



Aalto-yliopisto  
Kemian tekniikan  
korkeakoulu

# CHEM-C2130

# Reaktiotekniikka

*Kertaus ennen ensimmäistä välikoetta*  
*Reetta Karinen ja Tiia Viinikainen*

# Kurssijärjestelyt

## Kurssiin kuuluu

- Teoriaa
- Laskuja
- Palautettavia kotilaskuja
- Quiz-tehtäviä
- 2 välikoetta

- **Arvosteluperusteet**

- Maksimi 90 pistettä
- Läpipääsy 40 pistettä

	pisteitä
Välikokeet (2 x 20 p)	40 p
Kotilaskut (4 x 10 p)	40 p
Quiz-tehtävät (5 x 2 p)	10 p
Kurssin maksimi	90 p

# 1. Välikoe

ti 20.10.2020 klo 9-12

- MyCourses-työtilassa
- Ei tarvitse ilmoittautua erikseen

## Rästivälikoe

Voi suorittaa EXAM-tenttihuoneessa sähköisenä tenttinä

20.10.-3.11.2020

- Ilmoittautuminen <https://exam.aalto.fi/>
- Lisätietoja ja toimintaohjeet tenttiin  
<https://wiki.aalto.fi/display/OPIT/EXAM>

# Mitä saa olla mukana välikokeessa?

## Välikoe MyCoursesissa

- Materiaalia ei rajoitettu
- Laskentaan laskin, Excel ym.
- Kaavakokoelman käyttö suositeltavaa

## Rästivälikoe EXAMissa

- henkilöllisyystodistus
- tenttihuoneeseen ei saa viedä itse mitään tarvikkeita eikä vessaan voi lähteä kesken tentin
- Kaavakokoelma jaetaan tehtävien yhteydessä

## Hyödyllisiä kaavoja reaktorisuunnitteluun

Konversio:	$X_A = \frac{n_{A0} - n_A}{n_{A0}} \cdot 100 \%$	$X_A = \frac{\dot{n}_{A0} - \dot{n}_A}{\dot{n}_{A0}} \cdot 100 \%$	suhteena $X_A = \frac{n_{A0} - n_A}{n_{A0}}$
Selektiivisyys:	$S_D = \frac{n_D}{n_{A0} - n_A} \cdot 100 \%$	$S_D = \frac{\dot{n}_D}{\dot{n}_{A0} - \dot{n}_A} \cdot 100 \%$	
Saanto:	$Y_D = \frac{n_D}{n_{A0}} \cdot 100 = \frac{X_A S_D}{100} \%$	$Y_D = \frac{\dot{n}_D}{\dot{n}_{A0}} \cdot 100 \%$	
Reaktiolle:	$aA + bB \rightarrow cC + dD$ $A + \frac{b}{a}B \rightarrow \frac{c}{a}C + \frac{d}{a}D$ $\delta = \frac{d}{a} + \frac{c}{a} - \frac{b}{a} - 1$ $\varepsilon = \frac{n_{A0}}{n_{T0}} \left( \frac{d}{a} + \frac{c}{a} - \frac{b}{a} - 1 \right) = y_{A0} \delta$		
Arrheniuksen yhtälö:	$k(T) = A e^{\frac{-E}{RT}}$		

Ideaalikaasulle:

$$pV = n_T RT \rightarrow V = V_0 \left( \frac{p_0}{p} \right) \left( \frac{T}{T_0} \right) \left( \frac{n_T}{n_{T0}} \right) \rightarrow \dot{V} = \dot{V}_0 (1 + \varepsilon X_A) \frac{p_0}{p} \frac{T}{T_0}$$

ja  $P_i = y_i P_T = C_i RT$ , jossa R on kaasuvakio 8,314 (J/mol K)

Konsentraation riippuvuudet:

