

Øving 10 - Prosessteknikk

Oppgave 1: a) $n_1(\text{CO}) = n_0(\text{CO}) - \xi_1 + \xi_2 \quad (I)$

$n_1(\text{H}_2) = n_0(\text{H}_2) - 2\xi_1 - \xi_2 \quad (II)$

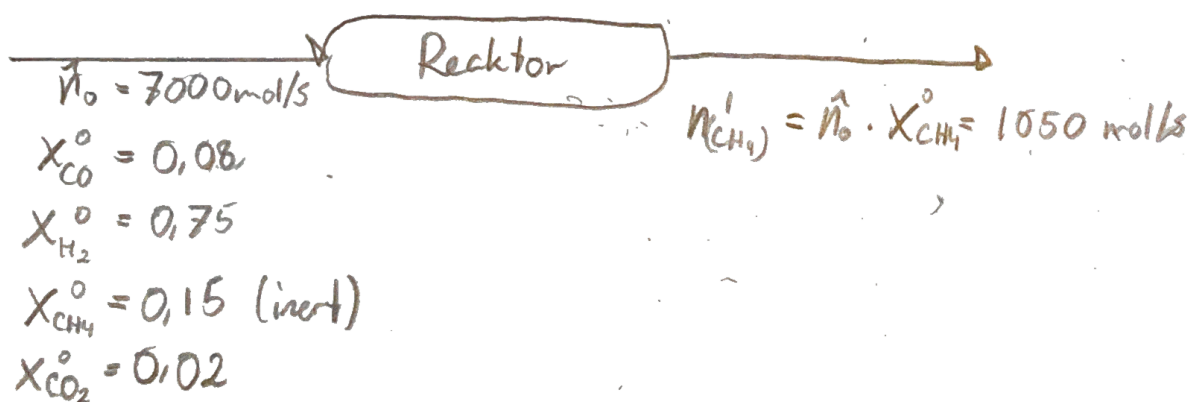
$n_1(\text{CH}_3\text{OH}) = n_0(\text{CH}_3\text{OH}) + \xi_1 \quad (III)$

$n_1(\text{CO}_2) = n_0(\text{CO}_2) - \xi_2 \quad (IV)$

$n_1(\text{H}_2\text{O}) = n_0(\text{H}_2\text{O}) + \xi_2 \quad (V)$

(Ser i b) at CH_4 er med i strømmen) $n_1(\text{CH}_4) = n_0(\text{CH}_4) \quad (VI)$

b)



Fra tekst: $0,70(X_{\text{CO}}^0 + X_{\text{CO}_2}^0)7000 = n_1(\text{CH}_3\text{OH}) \quad (VII)$

daant $\text{H}_2\text{O} = 40$

$\Rightarrow n_1(\text{H}_2\text{O}) = n_0(\text{H}_2\text{O}) + \xi_2 = \xi_2 = 40$

$\Rightarrow \underline{\xi_2 = 40}$

(VII) kombinert med (III) (+ $X_{\text{CH}_3\text{OH}} = 0$):

$\xi_1 = 0,70(0,08 + 0,02)7000 = 490$

$\Rightarrow \underline{\xi_1 = 490}$

Braker likning (I) - (VI) $\Rightarrow$

Fra tabellen: $\hat{n}_{\text{tot}} = 6020 \text{ mol/s}$

Komponent	Mengde i $\hat{n}_i$
CO	110 mol/s
CO ₂	100 mol/s
H ₂	4230 mol/s
H ₂ O	40 mol/s
CH ₄	1050 mol/s
CH ₃ OH	490 mol/s

c) Antar $\hat{n}_2$ er det samme jeg har kalt $\hat{n}_1$
 $T_0 = 160^\circ\text{C} = 433\text{K}$, $T_1 = 270^\circ\text{C} = 543\text{K}$

Energi balansen er gitt ved $H_1 - H_0 + Q = 0$
 $\Rightarrow H_1 - H_0 = Q$

Løser ved hjelp av delprosessmetoden, deler i 3 prosesser.

