} + \dots + (t_{N-1} + t_N) \frac{\Delta F_N}{2}$$

$$\sigma_t^2 + \langle t \rangle^2 = (t_0^2 + t_1^2) \frac{\Delta F_1}{2} + (t_1^2 + t_2^2) \frac{\Delta F_2}{2} + \dots + (t_{N-1}^2 + t_N^2) \frac{\Delta F_N}{2}$$

t_n	$F \times 0,041$	$\Delta F_n \times 0,041$
1	0,002	
3	0,011	0,009
5	0,016	0,005
10	0,022	0,006
15	0,031	0,009
20	0,038	0,007
25	0,040	0,002
30	0,041	0,001

Forts nästa sid.

Förts på uppgift 4

$$\langle t \rangle = \frac{10^{-3}}{2 \times 0,041} [4 \times 9 + 8 \times 5 + 15 \times 6 + 25 \times 9 + 35 \times 7 + 45 \times 2 + 55 \times 1]$$

$$\langle t \rangle = \frac{10^{-3}}{2 \times 0,041} \times 781 = 9,52 \text{ (min)}$$

$$\sigma_t^2 + \langle t \rangle^2 = \frac{10^{-3}}{2 \times 0,041} [10 \times 9 + 34 \times 5 + 125 \times 6 + 325 \times 9 + 625 \times 7 + 1025 \times 2 + 1525 \times 1]$$

$$\sigma_t^2 + \langle t \rangle^2 = \frac{10^{-3}}{2 \times 0,041} \times 11885 = 144,94$$

$$\sigma_t^2 = 144,94 - 90,63 = 54,31$$

$$N = \frac{90,63}{54,31} = 1,67$$

$$\text{ekv: } \frac{54,31}{90,63} = 2x - 2x^2 (1 - e^{-\frac{1}{x}}), \quad x = D/\mu L$$

$$x = D/\mu L$$

$$\text{Ekv } 2x - 2x^2 = \frac{54,31}{90,63}$$

ger ej reella rötter
men den ursprungliga ekv. ger
efter prövning

$$D/\mu L = 0,56$$

TENTAMEN I KEMISK REAKTIONSTEKNIK

lördagen den 24 maj 1997 kl 14:15 - 19:15

Ansvarig lärare: Said Irandoust 031-772 3023 / 031-40 65 35 / 070-753 5023

Said Irandoust kommer att besöka tentamenslokalen mellan kl 15:30 och 16:00

Granskning av tentamensrättningen kan ske tidigast den 6/6-1997

Tillåtna hjälpmedel:

Valfri räknare

Formelsamling utgiven av institutionen

TEFYMA

Standard Mathematics Handbook

Beta Mathematics Handbook

Physics Handbook

Handbook of Chemistry and Physics

Ej tillåtna hjälpmedel:

Kompendium i KRT och KRT övning

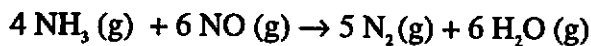
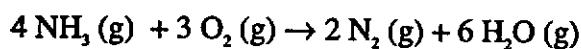
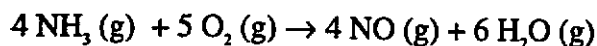
Lösta exempel

Lycka till!

Uppgift 1 (materialbalans)

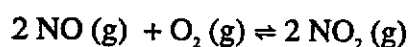
6 poäng

Salpetersyra tillverkas genom katalytisk oxidation av ammoniak vid 850 °C. De huvudsakliga reaktionerna är



I denna reaktor sker en fullständig omsättning m a p ammoniak. Dessutom gäller i reaktorutflödet att 5% av tillförd ammoniak har gett N₂.

Reaktionsgaserna kyles i ett senare steg varvid följande jämvikt inställer sig (ingen gas kondenserar vid kylningen)



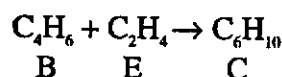
med jämviktskonstanten $K_p = 10^3 \text{ bar}^{-1}$.

NO₂ löses sedan i vatten och ger HNO₃. Beräkna hur många mol luft / mol NH₃ som måste tillföras i det färska inflödet för att 90% av tillförd NH₃ skall ge NO₂. Trycket i alla delar av anläggningen är 10 bar. Alla procentangivelser är mol-%.

Uppgift 2 (ideal tubreaktor)

6 poäng

Butadien (B) reagerar i gasfas med eten (E) och ger cyklohexen (C) enligt



$$r = k(T) c_B c_E$$

Reaktionen sker i en adiabatisk tubreaktor. Inflödet består av en ekvimolekylär blandning av butadien och eten vid 450 °C och 1 atm. Reaktionen är av första ordningen m a p både butadien och eten.

Beräkna den reaktorvolym som krävs för att åstadkomma 10% omsättning m a p butadien då inflödet av butadien är 5 mol/s.

För reaktionen gäller följande data:

$$k = 10^{4.5} e^{-110,000/(RT)} \text{ m}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$$

$$\Delta H = -120 \text{ kJ mol}^{-1} \text{ vid } 450 \text{ °C}$$

$$c_{pB} = 154 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$$

$$c_{pE} = 84,4 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$$

$$c_{pC} = 249 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$$

Molvärmena antages vara konstanta.

Uppgift 3 (reaktorstabilitet)

6 poäng

Hastighetsekvationen för hydrering av omättade kolväten vid ett överskott av väte och i närvaro av en fast katalysator kan skrivas

$$r = k c / (1 + K c)^2 \quad \text{mol} / (\text{s m}^3 \text{ katalysator})$$

där c är koncentrationen av det omättade kolvätet.

Vid en hydrering, som utfördes i en fluidiserad bädd vilken i föreliggande fall kan uppfattas som en ideal isoterm tankreaktor, gäller följande betingelser:

$$q / (k V_{\text{km}}) = 0,019 \text{ (dimensionslös)}$$

q = volymflödes hastighet

V_{km} = volym av katalysator

$$K = 0,2832 \text{ m}^3/\text{mol}$$

Koncentrationen av omättat kolväte i inflödet är $c_i = 46,6 \text{ mol/m}^3$. Beräkna vid vilken omsättningsgrad m a p kolvätet som man erhåller en instabil driftspunkt.

Uppgift 4 (uppehållstidsfördelning, icke-ideal reaktor)

5 poäng

Uppehållstidens fördelningen studeras i en kontinuerligt arbetande reaktor. Spårämnet tillförs till inflödet som en mycket kort och ideal puls, varefter spårämnets fördelning mäts i reaktorns utflöde. Tiden noll vid dessa mätningar avser tidpunkten för spårämnets injicering. Följande sammanhörande värden mellan tid och spårämneskoncentration i utflödet erhöles:

<u>tid/min</u>	<u>spårämneskonc./ (mg/l)</u>
0	0
1	0
3	0
5	10
7	10
9	10
11	10
13	0
15	0

Beräkna hur många seriekopplade ideala och lika stora tankreaktorer som denna strömningsbild motsvarar. Vad blir omsättningsgraden för reaktanten A ($A \rightarrow R$, $r = k c_A$, där $k = 0,1 \text{ min}^{-1}$) över denna reaktor?