	Panosreaktori	Virtausreaktori
Konsentraatio	$C_A = \frac{n_A}{V} = \frac{n_{A0}(1 - X_A)}{V}$	$C_A = \frac{\dot{n}_A}{\dot{V}} = \frac{\dot{n}_{A0}(1 - X_A)}{\dot{V}}$
Vakiotilavuus/ tilavuusvirta	$C_A = C_{A0}(1 - X_A)$	$C_A = C_{A0}(1 - X_A)$
Muuttuva tilavuus/ tilavuusvirta	$V = V_0 \left( \frac{p_0}{p} \right) \left( \frac{T}{T_0} \right) (1 + \varepsilon X_A)$	$\dot{V} = \dot{V}_0 \left( \frac{p_0}{p} \right) \left( \frac{T}{T_0} \right) (1 + \varepsilon X_A)$
Konsentraatio tilavuuden muuttuessa	$C_A = \frac{C_{A0}(1 - X_A)}{1 + \varepsilon X_A} \frac{p}{p_0} \frac{T_0}{T}$	$C_A = \frac{C_{A0}(1 - X_A)}{1 + \varepsilon X_A} \frac{p}{p_0} \frac{T_0}{T}$
Komponentille j	$C_j = \frac{C_{A0}(\theta_j + \nu_j X_A)}{1 + \varepsilon X_A} \frac{p}{p_0} \frac{T_0}{T}$ $\nu_j$ = reaktion stökiometriakertoimet	$\theta_j = \frac{n_{j0}}{n_{A0}} = \frac{C_{j0}}{C_{A0}} = \frac{y_{j0}}{y_{A0}}$

Ideaalireaktoreiden mitoitusyhtälöt:

	Differentiaalimuoto	Integraalimuoto	Algebraalinen
Panosreaktori	$n_{A0} \frac{dX_A}{dt} = -r_A V$	$t = n_{A0} \int_{X_{A0}}^{X_{A1}} \frac{dX_A}{-r_A V}$	Ei
PFR	$\dot{n}_{A0} \frac{dX_A}{dV} = -r_A$	$V = \dot{n}_{A0} \int_{X_{in}}^{X_{out}} \frac{dX_A}{-r_A}$	Ei
CSTR	Ei	Ei	$V = \frac{\dot{n}_{A0}(X_{out} - X_{in})}{-r_A}$

Tila-aika:  $\tau = \frac{V}{V_0}$   $\tau = - \int_{C_{A0}}^{C_A} \frac{dC_A}{-r_A}$  (PFR)  $\tau = \frac{V}{V_0} = \frac{C_{A0} - C_A}{-r_A}$  (CSTR)

$[\tau] = s^{-1}$   $\tau = \frac{V_{kok}}{V_0} = \frac{n}{k} \left[ \left( \frac{C_{A0}}{C_{A1}} \right)^{\frac{1}{n}} - 1 \right]$  (CSTR-kaskadi)

Huom! Pätevät vain, kun tilavuus on vakio!

Energiatase:

$$\dot{Q} - \sum \dot{n}_{i0} \bar{C}_{Pi}(T - T_{in}) - \dot{n}_{A0} \cdot X_A \cdot [\Delta_r H^\circ(T_{ref}) + \Delta C_p(T - T_{ref})] = 0$$

Tasapainovakio reaktiolle  $mM \leftrightarrow rR + sS$

$$K_a = \frac{a_R^r a_S^s}{a_M^m} = \frac{y_R^r y_S^s}{y_M^m} \frac{p_R^r p_S^s}{p_M^m} = K_y K_p$$

$$K_c = \frac{C_R^r C_S^s}{C_M^m} \quad K_n = \frac{n_R^r n_S^s}{n_M^m}$$

$$K_a = K_p = K_y p_{tot}^{\Sigma \nu} = K_c (RT)^{\Sigma \nu} = K_n \left( \frac{p_{tot}(bar)}{n_{tot}} \right)^{\Sigma \nu}$$

missä  $\Sigma \nu = r + s - m$  stökiometriasta

Tasapainossa:  $\Delta_r G^\circ = -RT \ln K_a$

van't Hoffin yhtälö:  $\ln \frac{K_{a2}}{K_{a1}} = - \frac{\Delta_r H}{R} \left[ \frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right]$