I) Nedkjøling til 25°C (for å kunne bruke SI)

II) reaksjon

III) Oppvarming av $\hat{n}_1$ til 270°C

$$\Rightarrow Q = q_1 + \Delta H_{rx} + q_3$$

Kommer til å trenge data fra SI, settes i tabell til høyre

Komponent	$\Delta H^\circ [\text{kJ/mol}]$	$C_p^\circ [\text{J/K}\cdot\text{mol}]$
CO	-111	29
CO ₂	-394	37
H ₂	0	29
H ₂ O	-242	34
CH ₄	-74	36
CH ₃ OH	-201	44

I): $q_1 = \sum$ energi avgitt av hver komponent avkjølt

Beregner per komponent, i: $\hat{n}_i^\circ \int_{T_0}^{25^\circ\text{C}} C_{p,i} dT$

$$(n_i^\circ = x_i^\circ \cdot \hat{n}_0) = n_i^\circ \cdot C_{p,i} (25 - 160) = n_i^\circ \cdot C_{p,i} (-135)$$

$$\Rightarrow \text{CO: } -2192,4 \text{ kJ/s}$$

$$\text{CO}_2: -699,3 \text{ kJ/s}$$

$$\text{H}_2: -20553,8 \text{ kJ/s}$$

$$\text{H}_2\text{O}: 0$$

$$\text{CH}_4: -5103 \text{ kJ/s}$$

$$\text{CH}_3\text{OH}: 0$$

$$\Rightarrow q_1 = -28,55 \text{ MJ/s}$$

Antar gassform på H₂O gjennom hele prosessen. (og resten av komponentene)

(II): Forokjelt i entalpi før og etter

$$\Delta H_{rx} = H_1 - H_0, \text{ setter inn verdier direkte fra b)}$$

$$= (-111(510 - 560) - 394(100 - 140) + 0 - 242(40 - 0) - 74(0) - 201(490 - 0)) \text{ kJ/s}$$

$$\Delta H_{rx} = -42460 \text{ kJ/s} = -42,46 \text{ MJ/s}$$

III) gjøres på tilsvarende måte som I)

ny likning, alle komponenter, j : $n_j' \cdot C_{p,j} \cdot (270 - 25)$

$$= n_j' \cdot C_{p,j} \cdot 245$$

n_j' hentet fra tabell i oppg b)

$$\text{CO} : 781,55 \text{ kJ/s}$$

$$\text{CO}_2 : 906,5 \text{ kJ/s}$$

$$\text{H}_2 : 30,05 \text{ MJ/s}$$

$$\text{H}_2\text{O} : 333,2 \text{ kJ/s}$$

$$\text{CH}_4 : 9,26 \text{ MJ/s}$$

$$\text{CH}_3\text{OH} : 5282,2 \text{ kJ/s}$$

$$\Rightarrow \text{totalt} = \underline{q_2 = 46,61 \text{ MJ/s}}$$

$$\text{Fra energibalansen: } Q = q_1 + \Delta H_{rx} + q_2 = (-28,55 - 42,46 + 46,61) \text{ MJ/s}$$

$$\Rightarrow \underline{Q = -24,4 \text{ MJ/s}} \quad \Leftarrow \text{Må altså fjerne } 24,4 \text{ MJ/s (Varme)}$$

d) - Vi vet fra a) og b) at $\xi_1 = n_{\text{CH}_3\text{OH}} = 490$
 ξ_2 vil være ukjent

$$K_2 = 0,016 = \frac{p_{\text{CO}} p_{\text{H}_2\text{O}}}{p_{\text{CO}_2} p_{\text{H}_2}} = \frac{n_{\text{CO}} \cdot n_{\text{H}_2\text{O}}}{n_{\text{CO}_2} \cdot n_{\text{H}_2}}$$

trenger ikke gjøre

Omregninger på grunn av at # mol er likt på begge sider av rx.