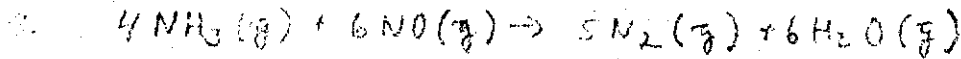
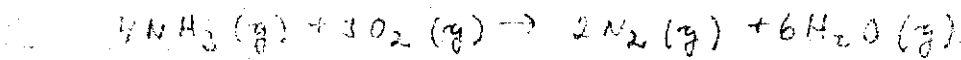
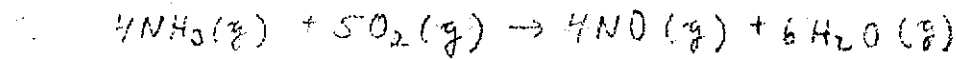
Uppgift 5 (beskrivande)**7 poäng**

- a) Vilken fysikalisk grund har segregationsmodellen? Beskriv hur denna modell används.
- b) Vad är det för skillnad mellan öppen och sluten mätsträcka vid användning av dispersionsmodellen och vad får den skillnaden för konsekvens vid formuleringen av de ekvationer som beskriver en icke-ideal tubreaktor?
- c) Förklara varför reaktionshastigheten för en exoterm adiabatisk jämviktsprocess går genom ett maximum med ökande omsättningsgrad.
- d) Utgående från reaktanten A fås den önskade produkten B och biprodukten C. Beskriv ett experimentellt sätt för att kunna avgöra om reaktionsmekanismen är parallell ($A \rightarrow B$ och $A \rightarrow C$) eller konsekutiv ($A \rightarrow B \rightarrow C$).
-

①

97-05-24

reaktioner i reaktor:



Jämviktsreaktion i kylare:



$K_p = \frac{P_{NO_2}^2}{P_{NO}^2 \cdot P_{O_2}} = 10^3 \text{ bar}^{-1}$

Bötkretsen: 11 mol NH₃ och 4 g mist luft per kvadrant i färskva
inflöde

$F_{NH_3} = 4$

$F_{luft} = 4 \text{ g}$

$F_{O_2} = 0.21 \cdot 4 \text{ g} = 0.84 \text{ g}$

$F_{N_2} = 0.79 \cdot 4 \text{ g} = 3.16 \text{ g}$

Moleflödesbalansigheter i reaktantflödet:

$F_{NH_3} = 0 = 4 - 4R_1 - 4R_2 - 4R_3$ (1)

$F_{O_2} = 0.84 \text{ g} = 5R_1 - 3R_2$ (2)

$F_{N_2} = 3.16 \text{ g} = 2R_2 + 5R_3$ (3)

$F_{NO} = 4R_1 - 6R_3$ (4)

$F_{H_2O} = 6(R_1 + R_2 + R_3)$ (5)

för (1) ges $R_1 + R_2 + R_3 = 1$

för (5) ges $F_{H_2O} = 6$

5% av tillförd NH₃ ges N₂

$0.05 \cdot 4 = 2R_2 + 5R_3$

$0.1 = 2R_2 + 5R_3$

$$(2) \text{ ges } F_{N_2} = 3.16 y + 0.1$$

15% av tillförd NH_3 ger NO

$$F_{NO} = \frac{0.15 \cdot y}{3.8} = 4 R_1 - 6 R_3 \quad \text{enligt ekv (4)}$$

$$R_1 = 0.95 + 1.5 R_3 \quad (7)$$

av (6) och (7) ins. i ekv (2).

$$F_{O_2} = 0.84 y - 5 (0.95 + 1.5 R_3) - 3 (0.05 - 2.5 R_3) = 0.84 y - 4.90$$

Höftledets hastigheter efter tryck vid jämvikt:

90% av tillförd NH_3 ger NO_2 .

$$F_{NO_2} = 0.9 \cdot y = 3.6$$

$$F_{NO} = 3.8 - 3.6 = 0.2$$

$$F_{O_2} = 0.84 y - 4.90 - \frac{3.6}{2} = 0.84 y - 6.70$$

$$F_{N_2} = 3.16 y + 0.1$$

$$F_{H_2O} = 6$$

$$F_{tot} = 4.0 y + 3.2$$

$$P_i = \frac{F_i}{F_{tot}} \cdot P$$

$$K_P = \frac{F_{NO_2}^2}{F_{NO}^2} \cdot \frac{F_{tot}}{F_{O_2}} \cdot \frac{1}{P}$$

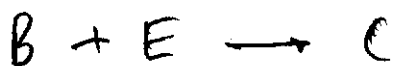
$$10^3 = \frac{3.6^2}{0.2^2} \cdot \frac{4y + 3.2}{0.84y - 6.70} \cdot \frac{1}{10}$$

$$\frac{y + 0.8}{0.84y - 6.70} = \frac{10^4}{182.4} = 7.72$$

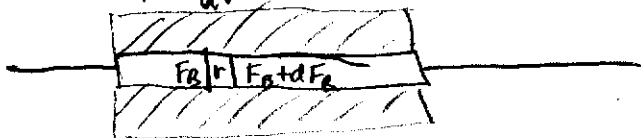
$$y = \underline{\underline{7.58}}$$

970524

"Tavelösning"



$$r = k(T) \cdot c_B \cdot c_E$$

$$\xrightarrow{z} dV$$


Sökt: V för 10% omväxlingsgrad
w B.

Adiabatisch tub: $T = f_1(x) = f_2(z) = f_3(F_B)$

$$r = f_4(T, x) = f_5(x) = F_6(F_B)$$

∴ Sätt F_B till olika värden, beräkna T ur V.B., beräkna r , integrera för att få V .

$$F_{BF} = 5 ; F_{EF} = 5 ; F_{CF} = 0 \text{ mol/s}$$

$$T_f = 450 + 273,2 \text{ K} = 723,2 \text{ K} = T_{ref} \text{ (ty } \Delta H \text{ är givet vid } 450^\circ\text{C)}$$

$$P = 101325 \text{ Pa}$$

$$x = 0.1 \text{ mol p. B.}$$

$$\Delta H = -120 \cdot 10^3 \text{ J/mol}$$

$$C_{pB} = 154 ; C_{pE} = 84.4 ; C_{pC} = 249 \text{ J/mol K}$$

$$R = 8.314 \text{ J/mol K}$$

Värmebalans (över godtycklig volym)

$$Q_{in} - Q_{out} + Q_r = 0$$

$$\Rightarrow Q_{out} = Q_r \text{ (ty } T_{ref} = T_f \Rightarrow Q_{in} = 0)$$

$$Q_r = (F_{BF} - F_B) \cdot (-\Delta H)$$

$$Q_{out} = \sum F_i c_{pi} \cdot (T - T_f)$$

$$\Rightarrow T = T_f + Q_r / (F_B \cdot c_{pE} + F_E \cdot c_{pE} + F_C \cdot c_{pC})$$

Materialbalans över dV var. B.

$$F_B - (F_B + dF_B) - k(T) \cdot C_B \cdot C_E dV = 0$$

$$\Rightarrow dV = \frac{-dF_B}{k(T) C_B C_E}$$

$$\Rightarrow V = - \int_{F_{Bf}}^{F_{But}} \frac{dF_B}{k(T) C_B C_E}$$

$$k(T) = 10^{4.5} \cdot e^{-110000/RT} \text{ m}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$$

$$C_B = \frac{P}{RT} \cdot \frac{F_B}{F_{of}} = \frac{P}{RT} \cdot \frac{F_B}{F_B + F_B + (F_{of} - F_B)} = \frac{P}{RT} \cdot \frac{F_B}{F_{of} + F_B}$$

$$C_E = C_B$$

$$I = \frac{1}{k(T) \cdot C_B \cdot C_E}$$

Skapa tabell: F_B F_E F_C Q_r T k $C_B=C_E$ I

Integrera numeriskt ev. t ex. kapetsformeln: se bilaga!