## Hyödyllisiä integraaleja reaktorisuunnitteluun

$$\int_0^x \frac{dx}{1-x} = \ln \frac{1}{1-x}$$

$$\int_0^x \frac{dx}{(1-x)^2} = \frac{x}{1-x}$$

$$\int_0^x \frac{dx}{1+\varepsilon x} = \frac{1}{\varepsilon} \ln(1+\varepsilon x)$$

$$\int_0^x \frac{1+\varepsilon x}{1-x} dx = (1+\varepsilon) \ln \frac{1}{1-x} - \varepsilon x$$

$$\int_0^x \frac{1+\varepsilon x}{(1-x)^2} dx = \frac{(1-\varepsilon)x}{1-x} - \varepsilon \ln \frac{1}{1-x}$$

$$\int_0^x \frac{(1+\varepsilon x)^2}{(1-x)^2} dx = 2\varepsilon(1+\varepsilon) \ln(1-x) + \varepsilon^2 x + \frac{(1+\varepsilon)^2 x}{1-x}$$

$$\int_0^x \frac{dx}{(1-x)(\theta_B - x)} = \frac{1}{\theta_B - 1} \ln \left[ \frac{\theta_B - x}{\theta_B(1-x)} \right] \quad \text{kun } \theta_B \neq 1$$

$$\int_0^x \frac{dx}{ax^2 + bx + c} = \frac{-2}{2ax + b} + \frac{2}{b} \quad \text{kun } b^2 = 4ac$$

$$\int_0^x \frac{dx}{ax^2 + bx + c} = \frac{1}{a(p-q)} \ln \left( \frac{q}{p} \cdot \frac{x-p}{x-q} \right) \quad \text{kun } b^2 > 4ac$$

missä  $p$  ja  $q$  ovat yhtälön  $ax^2 + bx + c = 0$  juuret:

$$p, q = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

$$\int_0^x \frac{a+bx}{c+gx} dx = \frac{bx}{g} + \frac{ag-bc}{g^2} \ln \left( \frac{c+gx}{c} \right)$$

# Mitä kysytään...?

## Laskuja ja teoriaa

### Laskut

- Koetehtävät samantyyppisiä kuin kurssin luentoesimerkit ja laskutehtävät
- Laskutehtävien yhteydessä lisäkysymyksiä
  - Miksi...? Mitä tapahtuisi jos...? Miten parantaisit tätä prosessia..?

### Teoriakysymykset

- Erillisiä teoriakysymyksiä

# 1. välikokeen aihealueet

Teema	
1. Työkalupakki	1.1 Konversio, selektiivisyys, saanto 1.2 Reaktiot ja stoikiometria 1.3 Muita reaktiotekniikan käsitteitä
2. Reaktoreiden mitoitus	2.1 Reaktoriyypit. Sekoitussäiliöreaktori 2.2 Putkivirtausreaktori 2.3 Panosreaktori 2.4 Mitoituslaskuja
3. Reaktorit prosessissa	3.1 Reaktorit rinnan ja sarjassa 3.2 Levespiel plot 3.3.-3.4 Ainetaseet (HUOM! Ei laskuja tästä aiheesta välikokeeseen)



# Millaisia laskuja tentissä voisi olla...

- **Reaktorin mitoitus!**
  - Erilaiset reaktorit (CSTR, PFR, panos)
  - Erilaisissa olosuhteissa (mikä muuttuu jos esim. lämpötila muuttuu)
  - Reaktorit sarjassa ja rinnan (mitä syötetään mihinkin reaktoriin)
- Työkalupakin asioita kannattaa katsella, niitä tarvitaan myös mitoituksessa
- Levenspiel-plotin tulkintaa
- Ainetaseista (luentokerrat 3.3 ja 3.4) ei tule laskuja. Katsokaa kuitenkin teoriaa.
- Laskut eivät ole niin pitkiä ja monimutkaisia kuin kotilasku!
- Muistakaa mitoituksen askelmerkit!

