

Úloha 5-34 Adiabatický reaktor ideálně míchaný a s pístovým tokem

Reakci $A(g) = B(g) + \frac{1}{2} C(g)$ je možno považovat za prakticky jednosměrnou. Teplotní závislost rychlostní konstanty této reakce je dána vztahem

$$k_c / s^{-1} = 3,9 \cdot 10^{10} \cdot \exp\left(-\frac{200\,500}{RT}\right)$$

Reakci chceme provádět v adiabatickém průtočném reaktoru. Zjistěte potřebný objem reaktoru

(a) pro ideálně promíchávané uspořádání,

(b) pro uspořádání s pístovým tokem

pro nástřik čisté složky A v množství 20 mol/h při teplotě 600 K a tlaku 170 kPa, jestliže z reaktoru chceme odvádět 8 molů složky B za hodinu. Data:

	A(g)	B(g)	C(g)
$\Delta_{sl}H^\ominus$ (300 K) / (kJ mol ⁻¹)	-17	35	-264
C_{pm} / (J K ⁻¹ mol ⁻¹)	122	65	160

$$[V_{R, \text{míchaný}} = 0,02451 \text{ m}^3, \text{ (b) } V_{R, \text{pístový}} = 34,07 \text{ m}^3]$$

Řešení:

$$T_{\text{vstup}} = 600 \text{ K}$$

$$T_{\text{ref}} = 300 \text{ K}$$

$$p = 170 \text{ kPa}$$

Látková bilance:

$$n_{A0} F = 20 \text{ mol h}^{-1}$$

$$n_A F = n_{A0} F - n_{A0} F \cdot \alpha_A \quad p_A = \frac{1 - \alpha_A}{1 + 0,5 \alpha_A} \cdot p$$

$$n_B F = n_{A0} F \cdot \alpha_A = 8 \text{ mol h}^{-1} \Rightarrow \alpha_A = \frac{8}{20} = 0,4$$

$$n_C F = \frac{1}{2} n_{A0} F \cdot \alpha_A$$

$$n F = n_{A0} F + \frac{1}{2} n_{A0} F \cdot \alpha_A$$

Závislost adiabatické teploty na stupni přeměny - entalpická bilance:

Reakční entalpie při 300 K

$$\Delta_r H^\ominus = \Delta_{sl} H_B^\ominus + \frac{1}{2} \Delta_{sl} H_C^\ominus - \Delta_{sl} H_A^\ominus = 35 + \frac{1}{2} \cdot (-264) - 17 = -80 \text{ kJ mol}^{-1}$$

$$\int_{600}^{300} n_{A0} F \cdot C_{pmA} \cdot dT + n_{A0} F \cdot \alpha_A \cdot \Delta_r H_{300}^\ominus + \int_{300}^{T_{ad}} (n_A F \cdot C_{pmA} + n_B F \cdot C_{pmB} + n_C F \cdot C_{pmC}) dT = 0$$

$$C_{pmA} \cdot (300 - 600) + \alpha_A \cdot \Delta_r H_{300}^\ominus + [(1 - \alpha_A) \cdot C_{pmA} + \alpha_A \cdot C_{pmB} + 0,5 \cdot \alpha_A \cdot C_{pmC}] \cdot (T_{ad} - 300) = 0$$

$$122 \cdot (-300) + \alpha_A \cdot (-80\,000) + [(1 - \alpha_A) \cdot 122 + \alpha_A \cdot 65 + 0,5 \cdot \alpha_A \cdot 160] \cdot (T_{ad} - 300) = 0$$

$$-36600 - 80000 \alpha_A + (122 + 23 \alpha_A) \cdot (T - 300) = 0$$

$$T = 300 + \frac{36600 + 80000 \cdot \alpha_A}{122 + 23 \cdot \alpha_A}$$

(a) Ideálně promíchávaný reaktor

$$V = F \cdot \frac{n_{A0} \cdot \alpha_A}{r_A}, \quad r_A = -\frac{dn_A}{V d\tau} = k'_{pA} \cdot p_A = k'_{pA} \cdot p \cdot \frac{1 - \alpha_A}{1 + 0,5 \alpha_A}$$

$$V_{R, \text{mích}} = \frac{n_{A0} \cdot F \cdot \alpha_A}{k'_{pA} \cdot p \cdot \frac{1 - \alpha_A}{1 + 0,5 \alpha_A}}$$