Tentauppgift 970524 nr 2

F_B (mol/s)	F_E (mol/s)	F_C (mol/s)	Qr (J/s)	T (K)	k (m ³ mol ⁻¹ s ⁻¹)	c_B = c_E (mol/m ³)	I (m ³ mol s ⁻¹)
5.00	5.00	0.00	0.00E+00	723.2	3.59E-04	8.43	39.27
4.95	4.95	0.05	6.00E+03	728.2	4.07E-04	8.33	35.44
4.90	4.90	0.10	1.20E+04	733.3	4.61E-04	8.23	32.05
4.85	4.85	0.15	1.80E+04	738.3	5.21E-04	8.13	29.04
4.80	4.80	0.20	2.40E+04	743.3	5.88E-04	8.03	26.36
4.75	4.75	0.25	3.00E+04	748.3	6.63E-04	7.93	23.97
4.70	4.70	0.30	3.60E+04	753.3	7.45E-04	7.84	21.83
4.65	4.65	0.35	4.20E+04	758.3	8.37E-04	7.74	19.92
4.60	4.60	0.40	4.80E+04	763.3	9.38E-04	7.65	18.21
4.55	4.55	0.45	5.40E+04	768.3	1.05E-03	7.56	16.67
4.50	4.50	0.50	6.00E+04	773.3	1.17E-03	7.47	15.29

$$0.05 * (I_1/2 + \text{sum} (I_2 : I_{10}) + I_{11}/2) =$$

12.54
m³

% Tenta 970524 Uppgift 2

%
global B E C Ff Tf cp P R DH

B=1; % Index butadien
E=2; % Index eten
C=3; % Index cyklohexan

Ff(B)=5; % Inflow butadien mol/s
Ff(E)=5; % Inflow eten mol/s
Ff(C)=0; % Inflow cyklohexan mol/s
Tf=450+273.2; % Temp. inflow K (=referenstemp.)
P=101325; % Totaltryck Pa
x=0.1; % Omsättning butadien
DH=-120e3; % Reaktionsentalpi vid 450 C, J/mol
cp(B)=154; % Molvärme butadien J/molK
cp(E)=84.4; % Molvärme eten J/molK
cp(C)=249; % Molvärme cyklohexan J/molK
R=8.314; % Gaskonstanten J/molK

N=10; % Antal steg i integrering

F=zeros(N+1,3);
F(:,B)=[Ff(B)*[1:-1/N*x:1-x]]';
F(:,E)=F(:,B);
F(:,C)=Ff(B)-F(:,B);

% Värmebalans $Q_{in} - Q_{out} + Q_r = 0$
%
% $\Rightarrow Q_{out} = Q_r$ (ty $T_{ref} = T_f \Rightarrow Q_{in} = 0$)

$Q_r = (Ff(B) - F(:,B)) * (-DH);$

% $Q_{out} = (\text{summa } F_i c_{pi}) * (T - T_f)$

$T = T_f + Q_r / (F * c_p);$

% Materialbalans $F_B - (F_B + dF_B) - k(T) c_B c_E dV = 0$
%
% $\Rightarrow dV = -dF_B / (k(T) c_B c_E)$

$k = 10^{4.5} * \exp(-110e3 ./ (R * T));$

$c_B = P ./ (R * T) .* F(:,B) ./ (2 * Ff(B) - F(:,B));$
 $c_E = c_B;$

$I = 1 ./ (k .* c_B .* c_E);$

$V_{trap} = -\text{trapz}(F(:,B), I);$

$V_{int} = -\text{quad8}('f9705242', Ff(B), Ff(B) * (1-x), 1e-8, 1);$

$\Rightarrow V = 3,5622 \text{ m}^3$

$\Rightarrow V = 3,5605 \text{ m}^3$

```
function f=f9705242(FB)
```

```
global B E C Ff Tf cp P R DH
```

```
N=length(FB);
```

```
F=zeros(N,3);
```

```
F(:,B)=FB';
```

```
F(:,E)=F(:,B);
```

```
F(:,C)=Ff(B)-F(:,B);
```

```
% Värmebalans Qin - Qout + Qr = 0
```

```
%
```

```
% => Qout = Qr (ty Tref = Tf => Qin = 0)
```

```
Qr=(Ff(B)-F(:,B))*(-DH);
```

```
% Qout = (summa Fi cpi) * (T-Tf)
```

```
T=Tf+Qr./(F*cp');
```

```
% Materialbalans FB - (FB+dFB) - k(T)cBcE dV = 0
```

```
%
```

```
% => dV = - dFB/k(T)cBcE
```

```
k=10^4.5*exp(-110e3./(R*T));
```

```
cB=P./(R*T).*F(:,B)./(2*Ff(B)-F(:,B));
```

```
cE=cB;
```

```
f=1./(k.*cB.*cE);
```

tenta 970524

Reak: Omätt kol. + $H_2 \rightarrow$ mätt. kol.

$$r = \frac{kC}{(1+Kc)^2} \quad (C = \text{omätt})$$

mol/ $s m^3_{\text{kat}}$

1) Givet: $\frac{q}{kV_{\text{kat}}} = 0,019$, $K = 0,2832 m^3/\text{mol}$

2) $C_f = 46,6 \text{ mol}/m^3$, reaktor anses som
isotermiskt ideal tank

3) Sökt: instabil driftpunkt, X^{instabil}

MB map omättat över tank

1) $F_{Af} - F_{Af}(1-x) - rV_{\text{kat}} = 0 \rightarrow$

2) $M_b = F_{Af}x = qC_f x$

3) $M_r = rV_{\text{kat}} = \frac{kC}{(1+Kc)^2} \cdot V_{\text{kat}} = \frac{kV_{\text{kat}}C_f(1-x)}{(1+Kc_f(1-x))^2}$

4) ~~över~~ Sela $M_b = M_r$ m. $k \cdot V_{\text{kat}} \rightarrow$

$$M_b^* = \frac{q}{kV_{\text{kat}}} C_f x = 0,019 \cdot 46,6 \cdot x$$

$$M_r^* = \frac{C_f(1-x)}{(1+Kc_f(1-x))^2} = \frac{46,6(1-x)}{(1+0,2832 \cdot 46,6(1-x))^2}$$

