18/4-18 Föreläsning 5

Icke-ideala reaktorer

- Motivering
- Segregationsmodell
- Tank-serie modell
- Dispersionsmodell
- Verkliga reaktorer via kombination av ideala reaktorer.

RTD

- Hur länge har en komp. varit i reaktorn
- Säger INGET om blandning

1:a ordningens reaktion

- RTD kan anv. direkt
- Beror ej på blandningsmodell

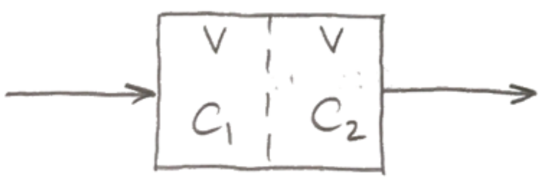
Ej 1:a ordningens reaktion

- Olika resultat beroende på blandningsmodell

Två extremfall

- fullständig segregation
  - alla molekyler som varit en viss tid i reaktorn håller ihop.
- fullständig mikroblandning

e.x.



- fullständig segregation

reaktionshasighet:

$$R_s = kVC_1^n + kVC_2^n = kV(C_1^n + C_2^n)$$

Mikroblandning:

$$R_m = k(2V)\cdot\left(\frac{V(C_1+C_2)}{2V}\right)^n = 2kV\left(\frac{C_1+C_2}{2}\right)^n$$

För $n<1$ $(n>0)$:

$\frac{R_m}{R_s} > 1$ (mikroblandning ger högre reaktionshastighet)

För $n=1$:

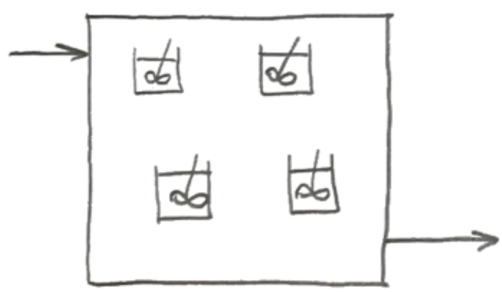
$\frac{R_m}{R_s} = 1$ (Blandningsmodell spelar ingen roll)

För $n>1$:

$\frac{R_m}{R_s} < 1$ (segregerat flöde ger större reaktionshastighet)

Slutsats: första ordningens reaktion är oberoende av blandningsmodell. För alla andra är blandning viktig.

1. Segregationsmodell



"Flödet innehåller många små batchreaktorer"
- de blandar sig inte med varandra!

$$\boxed{\bar{X} = \int_0^\infty X(t)E(t)dt}$$ - medelomsättningsgrad

$$\bar{X} = \sum_{\text{alla}} \left(\begin{array}{c}\text{X efter varit}\\ \text{tiden i reaktorn}\end{array}\right) \times \left(\begin{array}{c}\text{andel av batchreaktorer}\\ \text{som varit i reaktorn mellan}\\ \text{t och t+dt}\end{array}\right)$$

ex. 1:a ordningens reaktion

MB : $kC_AV = -r_AV = -\dfrac{dN_A}{dt}$

$$N_A = N_{A_0}(1-X)$$

$$N_A = C_A V$$

$$kN_A = -\frac{dN_A}{dt}$$

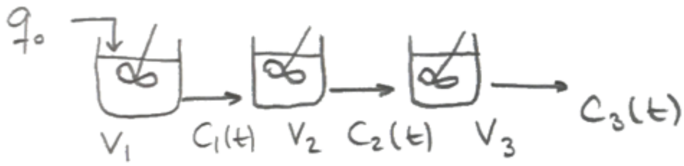
$$\cancel{N}_{A_0} \cdot \frac{dX}{dt} = k\cancel{N}_{A_0}(1-X)$$

$$\boxed{\frac{dX}{dt} = k(1-X)} \implies X(t) = 1 - e^{-kt}$$

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

för ex. 2:a ordn. funkar samma men man får ett annat uttryck på x.