$$n_{A0} F = 20 \text{ mol h}^{-1}$$

$$\alpha_A = 0,4, \quad p = 170 \text{ kPa}$$

$$T = 300 + \frac{36600 + 80000 \cdot 0,4}{122 + 23 \cdot 0,4} = 822,87 \text{ K}$$

$$k_c / \text{s}^{-1} = 3,9 \cdot 10^{10} \cdot \exp\left(-\frac{200\,500}{RT}\right)$$

$$k_c / \text{h}^{-1} = 1,404 \cdot 10^{14} \cdot \exp\left(-\frac{200\,500}{RT}\right)$$

$$k'_{pA} = k'_p = \frac{k_c}{RT} = \frac{1,404 \cdot 10^{14}}{8,314 \cdot 822,87} \cdot \exp\left(-\frac{200\,500}{8,314 \cdot 822,87}\right) = 3,84 \cdot 10^{-3} \text{ mol m}^{-3} \text{ Pa}^{-1} \text{ h}^{-1}$$
$$\left[\frac{\text{h}^{-1}}{(\text{J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}) \text{ K}} = \text{Pa}^{-1} \text{ m}^{-3} \text{ mol h}^{-1} \right]$$

$$V_{R, \text{mícháný}} = \frac{n_{A0} \cdot F \cdot \alpha_A \cdot (1 + 0,5 \alpha_A)}{k'_{pA} \cdot p \cdot (1 - \alpha_A)} = \frac{20 \cdot 0,4 \cdot (1 + 0,5 \cdot 0,4)}{3,84 \cdot 10^{-3} \cdot (170 \cdot 10^3) \cdot (1 - 0,4)} = 0,02451 \text{ m}^3$$
$$\left[\frac{(\text{mol h}^{-1})}{(\text{Pa}^{-1} \text{ m}^{-3} \text{ mol h}^{-1}) \cdot \text{Pa}} = \text{m}^3 \right]$$

(b) Reaktor s pístovým tokem

$$\frac{V}{F} = n_{A0} \int_0^{\alpha_A} \frac{d\alpha_A}{r_A}, \quad r_A = -\frac{dn_A}{V d\tau} = k'_{pA} \cdot p_A = k'_{pA} \cdot p \cdot \frac{1 - \alpha_A}{1 + 0,5 \alpha_A}$$

$$k'_{pA} = \frac{1,404 \cdot 10^{14}}{RT} \cdot \exp\left(-\frac{200\,500}{RT}\right) \text{ Pa}^{-1} \text{ m}^{-3} \text{ mol h}^{-1}$$

$$V_R = \int_0^{\alpha_A} \frac{n_{A0} \cdot F \cdot (1 + 0,5 \alpha_A)}{k'_{pA} \cdot p \cdot (1 - \alpha_A)} \cdot d\alpha_A = \frac{n_{A0} \cdot F \cdot R}{p \cdot 1,404 \cdot 10^{14}} \cdot \int_0^{\alpha_A} \frac{T \cdot (1 + 0,5 \alpha_A)}{\exp\left(-\frac{200\,500}{RT}\right) \cdot (1 - \alpha_A)} \cdot d\alpha_A$$

$$V_R = \frac{n_{A0} \cdot F \cdot R}{p \cdot 1,404 \cdot 10^{14}} \cdot \int_0^{\alpha_A} f(\alpha, T) \cdot d\alpha_A, \quad$$

$$\text{kde } f(\alpha, T) \equiv \frac{T \cdot (1 + 0,5 \alpha_A)}{\exp\left(-\frac{200\,500}{RT}\right) \cdot (1 - \alpha_A)}$$

$$T(\alpha_A) = 300 + \frac{36600 + 80000 \cdot \alpha_A}{122 + 23 \cdot \alpha_A}$$

Numerická integrace Simpsonovým pravidlem:

$$\int_a^b y \, dx = \frac{b-a}{3n} \cdot (y_a + 4y_1 + 2y_2 + \dots + 4y_{n-1} + y_b) = 4,89069 \cdot 10^{18} \text{ (viz Excel 5-34.xls – pro } n = 40\text{)}$$

$$V_{\text{pístový}} = \frac{20 \cdot 8,314}{170 \cdot 10^3 \cdot 1,404 \cdot 10^{14}} \cdot 4,89069 \cdot 10^{18} = 34,07 \text{ m}^3$$

(Velký rozdíl v objemech pístového a míchaného reaktoru: u promíchávaného reaktoru se rychlostní konstanta mezi vstupem a výstupem změnila o 3 řády)