Driftpunkter för då $M_b^* = M_r^*$

Plotta M_b^* & M_r^* & läs av

Skärningarna \Rightarrow

$$x_1 = 0.39$$

$$x_2 = 0.80$$

$$x_3 = 0.95$$

Löst i förhållande $x_1 = 0.394$

$$x_2 = 0.807$$

$$x_3 = 0.951$$

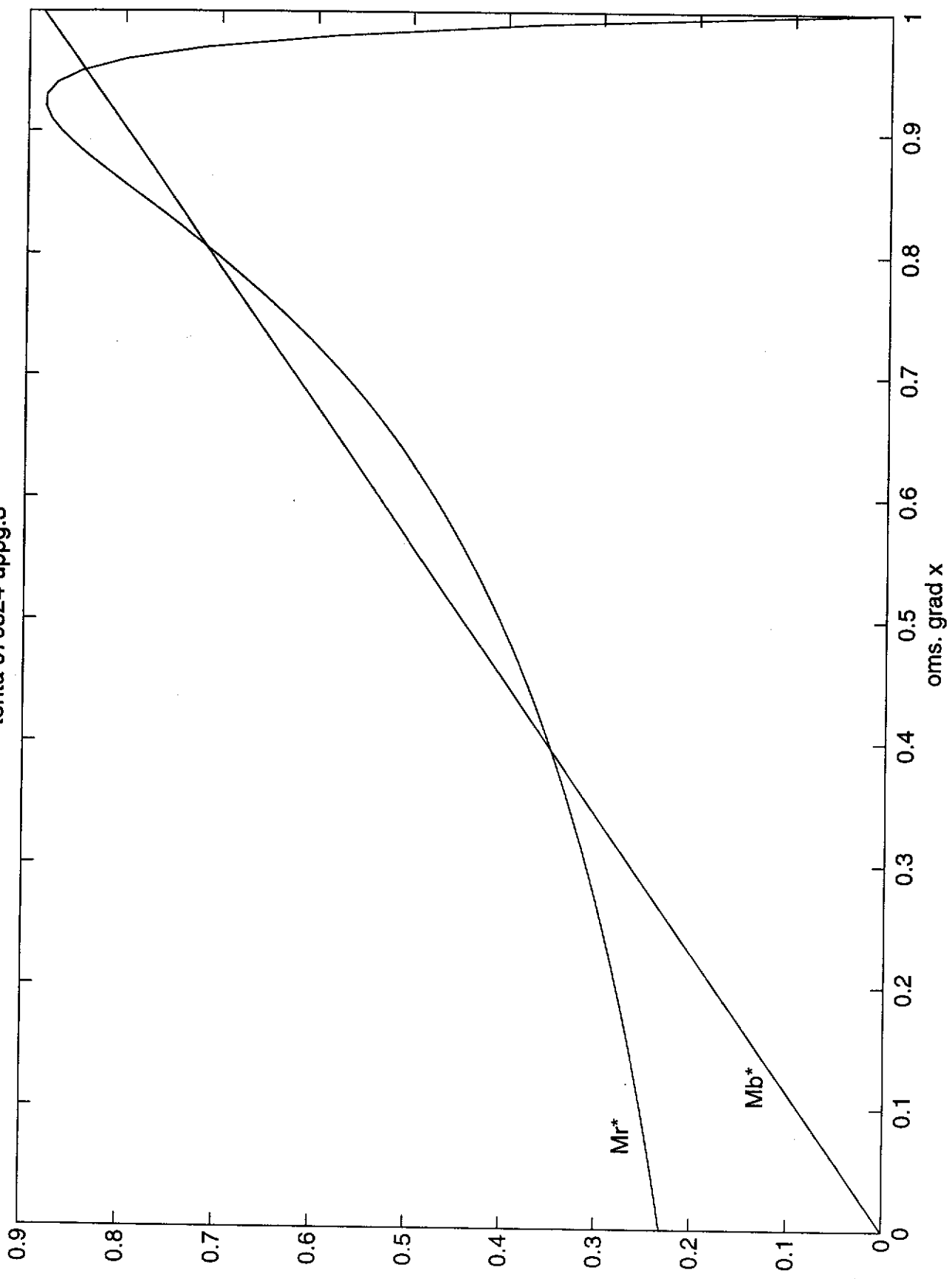
Stabilitet: En drifpunkt är instabil

$$\text{då } \frac{dM_r}{dx} > \frac{dM_b}{dx} \text{ dvs.}$$

då lutningen för M_r är större än lutningen för $M_b \Rightarrow$

$$x_2 = \underline{0.807} \text{ är instabil}$$

tenta 970524 uppg.3



```
p4
% Bestämning av antal tankar:
t=[1 3 5 7 9 11 13 15]';
c=[0 0 10 10 10 10 0 0]';
c_integral=trapz(t,c);
e=c./c_integral;
t_medel=trapz(t,t.*e)
```

t_medel =

8

```
sigma_2=(trapz(t,t.^2.*e))-t_medel^2
```

sigma_2 =

5

```
N=t_medel^2/sigma_2
```

N =

12.8000

```
% Bestämning av oms. för en första ordningens reaktion
```

k=.1;

```
x=1-1/((1+k*t_medel/N)^N)
```

x =

0.5398

-2)

2)

CHALMERS TEKNISKA HÖGSKOLA

Kemisk reaktionsteknik

Tentamen i Kemisk reaktionsteknik, grundkurs (K3, Kf3)

onsdagen den 22 januari 1997 kl 08.45-13.45 i ML 14

Said Irandoust är anträffbar för frågor på telefonankn. 3023 och kommer dessutom att vara i tentamenslokalen någon gång mellan 10.00 och 10.30.

Granskning av tentamensrättningen kan ske tidigast den 10/2 1997.

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

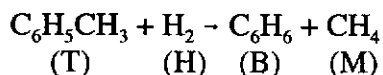
Telefon

031-772 30 30

Uppgift 1 (ideal tankreaktor)

6 poäng

Väte och toluen (T) i gasfas reagerar i en fluidiserad bädd av fast katalysator ($\text{SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3$) under bildning av bensen och metan enligt reaktionsformeln



Omblandningsbetingelserna i reaktorn är sådana att man kan anse att denna uppför sig som en ideal tankreaktor. Beräkna mängden katalysator vid en produktion av 10 mol bensen/min.

Processbetingelser

Inflödets sammansättning (mol %):
40 % H_2
20 % toluen
40 % inert gas

Temperatur: 600°C (873 K)

Tryck: 10 bar

Reaktionen sker isotermt och isobart.

Reaktionshastighet:

$$r = \frac{1,41 \cdot 10^{-8} p_H p_T}{1 + 1,45 p_B + 1,01 p_T} \text{ kmol / (kg kat sek)}$$

där p_H , p_T , p_B är partialtryck (i bar) för väte, toluen och bensen.

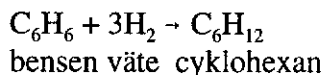
Volymflödes hastigheten i inflödesöppningen är 0,4 m³/min vid rådande betingelser (600°C, 10 bar). Gasblandningen följer allmänna gaslagen.

Anm. Katalysatormängden blir mycket stor.

Uppgift 2 (ideal tubreaktor)

6 poäng

Bensen skall hydreras katalytiskt i gasfas i en ideal tubreaktor för att ge cyklohexan enligt reaktionsformeln



Inflödets sammansättning är 90,9 % (molprocent) väte och 9,1 % bensen. Man vill driva reaktionen till 99% omsättningsgrad m a p bensen. Reaktorn innehåller 1 m³ katalysator.

forts.

Uppgift 2, forts

Vid de aktuella betingelserna kan hastighetsekvationen skrivas

$$r = k p_{\text{H}_2}, \quad \text{där}$$

$$k = 0,145 \text{ mol}/(\text{s bar m}^3 \text{ katalysator})$$

Beräkna vilket totaltryck processen måste arbeta vid för att ge en produktion av 2 mol cyklohexan per sekund.

Uppgift 3 (reaktorstabilitet)

6 poäng

Gasfasreaktionen $A \rightarrow B$ utförs i en kontinuerligt arbetande ideal tankreaktor under adiabatiska betingelser. Reaktionen är ett första ordningens förlopp med avseende på A och hastighetskonstanten kan skrivas

$$k = 5,56 \cdot 10^{13} \exp(-25000/T), \text{ s}^{-1}$$

Beräkna den lägsta halten av A som inflödet kan hålla utan att reaktorn slocknar. Man vet att för ett inflöde med 3,4 volymsprocent A erhålles den maximala adiabatiska temperaturökningen till 300 K. Strömningshastigheten är $0,075 \text{ m}^3 \text{ (NTP)}/\text{s}$. Reaktorvolymen är $0,1 \text{ m}^3$ och gasblandningens densitet är $4,4 \text{ kg}/\text{m}^3 \text{ (NTP)}$. Densiteten är oberoende av omsättningsgraden, vilket innebär att man kan anse totala antalet mol i gasblandningen för konstant. Trycket är konstant 1 bar. Maximal tillåten inflödestemperatur är 720 K.