Kombinerer med MB fra a), og setter inn i scipy.optimize

$$\text{for at } \underline{\xi_2 = 50,32 \text{ mol/s}}$$

finner tellene ved molbalanser $\Rightarrow$
 fra a)

(for ikke fastsatt = 80,41 mol/s)
 (hvorfor?)

Komponent	mengde i $\hat{n}$ [mol/s]
CO	120,32
CO ₂	89,68
H ₂	4219,68
H ₂ O	50,32
CH ₄	1050
CH ₃ OH	490

e) for en likevekt er $\Delta_{rx}G^\circ = -RT \ln K$

$$T = 270^\circ\text{C} = 543\text{K}$$

Komponent	$\Delta G^\circ [\text{kJ/mol}]$
CO	-137
H ₂	0
CH ₃ OH	-163

$$\ln K = \frac{\Delta_{rx}G^\circ}{-RT}$$

$$\Rightarrow K = e^{-\frac{\Delta_{rx}G^\circ}{RT}}$$

verdier hentet fra c)

$$\Delta_{rx}G^\circ = \Delta_{rx}H^\circ - T \cdot \Delta_{rx}S^\circ$$

Rx foregår ved 270°, dette må reguleres

$$\text{Finnes } \Delta_{rx}H^\circ = \Delta_{rx}H^\circ + \int_{298\text{K}}^{543\text{K}} C_{p,rx} dT$$

$$= (-90 \cdot 10^3 + (-43 \cdot 245)) \text{ J/mol}$$

$$= -100,54 \text{ kJ/mol}$$

$$\text{Finnes } \Delta_{rx}G^\circ = \Delta_{rx}S^\circ + \int_{298}^{543\text{K}} C_{p,rx} \frac{dT}{T}$$

$$= \Delta_{rx}S^\circ + (-43 \left(\ln \frac{543}{298} \right))$$

$$= 214,77 \text{ J/(K}\cdot\text{mol)} - 25,8 \text{ J/(K}\cdot\text{mol)}$$

$$= -240,57 \text{ J/(K}\cdot\text{mol)}$$

$$C_{p,rx} = (44 - (2 \cdot 29 + 29)) \text{ J/(K}\cdot\text{mol)}$$

$$= -43 \text{ J/(K}\cdot\text{mol)}$$

$$\Delta_{rx}H^\circ = (-201 - (-111)) \text{ kJ/mol}$$

$$= -90 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta_{rx}G^\circ = (-163 - (-137)) \text{ kJ/mol}$$

$$= -26 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta_{rx}G^\circ = \Delta_{rx}H^\circ - T \cdot \Delta_{rx}S^\circ$$

$$\Rightarrow \Delta_{rx}S^\circ = \frac{\Delta_{rx}H^\circ - \Delta_{rx}G^\circ}{T}$$

$$= \frac{(-90 - (-26)) \text{ kJ/mol}}{298\text{K}}$$

$$= 214,77 \text{ J/(K}\cdot\text{mol)}$$

$$\Rightarrow \Delta_{rx}G = \Delta_{rx}H - T \cdot \Delta_{rx}S = -100,54 \text{ kJ/mol} - 543\text{K} \cdot (-240,57 \text{ J/(K}\cdot\text{mol)})$$

$$\Rightarrow \Delta_{rx}G = 30,09 \text{ kJ/mol}$$

$$\Rightarrow K = 0,00127$$

Beregn Q:

$$Q = \frac{a_{\text{CH}_3\text{OH}}}{a_{\text{H}_2}^2 \cdot a_{\text{CO}}} = \frac{X_{\text{CH}_3\text{OH}}}{X_{\text{H}_2}^2 \cdot X_{\text{CO}}} \cdot \frac{1}{\left(\frac{P}{P_0}\right)^2} = \frac{(7/86)}{0,7^2 \cdot 0,02} \cdot \frac{1}{90^2}$$

$$\left[a_i = x_i \frac{P}{P_0} \right]$$

$$\Rightarrow Q = 0,00102$$

beregn x_i ved data fra tabellen på forrige side, totalt 6020 mol

Q < K, så reaksjonen er ikke i likevekt, men er nærmere å være det.