# Reaktorimitoituksen askelmerkit

1. Valitaan mitoitussyhtälö sen mukaan, millainen reaktori on käytössä
2. Määritetään reaktionopeuslauseke
3. Lausutaan reaktionopeuslausekkeen konsentraatiot konversion funktiona. Mietitään, onko kyseessä reaktio, jossa tilavuus muuttuu – vaikuttaa konversion lausekkeeseen!
4. Yhdistetään kohtien 1-3 reaktiot ja ratkaistaan kysytty suure (aika, tilavuus, konsentraatio...)

# MyCourses-välikoe

- MC-työtilassa osio Välikoe
- Ohjeita kokeeseen nyt jo näkyvillä

**MyCourses** KOULUT CORONAVIRUS INFO PAI

CHEM-C2130 -  
Reaktioteknikka,  
07.09.2020-11.12.2020

Arvioinnit

- » Kurssin etusivu
- » Materiaalit
- » 1. Työkalupakki
- » 2. Reaktoreiden mitoitus
- » 3. Reaktorit prosesseissa
- » 4. Reaktorit ja termodynamiikka
- » 5. Reaktiionopeusyhtälön määrittäminen
- » **Välikoe**

Oma etusivu

Sivuston etusivu

CHEM-C2130 - Reakti

Oma etusivu / Omat kurssini / chem-c2130 - ...

## Välikoe

- Välikoe pidetään tiistaina 20.10.
- Välikoe tehdään itsenäisesti! Lii
- Välikokeessa on yksi kaikille pak
- Lisäksi vastataan kolmeen neljä
- Välikoeaika on 9-12. Lisäksi sinu
- jälkeen palauttaminen ei ole en
- Kurssin opettajat päivystävät Zc
- /j/63790415129
- Voit tehdä vastauksesi käsin tai
- kirjoitus näkyy palautetavassa ti
- Teitpä vastauksesi käsin tai koni
- Merkitse palautettaviin tiedoste

# MyCourses-välikoe, ohjeita

- Välikoe pidetään tiistaina 20.10.2020 klo 9-12. Tehtävät tulevat näkyviin tentin alkaessa.
- Välikoe tehdään itsenäisesti! Liian samanlaisia vastauksia käsitellään tenttivilppinä.
- Välikokeessa on yksi kaikille pakollinen tehtävä.
- Lisäksi vastataan kolmeen neljästä pienemmästä tehtävästä. Jos vastaat kaikkiin tehtäviin, huonoin jää pois arvioinnista
- Välikoeaika on 9-12. Lisäksi sinulla on aikaa klo 12:30 asti koostaa ja palauttaa vastauksesi tiedostoina palautuslaatikkoon. Puoli yhden jälkeen palauttaminen ei ole enää mahdollista, ellei sinulle ole myönnetty henkilökohtaista lisäaikaa.

# MyCourses-välikoe, ohjeita

- Kurssin opettajat päivystävät Zoomissa kokeen ajan. Jos sinulle tulee jotain kysymyksiä tai ongelmia, ota zoom-yhteys <https://aalto.zoom.us/j/63790415129>
- Voit tehdä vastauksesi käsin tai koneella. Käsinkirjoitetut paperit valokuvataan ja koostetaan tiedostoksi. Tarkista, että käsiala on selkeää, ja kirjoitus näkyy palautetavassa tiedostossa selvästi.
- Teitpä vastauksesi käsin tai koneella, kannattaa laittaa välivaiheita näkyviin.
- Merkitse palautettaviin tiedostoihin selvästi, mistä tehtävästä on kysymys.