Ledning: Observera att reaktionen sker i gasfas. Balanser som innefattar q och c är mindre användbara i detta sammanhang. NTP motsvarar 0°C och 1 atm (=1,013 bar).

Uppgift 4 (beskrivande)

2 poäng

Visa i ett x - T diagram

- jämviktskurvan för en endoterm jämviktsreaktion.
- driftslinjen för en adiabatiskt arbetande reaktor samt några hastighetskonturer med angivande av det inbördes läget för $r_1 > r_2 > r_3$.

Deluppgift b skall avse en endoterm jämviktsreaktion.

Uppgift 5 (axiell dispersion, tankseriemodellen)

6 poäng

En gasfasreaktion av första ordningen planeras utförd kontinuerligt i ett tomt, uppvärmt rör av längden 20 m och tvärsnittsytan 1 m^2 . Längd-bredd-förhållandet hos reaktorn är emellertid inte stort nog för att undvika störningar genom axiell och radiell dispersion som leder till att selektiviteten blir lägre än vad som kan tolereras. För den skull planerar man att fylla reaktorn med sfäriska lika stora fyllkroppar. Man har att välja mellan fyllkroppar med diametern 0,1 m och 0,5 m. Reaktorbäddens porositet med det

Uppgift 5, forts

aktuella packningsmaterialet blir $\epsilon_B = 0,3$, dvs den fria gasvolymen är 30% av hela rörvolymen. Porositeten är oberoende av fyllnadsmaterialets diameter. Vid stationära driftsbetingelser är flödes hastigheten $0,3 \text{ m}^3/\text{s}$ räknat vid reaktionstemperaturen. Reaktionen sker vid isoterma betingelser och ger inte upphov till några volymsändringar. Gasen värmes momentant till reaktionstemperaturen vid inträdet i reaktorn. Vid den aktuella reaktionstemperaturen är hastighetskonstanten $k = 0,01 \text{ s}^{-1}$. Koncentrationen av reaktanten i inflödet är $1 \text{ kmol}/\text{m}^3$. I närvaro av fyllnadsmaterialet kan man bortse från den radiella dispersionen, medan den axiella dispersionen kan beskrivas med sambandet $Pe_x = 2$, där Pe_x är Peclets tal för axiell dispersion.

Beräkna vilket av de två fyllnadsmaterialen som ger den högsta omsättningsgraden. Den stökiometriska koefficienten för reaktanten är $\nu = -1$.

Uppgift 6 (beskrivande)

4 poäng

- a) Optimal temperaturreglering för att uppnå maximal selektivitet vid konsekutiva reaktioner $A \rightarrow B \rightarrow C$. Tre fall bör beaktas, nämligen $E_1 < E_2$, $E_1 = E_2$, och $E_1 > E_2$, där E_1 och E_2 är aktiveringsenergierna för de båda reaktionerna.
- b) En exoterm jämviktsreaktion utföres i seriekopplade adiabatiska jämviktsskikt med tillförsel av kallt, färskt inflöde mellan skikten. Beskriv med hjälp av ett x - T -diagram hur omsättningsgraden x ökar med stigande antal skikt.
-

1997-01-22

Uppgift 0

Första frågan att besvara:

Vad är F_T^0 och x_T

(F_T^0)

Gas lagar $pV = nRT$

Tillämpad på volymflödet av T

$F_T^0 =$ molflödet av T in (kmol T/min)

$$(P_T^0 q = F_T^0 RT)$$

$$\frac{10 \cdot 0.2 \cdot 0.4}{P_T^0 \cdot q \text{ (m}^3/\text{min)}} = F_T^0 \text{ kmol T/min}$$
$$\frac{0.083 \cdot 873}{R \cdot T}$$

$$F_T^0 = 0,01104 \text{ kmol T/min} \quad (11,04 \text{ mol/min})$$

$$\text{eller } 0,011/60 = 184 \cdot 10^{-4} \text{ kmol T/s}$$

(x_T)

Produktion = 10 mol B/min

$$F_B = F_T^0 x_T$$

$$x_T = F_B / F_T^0 = \frac{10}{11,04} = \underline{0,906}$$

(r)

$$r = \frac{1,41 \cdot 10^{-8} p_H p_T}{(1 + 1,45 p_B + 1,01 p_T)} \quad \frac{\text{kmol}}{\text{kg kat.s}}$$

Inflödet gäller | vidare gäller

$$p_H = p_H^0 - p_T^0 x_T = 2,188$$

$$p_H^0 = 2 p_T^0$$

$$p_T = p_T^0 (1 - x_T) = 0,188$$

dvs

$$p_B = p_T^0 x_T = 1,812$$

$$p_H = p_T^0 (2 - x_T)$$

$$p_M = p_T^0 x_T$$

$$r = \frac{1,41 \cdot 10^{-8} (2 - x_T)(1 - x_T) (p_T^0)^2}{[1 + 1,45 p_T^0 x_T + 1,01 p_T^0 (1 - x_T)]}$$

$$p_T^0 = 10 \cdot 0,2 = 2 \text{ bar}$$

$$r = \frac{5,64 \cdot 10^{-8} (2 - x_T)(1 - x_T)}{3,02 + 0,88 x_T}$$

$$x_T = 0,906$$

$$r = \frac{5,64 \cdot 10^{-8} \cdot 1,094 \cdot 0,094}{3,02 + 0,88 \cdot 0,906} = 0,152 \cdot 10^{-8}$$

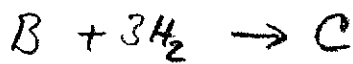
(W)

$$\frac{W}{F_T} = \frac{\Delta x_T}{-v_T r} \quad ; \quad W = \frac{0,906 \cdot 1,84 \cdot 10^{-4}}{0,152 \cdot 10^{-8}}$$

$$W = 10,97 \cdot 10^4 \text{ kg}$$

$$W = 109,7 \text{ ton}$$

Aufg 2



$$\frac{V_{kat}}{F_B^0} = \int_0^{0,99} \frac{dx_B}{-v_B \tau}$$

$$p_{H_2} = \frac{n_{H_2}}{\sum n} \cdot P$$

$$n_B = n_B^0 (1 - x_B)$$

$$n_{H_2} = n_{H_2}^0 - 3n_B^0 x_B$$

$$n_C = 0 + n_B^0 x_B$$

$$\sum n = n_{H_2}^0 + n_B^0 (1 - 3x_B)$$

3,

man

$$\frac{n_{H_2}^0}{n_B^0} = \frac{90,9}{9,1} \approx 10$$

$$\sum n = n_B^0 (11 - 3x_B)$$

$$n_{H_2} = n_B^0 (10 - 3x_B)$$

$$r = k \frac{10 - 3x_B}{11 - 3x_B} P$$

$$\frac{V_{kat}}{F_B^0} = \frac{1}{kP} \int_0^{0,99} \frac{11 - 3x_B}{10 - 3x_B} dx_B$$

$$\frac{V_{kat}}{F_B^0} = \frac{1}{kP} \int_0^{0,99} \left(1 + \frac{1}{10 - 3x_B} \right) dx_B$$

$$= \frac{1}{kP} \left[x_B - \frac{1}{3} \ln(10 - 3x_B) \right]_{0,99}$$

$$= \frac{1}{k_p} \cdot 1,11$$

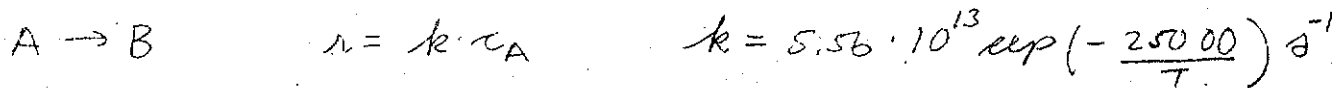
$$P = \frac{1,11 F_B^0}{k V_{kat}}$$

$$F_B^0 = \frac{2}{0,99} = 2,02 \text{ mol B/s}$$

$$P = \frac{1,11 \cdot 2,02}{0,145 \cdot 1} = \underline{\underline{15,5 \text{ bar}}}$$

uppgift 3

Gasfasreaktion i tankreaktor:



Beräkna lägsta konc. av A i inloppet utan att reaktorn stoppnar.