2. Tankseriemodell



$$V_1 = V_2 = V_3 = V = V_i$$

$$q_0 = q$$

$$\tau_i = \frac{V_i}{q_i} \quad , \quad \tau_i = \frac{\tau}{n}$$

$$E(t) = \frac{C_3(t)}{\int_0^\infty C_3(t)\,dt}$$

MB över spårämne i tank 1:

$$0 - qC_1 = V_1 \frac{dC_1}{dt}$$

Integrera: $$C_1(t) = C_0 e^{-\frac{qt}{V_i}} = C_0 e^{-\frac{t}{\tau_i}}$$

MB över tank 2:

$$qC_1 - qC_2 = V_i \frac{dC_2}{dt}$$

$$\frac{dC_2}{dt} + \frac{C_2}{\tau_i} = \frac{C_0}{\tau_i} e^{-\frac{t}{\tau_i}}$$

Lös m. $C_2 = 0$ vid $t = 0$

$$\Rightarrow \quad C_2 = \frac{C_0 t}{\tau_i} e^{-\frac{t}{\tau_i}}$$

Samma för tank 3:

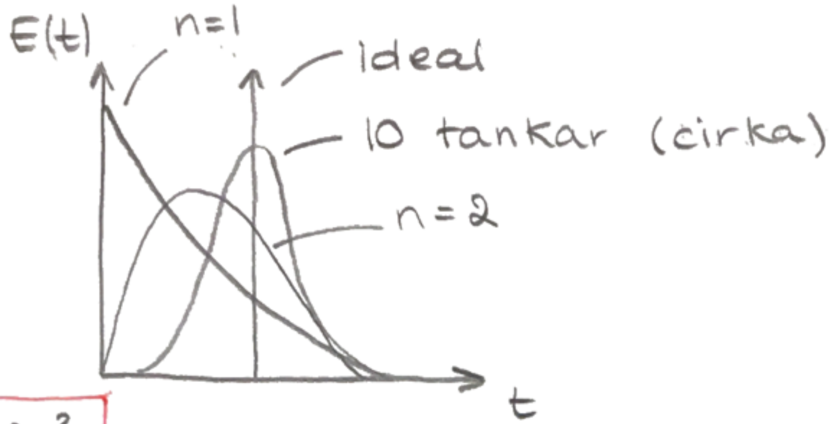
$$C_3(t) = \frac{C_0 t^2}{2\tau_i^2} e^{-\frac{t}{\tau_i}}$$

$$E(t) = \frac{t^2 e^{-t/\tau_i}}{\int_0^\infty t^2 e^{-t/\tau_i} dt}$$

$$E(t) = \frac{t^2}{2!\,\tau_i^3} e^{-t/\tau_i}$$ ← 3 reaktorer

Allmänn:

$$\boxed{E(t) = \frac{t^{n-1}}{(n-1)!\,\tau_i^n} e^{-\frac{t}{\tau_i}}}$$

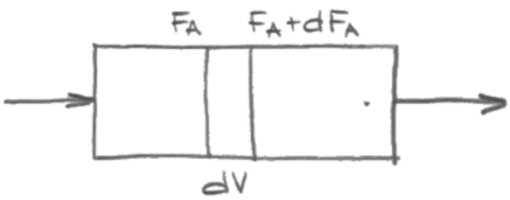


$$\boxed{n = \frac{\tau^2}{\sigma^2}} \quad , \quad n\text{- antal tankar}$$

3 Dispersionsmodellen:

Molflöde:

$$F_A = \underbrace{-D_A A_c \frac{dC_A}{dz}}_{\text{Fick's lag}} + \underbrace{U A_c C_A}_{\text{konvektiv transport}}$$



$$F_A - (F_A + dF_A) + r_A dV = 0$$

$$dV = A_c dz$$

$$-\frac{1}{A_c}\frac{dF_A}{dz} + r_A = 0$$

Differentiera F_A: $\dfrac{dF_A}{dz} = -D_a A_c \dfrac{d^2C_A}{dz^2} + A_c \dfrac{d(UC_A)}{dz}$

$$\frac{D_a}{U} \cdot \frac{d^2C_A}{dz^2} - \frac{dC_A}{dz} + \frac{r_A}{U} = 0 \qquad (*)$$

