Øving 3

Betrakt følgende irreversibel gassfasereaksjon:

$$2A \rightarrow U + R + S$$

Reaksjonen er utført i en batchreaktor (trykkbeholder) ved 300 °C og 2 atm og med rent A ved start (t = 0). Reaksjonen foregikk isotermt og følgende verdier av totaltrykket (P_t) ble målt:

t (min)	P_t (atm)
0	2,0
6,0	2,2
9,8	2,3
14,5	2,4
20,7	2,5
28,5	2,6
40,5	2,7

Isoterm: $T = T_0 = 300°C = 573 K$

$y_{A0} = 1$

$P_{T0} = P_{A0} = 2$ atm

a) Finn et uttrykk for omsetningsgraden (X_A) som funksjon av totaltrykket, dvs. $X_A = f(P_t)$

a) Antar ideell gass, bruker den generelle formelen

$$V = V_0 (1 + \varepsilon X) \frac{P_0}{P} \cdot \cancel{\frac{T}{T_0}} \quad \text{Isoterm}$$

Siden det er en batchreaktor, er det rimelig å anta $V = V_0$

$$\Rightarrow (1 + \varepsilon X) \frac{P_0}{P} = 1$$

$$\Rightarrow \frac{P_0}{P} + \varepsilon X \frac{P_0}{P} = 1$$

$$X = \left(1 - \frac{P_0}{P}\right) \frac{P}{\varepsilon P_0}$$

$$X = \frac{P}{\frac{1}{2} \cdot 2} - \frac{1}{\frac{1}{2}}$$

$$\underline{\underline{X = P - 2}}$$

$$2A \rightarrow U + R + S$$

$$A \rightarrow \tfrac{1}{2} U + \tfrac{1}{2} R + \tfrac{1}{2} S$$

$$\Rightarrow \delta = \tfrac{1}{2} + \tfrac{1}{2} + \tfrac{1}{2} - 1 = \tfrac{1}{2}$$

$$\varepsilon = \delta \cdot y_{A0} = \tfrac{1}{2}$$

b) **Tegn kurven $C_A = g(t)$ på vanlig rutepapir**

b) Har antatt konstant volum

$$\Rightarrow C_A = C_{A0}(1 - X) = C_{A0}(1 - P + 2) = C_{A0}(3 - P)$$

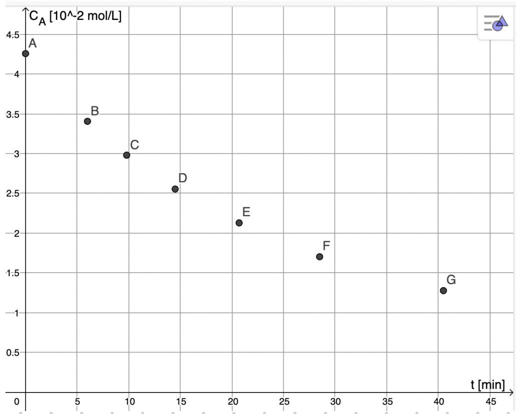
Ved ideell gasslov: $C_{A0} = \frac{N_{A0}}{V_0} = \frac{P_0}{RT_0} = \frac{2 \text{ atm}}{0{,}082 \frac{L \cdot atm}{K \cdot mol} \cdot 573 K}$

$$C_{A0} = 4{,}257 \cdot 10^{-2} \frac{mol}{L}$$

Data punktene blir da:

t (min)	P_t (atm)	X_A	C_A (mol/L)
0	2	0	0.04257
6	2.2	0.2	0.03405
9.8	2.3	0.3	0.0298
14.5	2.4	0.4	0.02554
20.7	2.5	0.5	0.02128
28.5	2.6	0.6	0.01703
40.5	2.7	0.7	0.01277
C_A0	0.04257		

Plotter C_A mot t:



c) Finn hastighetskonstanten (k) og reaksjonsordenen (α) ved 300 ºC i hastighetslikningen:

- $r_A = k \cdot C_A^{\alpha}$

c) Designlikningen Batchreaktor: $\frac{dN_A}{V dt} = r_A$

Ved konstant volum V_0: $\frac{1}{V_0} \frac{dN_A}{dt} = r_A$

$\boxed{\text{Ønsker variabelskifte: } N_A \to \frac{N_A}{V_0} \Rightarrow \frac{d\left(\frac{N_A}{V_0}\right)}{dN_A} = \frac{1}{V_0} \Rightarrow dN_A = V_0 \cdot d\left(\frac{N_A}{V_0}\right)}$

$$\frac{d\left(\frac{N_A}{V_0}\right)}{dt} = r_A \qquad \boxed{\frac{N_A}{V_0} = C_A}$$

$$\frac{dC_A}{dt} = r_A = -k \cdot C_A^{\alpha}$$

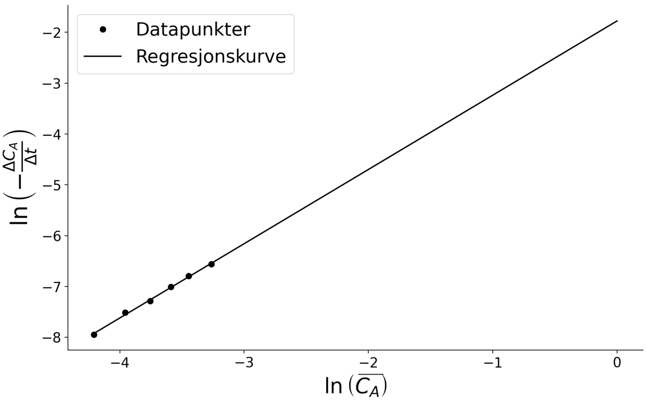
$$-\frac{dC_A}{dt} = k \cdot C_A^{\alpha}$$

$$\ln\left(-\frac{dC_A}{dt}\right) = \alpha \ln C_A + \ln k$$

Estimerer $\frac{dC_A}{dt}$ med $\frac{\Delta C_A}{\Delta t}$:

Plotter $\underbrace{\ln\left(-\frac{\Delta C_A}{\Delta t}\right)}_{y} = \underbrace{\alpha}_{a} \underbrace{\ln C_A}_{x} + \underbrace{\ln k}_{b}$ med lineær regresjon:

$= a \cdot x + b$



Får at $\alpha = 1{,}461$ og $\ln k = -1{,}776 \Rightarrow k = 0{,}169$

Dermed er $-r_A = 0{,}169\, C_A^{1{,}461}$

```python
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
t = np.array([0, 6, 9.8, 14.5, 20.7, 28.5, 40.5])
Pt = np.array([2, 2.2, 2.3, 2.4, 2.5, 2.6, 2.7])
X_A = Pt - 2
C_A0 = 2/(0.082*573)
C_A = C_A0*(3-Pt)
dCA = np.array([C_A[i+1]-C_A[i] for i in range(len(C_A)-1)])
dt = np.array([t[j+1]-t[j] for j in range(len(t)-1)])
snittCA = np.array([(C_A[i+1]+C_A[i])/2 for i in range(len(C_A)-1)])

x = np.log(snittCA)
y = np.log(-dCA/dt)

params, cov = np.polyfit(x, y, 1, cov=True)

a = params[0]
b = params[1]

print(f"alpha = {a:.3f}")
print(f"ln k = {b:.3f}")
print(f"k = {np.exp(b):.3f}")



x_values = np.linspace(0, x[-1], 100)
y_values = x_values * params[0] + params[1]
plt.figure(figsize=(12, 8))
plt.plot(x, y, 'o', color='black', label="Datapunkter")
plt.plot(x_values, y_values, color='black', label="Regresjonskurve")
ax = plt.gca()
ax.tick_params(axis='both', which='major', labelsize=15)
ax.tick_params(axis='both', which='minor', labelsize=12)
ax.spines['right'].set_color('none')
ax.spines['top'].set_color('none')
plt.xlabel(r"$\ln \left(\widebar{C_A}\right)$", size=23)
plt.ylabel(r"$\ln \left(-\frac{\Delta C_{A}}{\Delta t}\right)$", size=25)
plt.legend(fontsize=20)
plt.show()
```