Materialbalans:

$$F_{Af} - F_{Af}(1-X) - r V_R = 0$$

$$F_{Af} X = r V_R = k c_A V_R$$

$$c_A = \frac{F_A}{Q} = \frac{F_{Af}(1-X)}{F_{in} \cdot \frac{RT}{P}} = (1-X) \frac{F_{Af}}{F_{in}} \cdot \frac{P}{RT}$$

$$F_{Af} \cdot X = k(1-X) \frac{F_{Af}}{F_{in}} \cdot \frac{P}{RT} \cdot V_R$$

$$X = \frac{1}{1 + \frac{F_{in} \cdot RT}{k V_R P}}$$

Reaktionsvärme:

$$Q_R = r V_R (-\Delta H) = F_{Af} X (-\Delta H) \quad \text{Hz}$$

Maximalt värde på Q_R får för $X=1$

$$Q_{Rm} = F_{Af} (-\Delta H)$$

Dimensioner på reaktionsvärme:

$$\frac{Q_R}{Q_{Rm}} = X$$

$$\frac{Q_R}{Q_{Rm}} = \frac{1}{1 + \frac{F_{in} \cdot RT}{k V_R P}}$$

$$F_{\text{tot}} = q(\text{NTP}) \cdot \frac{P_0}{RT_0} = \frac{0,075 \cdot 1,013 \cdot 10^5}{8,314 \cdot 273} = 3,347 \text{ mol/s}$$

$$\frac{F_{\text{tot}} \cdot RT}{k \cdot v \cdot P} = \frac{3,347 \cdot 8,314 \cdot T}{5,56 \cdot 10^{13} \exp\left(-\frac{25000}{T}\right) \cdot 0,1 \cdot 10^5} = 5,005 \cdot 10^{-17} T \cdot \exp\left(\frac{25000}{T}\right)$$

$$\frac{Q_n}{Q_m} = \frac{1}{1 + 5,005 \cdot 10^{-17} \cdot T \cdot \exp\left(\frac{25000}{T}\right)}$$

$\frac{Q_n}{Q_m}$ uppritas som funktion av T.

T (K)	Q_n/Q_m
680	0,003
700	0,009
720	0,023
740	0,054
760	0,120
780	0,236
800	0,401
820	0,583
840	0,739
860	0,846
880	0,912
900	0,950
920	0,972
940	0,984

Bortför: värmes:

$$Q_b = F_{\text{tot}} \cdot c_p (T - T_1) \quad \text{J/s}$$

dimensionerast bortfört värme:

$$\frac{Q_f}{Q_{mv}} = \frac{F_{tot} c_p (T - T_f)}{F_{Af} (-\Delta H)} = \frac{c_p (T - T_f)}{y_{Af} (-\Delta H)}$$

y_{Af} = molfråk av A i inflödet.

Det lägsta värdet på $(y_{Af})_f$ fås när Q_f/Q_{mv} -linjens lutning,

$$\frac{c_p}{(y_{Af})_f (-\Delta H)}$$

så så stor som möjligt.

Av diagrammet $Q/Q_{mv} = f(T)$ framgår att den linje som gäller vid stäckning har störst lutning då T_f nås sitt största värde, $T_f = 720 \text{ K}$.

Ur diagrammet fås lutningen $1/160$, dvs

$$\frac{c_p}{y_{Af}^{min} (-\Delta H)} = \frac{1}{160}$$

För $y_{Af} = 0.034$ fås den maximala adiabotiska temperatur-

höjningen $T - T_f = \Delta T_{max} = 300 \text{ K}$.

$$\frac{Q_f}{Q_{mv}} = 1 \quad \text{för} \quad \Delta T_{max} = 300$$

(3)

$$\frac{c_p}{0.034 (-\Delta H)} = \frac{1}{300}$$

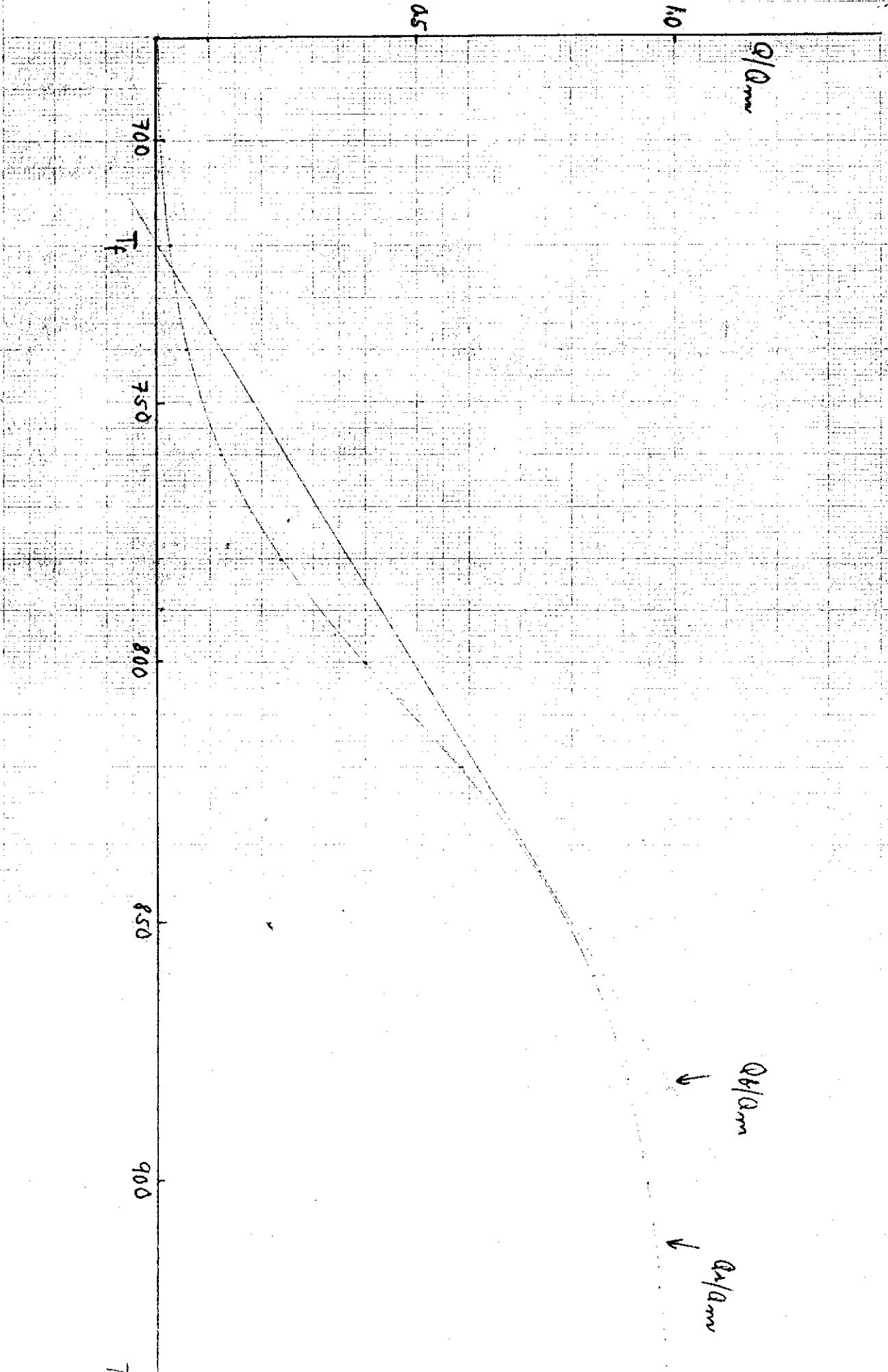
$$y_{Af}^{min} = \frac{160}{300} \cdot 0.034 = 0.018 = \frac{1.8\%}{100}$$

$$Q/Q_{ms} = f(T)$$

79-01-13

Oppgift 7.

