Eksempel 4.2 Dehydrogenering av etan. *Følgende reaksjoner skjer i en kontinuerlig stasjonær reaktor*

$$C_2H_6 \rightarrow C_2H_4 + H_2 \quad [\xi_1 \text{ mol reagert}]$$

$$C_2H_6 + H_2 \rightarrow 2CH_4 \quad [\xi_2 \text{ mol reagert}]$$

der den siste reaksjonen er uønsket. Føden inneholder 85 mol% etan og resten inerter (I). Omsetningsgraden av etan er 0.501 og utbyttet av etylen er 0.471. Beregn sammensetningen av produktet og selektiviteten (av etylen i forhold til metan).

Vi velger som basis 100 mol føde. Vi bruker reaksjonsomfanget for de to reaksjonene til å uttrykke massebalanser (4.13) for komponentene

$$N_{C_2H_6} = 85 - \xi_1 - \xi_2 \tag{4.22}$$

$$N_{C_2H_4} = \xi_1$$

$$N_{H_2} = \xi_1 - \xi_2$$

$$N_{CH_4} = 2\xi_2$$

$$N_I = 15$$

hvor vi ønsker å bestemme ξ_1 *og* xi_2. *Den totale omsetningsgraden av etan er 0.501 dvs. fra (4.8)*

$$X_{C_2H_6} = \frac{N_{C_2H_6,0} - N_{C_2H_6}}{N_{C_2H_6,0}} = \frac{85 - N_{C_2H_6}}{85} = 0.501$$

og vi finner $N_{C_2H_6} = 42.4$ *mol. Utbyttet av etylen er 0.471 dvs. fra (4.17)*

$$Y = \frac{N_{C_2H_4} - N_{C_2H_4,0}}{N_{C_2H_6,0}} = \frac{N_{C_2H_4} - 0}{85} = 0.471 \tag{4.23}$$

vi finner $N_{C_2H_4} = 40.0$ *mol, dvs.*

$$\xi_1 = 40.0 \ [mol]$$

Massebalansen for etan (4.22) gir da

$$\xi_2 = 85 - 40.0 - 42.4 = 2.6 \ [mol]$$

og vi kan fra massebalansene bestemme alle produktmengdene. Vi finner

$$N_{C_2H_4} = 40, \ N_{H_2} = 37.4, \ N_{CH_4} = 5.2, \ N_I = 15, \ N_{tot} = 140$$

dvs. sammensetningen av produktstrømmen fra reaktoren er

$$C_2H_6: \ 30.3\%$$

$$C_2H_4: \ 28.5\%$$
$$H_2: \ 26.7\%$$
$$CH_4: \ 3.7\%$$
$$I: \ 10.7\%$$

og selektiviteten for dannelse av etylen fra etan er er

$$S = \frac{\xi_1}{\xi_2} = \frac{40}{2.6} = 15.4$$

(Sjekk: Fra (4.20) får vi reaksjonsutbyttet $Y_D = S/(S+1) = 0.939$ *og fra (4.21) har vi da at utbyttet er* $Y = Y_D X_{C_2H_6} = 0.939 \cdot 0.501 = 0.471$ *som stemmer med det som er oppgitt)*

Eksempel 4.3 Materialbalanse for metanolreaktor med likevekt.

Føden inn på en metanolreaktor har følgende sammensetning (i mol%)

$$CO: 3.8\%$$
$$CO_2: 2.0\%$$
$$H_2: 76.4\%$$
$$CH_3OH: 0.3\%$$
$$H_2O: 0.2\%$$
$$CH_4: 16.8\%$$
$$N_2: 0.5\%$$

hvor de to siste komponentene er inerter. Reaktoren opererer ved 100 bar og utløpstemperaturen er 270° C. Metanol kan dannes ved følgende to reaksjoner

$$CO + 2H_2 = CH_3OH \quad [\xi_1 \text{ mol reagert}]$$
$$CO_2 + 3H_2 = CH_3OH + H_2O \quad [\xi_2 \text{ mol reagert}]$$

Beregn sammensetningen av produktet når produktstrømmen inneholder 5.0% metanol og vi antar at "shift"reaksjonen

$$CO + H_2O = CO_2 + H_2$$

er i likevekt ved 270° C med likevektskonstant $K = 30$ *(regner på molfraksjon eller partialtrykkbasis).*

Merk at det kun er to uavhengige reakjoner her siden differansen av de to reaksjonene til metanol gir "shift"reaksjonen. Vi har gitt all informasjon om føden og har i tilegg to andre opplysninger. Siden det som nevnt er to