Bestämma D_a (effektiva diffusiviteten):

spårämnesförsök:

$$F_T = -D_a A_c \frac{dC_T}{dz} + U A C_T$$

tracer

MB över tracer (T):

$$-\frac{\partial F_T}{\partial z} = A_c \frac{\partial C_T}{\partial t}$$

$$D_a \frac{\partial^2 C_T}{\partial z^2} - U \frac{\partial C_T}{\partial z} = \frac{\partial C_T}{\partial t}$$

Dimensionslös form:

$$\psi = \frac{C_T}{C_{T_0}}, \quad \lambda = \frac{z}{L}, \quad \theta = \frac{tU}{L}$$

L - längden.

Man kan gå till dimensionslös form när man vill och hur man vill.

$$\frac{D_a}{UL} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \lambda^2} - \frac{\partial \psi}{\partial \lambda} = \frac{\partial \psi}{\partial \theta}$$

$$\boxed{\frac{UL}{D_a} = Pe_r}$$ Peclets tal

$$Pe = \frac{\text{hastigheten av transport med konvektion}}{\text{hastighet med diffusion / dispersion}}$$

$$= \frac{Uz}{D_a}$$

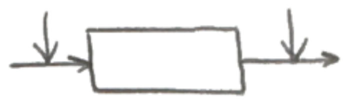
$Pe_r \rightarrow 0$, stor dispersion

$Pe_r \to \infty$, liten dispersion (omblandning), tub

pluggflöde

$$\frac{1}{Pe_r}\frac{\partial^2 \psi}{\partial \lambda^2} - \frac{\partial \psi}{\partial \lambda} = \frac{\partial \psi}{\partial \theta}$$

<u>Closed - Closed</u>



$$\frac{\sigma^2}{t_m^2} = \frac{2}{Pe_r} - \frac{2}{Pe_r^2}\left(1 - e^{-Pe_r}\right), \quad t_m = \tau$$

(man mäter precis före och precis efter)

<u>Open - Open</u>

$$t_m = \left(1 + \frac{2}{Pe_r}\right)\tau \quad \leftarrow \text{ specialfall, } t_m \neq \tau$$

$$\frac{\sigma^2}{t_m^2} = \frac{2}{Pe_r} - \frac{8}{Pe_r^2}$$

(*) (1:a ordn. reaktion)

$$\frac{D_a}{U}\frac{d^2 c_A}{dz^2} - \frac{dc_A}{dz} - \frac{kc_A}{U} = 0$$

$$\frac{D_a}{UL}\frac{d^2 \psi}{d\lambda^2} - \frac{d\psi}{d\lambda} - \frac{kL}{U}\psi = 0$$

$\psi_L = 1 - X = \ldots$ (uttryck finns på formelblad)

$q = \sqrt{1 + 4Da/Pe_r}$

ej flödet.

Da - Damköhlers tal

$$Da = \frac{\text{hastighet av konsum. av A från reaktion.}}{\text{hastighet av transport via konv.}}$$

$$Da = \frac{k C_{A_0}^{n} L A}{U A C_{A_0}} = k C_{A_0}^{n-1} \tau$$

Tankserie + Dispersionsmodell

för closed-closed:

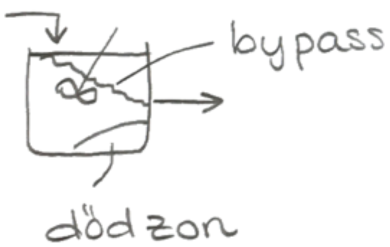
$$\sigma^2 = 2 t_m^2 \left(\frac{1}{Pe_r} - \frac{1}{Pe_r^2} \left(1 - e^{-Pe_r}\right)\right)$$

$$\sigma^2 = \frac{t_m^2}{n}$$

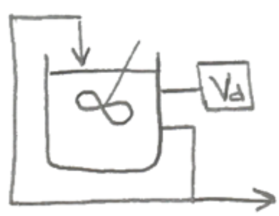
$\Rightarrow n$, antal tanker

Kombination av ideala reaktorer

verklig reaktor



Kan lösas mha:



$V = V_s + V_d$