7.9



ppgift ⑤

$$\text{Reaktorvolymen} : 0,3 \cdot 20 = 6 \text{ m}^3$$

Antalet lika stora
seriekopplade tankar som
 motsvarar bäddreaktorer:

$$N = \frac{L}{d_p}$$

$$N_1 = \frac{20}{0,1} = 200 \text{ st}$$

$$N_2 = \frac{20}{0,5} = 40 \text{ st}$$

$$c_{\text{out}} = \frac{c_{\text{in}}}{(1 + k\theta)^N}$$

$$c_{\text{in}} = 1 \text{ kmol/m}^3$$

$$k = 0,01 \text{ s}^{-1}$$

$$\tau_1 = \left(\frac{V_r}{N_1}\right) \frac{1}{q} = \frac{6}{200 \cdot 0,3}$$

$$\tau_2 = \frac{6}{40 \cdot 0,3}$$

$$(c_{\text{out}})_1 = \frac{1}{\left(1 + 0,01 \frac{6}{200 \cdot 0,3}\right)^{200}}$$

$$(c_{\text{out}})_2 = \frac{1}{\left(1 + 0,01 \frac{6}{40 \cdot 0,3}\right)^{40}}$$

$$(c_{\text{out}})_1 = \frac{1}{\left(1 + \frac{0,01 \cdot 6}{60}\right)^{200}}$$

$$(c_{\text{out}})_1 = \frac{1}{(1,001)^{200}} = 0,8188$$

$$(c_{\text{out}})_2 = \frac{1}{\frac{(1 + 0,01 \cdot 0,5)^{40}}{1,005}} = 0,8191$$

$$x = 1 - \frac{c_{\text{out}}}{c_{\text{in}}} = 1 - c_{\text{out}}$$

$$x_1 = 18,12 \%$$

$$x_2 = 18,09 \%$$

De små skillnaderna
bättre, eftersom
de är nära.

CHALMERS

Tentamen i Kemisk reaktionsteknik för Kf3, K3, Kx (KKR011)

tisdagen den 25 maj 1999 kl 14.15 – 19.15 i mg

Ansvarig lärare: Said Irandoust, tel 0706-72 3023

Said Irandoust kommer att besöka tentamenslokalen mellan kl 16 och 16.30.

Granskning av tentamensrättningen kan ske tidigast den 11 juni 1999.

Tillåtna hjälpmedel

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

Ej tillåtna hjälpmedel

Kompendium i KRT och KRT övning
Lösta exempel

Lycka till!

Vi på KRT önskar Er alla en trevlig sommar!



Uppgift 1 (materialbalans, ideal tankreaktor)

5 poäng

En autokatalytisk reaktion $A \rightarrow B$ skall genomföras i en ideal tankreaktor. Efter reaktorn är kopplad en separationsenhet. Från denna går två flöden, dels ett produktflöde innehållande bildad produkt B och något lite reaktant, dels ett recirkulationsflöde som endast innehåller reaktanten A. Det färska inflödet innehåller enbart reaktant A så när som på en liten mängd produkt B motsvarande omsättningsgraden $x_A = 10^{-6}$. Denna lilla mängd är nödvändig för att reaktionen skall starta. Utbytet över hela anläggningen är 99% räknat på mängden reaktant i det färska inflödet. Omsättningsgradens ändring över reaktorn är $x_A = 0,6$. Vidare gäller följande data

Hastighetsekvation,

$$r = k c_A c_B$$

Hastighetskonstantens värde vid aktuella betingelser,

$$k = 2 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$$

Koncentrationen av reaktant i färskt inflöde och recirkulationsflöde,

$$c_A = 4,3 \cdot 10^3 \text{ mol m}^{-3}$$

Densiteten är densamma i alla flöden

Molflöde hastighet i färskt inflöde,

$$F_A = 1,5 \cdot 10^3 \text{ mol A s}^{-1}$$

Beräkna reaktorns volym.

Uppgift 2 (ideal tubreaktor)

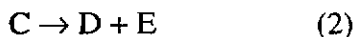
5 poäng

Två oberoende gasfasreaktioner sker i en ideal tubreaktor som arbetar isotermt vid 227°C (500 K) och isobart vid 5 bar.

Reaktionerna kan skrivas



och



Reaktion (1) är ett förlopp av första ordningen för vilket gäller

$$r_1 = k_1 c_A$$

och reaktion (2) är ett förlopp av nollte ordningen för vilket gäller

$$r_2 = k_2$$

Vid rådande processbetingelser gäller

$$k_1 = 10 \text{ s}^{-1}$$

$$k_2 = 0,03 \text{ kmol m}^{-3} \text{ s}^{-1}$$

Inflödet består av lika delar A och C och molflödes hastigheterna är $F_A = F_C = 5$ mol/s. Hur stor måste reaktorvolymen V_r vara för att omsättningsgraden med avseende på A skall uppgå till $x_A = 0,5$?

Uppgift 3 (beskrivande)

6 poäng

- Redogör för huvudbegreppen/huvudkoncepten i avsnitten "multipla stationära driftspunkter" samt "reaktorstabilitet"
 - Diskutera val av reaktionstemperatur för en exoterm jämviktsreaktion.
-

Uppgift 4 (uppehållstidsfördelning)

4 poäng

I Danmark finns ett företag som extraherar agar-agar ur blåstång i en anläggning som består av sju i serie kopplade tankar. Viskositeten på flödet genom tankarna ökar mer än tiofaldigt från den första till den sjunde tanken. Med fog är man därför tveksam om huruvida anläggningen omblandningsmässigt beter sig som sju seriekopplade, lika stora, ideala tankar eller ej. För att utreda detta gör man ett spårämnesförsök med 200 millicurier radioaktiv Br-82 i form av NH_4Br upplöst i en liter vatten. Hela spårämnesmängden tillföres den första tanken vid tiden $t=0$ som en puls och aktiviteten mätes i utflödet som funktion av tiden. Hur många ideala tankar motsvarar anläggningen?

tid, min	spårämne skalutslag	tid, min	spårämne skalutslag
200	0	1800	40
600	200	2200	16
1000	240	2600	10
1400	120	3000	0

Uppgift 5 (beskrivande)

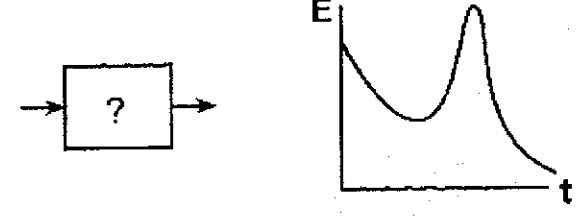
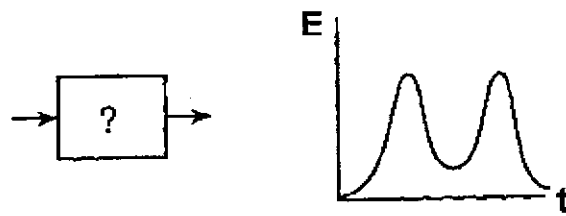
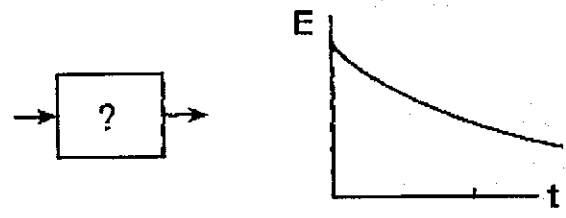
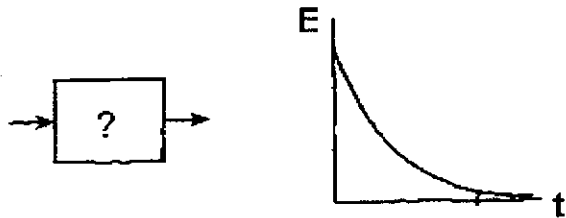
8 poäng

- Vilken reaktor, tub- eller tankreaktor, är att föredraga för att erhålla maximal produktion av mellanprodukten vid konsekutiva reaktioner?
 - Visa i ett X-T diagram jämviktskurvan för en exoterm jämviktsreaktion, driftslinjen för en adiabatiskt arbetande reaktor samt några hastighetskonturer med angivande av det inbördes läget för $r_1 > r_2 > r = 3$.
 - Välj och diskutera den bästa reaktorkombinationen för en process där reaktionshastigheten går igenom ett maximum med ökande omsättningsgrad.
-

Uppgift 6 (beskrivande)

2 poäng

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



Tentamen i Kemisk reaktionsteknik för Kf3, K3, Kx (KKR011)

lördagen den 21 augusti 1999 kl 8.45 – 13.45 i mn

Ansvarig lärare: Said Irandoust, tel 0706-72 3023

Said Irandoust kommer att besöka tentamenslokalen mellan kl 10.30-11.00
Granskning av tentamensrättningen kan ske tidigast den 7/9-1999.

Tillåtna hjälpmedel

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

Ej tillåtna hjälpmedel

Kompendium i KRT och KRT övning
Lösta exempel

Lycka till!

Uppgift 1 (materialbalans)

5 poäng

För framställning av sulfityksyra i en cellulosaabrik brännes 300 kg svavel per timma med luft (21% O₂ och 79% N₂) av temperaturen 15°C. Renheten hos det använda svavlet är 99,4%. Avgaserna nedkyls till 25°C och leds in i ett absorptionstorn, där all svaveldioxid och svaveltrioxid absorberas i kalkmjölk och ger råsyra. Avgasen efter absorptionstornet har temperaturen 25°C och trycket 100 kPa och är mättad med vattenånga (ångtryck 3,2 kPa).

En analys av den nedkylda bränngasen visar att gasen är torr och innehåller 17,4% SO₂ och 2,7% O₂ räknat på SO₃-fri gas. Avgasen efter absorptionstornet innehåller 2,8% O₂ räknat på torr gas. Den erhållna råsyran innehåller 7,05% SO₂, varav 1,15% är fri SO₂ och resten (5,9%) är bunden som vätesulfit. Kalken som används för beredning av kalkmjölken, innehåller 98% CaO och resten inert.

Gaserna kan betrakas som ideala. Procentangivelserna gäller volymprocent i gasfas och viktsprocent för övrigt. Svaveltrioxid kan förutom vid förbränningen även bildas vid absorptionen. Beräkna volymsflödet avgas från absorptionstornet i m³/h

Uppgift 2 (ideala reaktorer)

5 poäng

Vätskefasreaktionen $2A \rightarrow B$ genomförs i en anläggning bestående av en ideal tank och en ideal tubreaktor seriekopplade i denna ordning.

Reaktionen är av andra ordningen m a p A och omsättningsgraden över hela anläggningen är 0,90. I övrigt gäller följande data

$$\begin{aligned}V_{\text{Tank}} &= 2 \text{ m}^3 \\V_{\text{tub}} &= 2 \text{ m}^3 \\q &= 1 \text{ m}^3/\text{s}\end{aligned}$$

Inflödet till första reaktorn består av A med koncentrationen $C_A^0 = 5 \text{ mol/m}^3$. Systemet arbetar under isoterma och isobara betingelser (samma i bägge reaktorena).

Vilken omsättningsgrad erhålls om reaktorena kopplas i omvänd ordning (tub + tank) vid i övrigt samma betingelser?

Uppgift 3 (multipla stationära driftspunkter)

6 poäng

Reaktionen $A + B \rightarrow 2C$ är ett förlopp av första ordningen med avseende på både A och B. Vid industriell produktion av C sker reaktionen i vätskefas i en tankreaktor, som kan betraktas som ideal. I reaktorinflödet är koncentrationen av A och B lika. Reaktionen är exoterm och reaktorn är utrustad med en kylare, som gör det möjligt att hålla reaktorinnehållet vid lämplig temperatur.

Följande driftsdata gäller vid stationära betingelser:

Reaktorns volym:	1 m ³
Konc. av reaktanterna i inflödet:	6,67 kmol/m ³ av vardera
Flödes hastighet:	0,1 m ³ /min
Flödets värmekapacitivet (per volymsenhet $c_p \rho$):	650 kJ/(m ³ K)
(värmekapacitivet är oberoende av temperaturen och omsättningsgraden)	
Hastighetskonstanten för förloppet:	$33 \cdot 10^9 \exp(-10900/T)$ m ³ /(kmol min)
Reaktionsentalpi ($-\Delta H$):	20 kJ/mol
(är oberoende av temp.)	
Inflödets temperatur:	300 K (27°C)
Kylmediets temperatur:	360 K (87°C)
(konstant)	
Kylytan:	25 m ²
Värmegenomgångskoefficienten:	1 kJ/(m ² min K)

Till vilken temperatur skall inflödet temporärt förvärmas för att reaktorn vid stationär drift skall arbeta vid den övre stabila driftspunkten? I detta fall är kylsystemet påkopplat vid tändningen.

Följande sammanhörande värden för omsättningsgraden (x) och temperaturen (T) i reaktorn har beräknats:

x	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9
T/K	324	366	375	384	393	403	415	432	463

Uppgift 4 (beskrivande)

8 poäng

- Beskriv fördelarna med en ideal satsreaktor vid kinetiska mätningar.
- Beskriv, ur kapacitetssynvinkel, den bästa reaktorkombinationen för en process där reaktionshastigheten går igenom maximum med ökande omsättningsgrad.
- Beskriv lösningsgången för dimensionering av en ideal adiabatisk tankreaktor för en given omsättningsgrad. Redogör vilka data du förutsätter vara kända. Alla införda beteckningar, (med resp. enhet) måste definieras.
- Ställ upp en allmän material- och värmebalans för en ideal satsreaktor. Alla införda beteckningar måste definieras. Ange också enhet på alla termer och beteckningar.

Uppgift 5 (beskrivande)

6 poäng

Redogör huvudkoncepten för följande avsnitt av kursen

- a) uppehållstidsfördelning
 - b) adiabatiska jämvikter
-