



Norges
teknisk–naturvitenskapelige
universitet
Institutt for kjemisk
prosessteknologi

TKP4120

Prosessteknikk

Vår 2020

Øving P1

Relevant bakgrunnstoff: Kapittel 2, Øving 1

1 Ligningssettet i Oppgave 1 i Øving 1 skal løses ved hjelp av Python. Om du ikke har gjort oppgave 1a-c i Øving 1 bør du løse disse oppgavene først for å sette opp det riktige ligningssystemet.

- a) Sett opp et enkelt flytskjema for prosessen, og skriv opp ligningene som må løses for å finne de ukjente massestrømmene. Lag en oversikt over kjente og ukjente variabler i ligningssettet.
- b) Skriv *kort* hvordan du vil sette opp et script for å løse ligningssettet. Bruk gjerne stikkordsform.
- c) Lag en ny fil `oppgave1.py`. Skriv en kort *header* som inneholder:
 - Navn
 - Dato
 - Kort beskrivelse av hva dette scriptet gjør.

Løs ligningssettet ved å bruke `scipy.optimize.root()` som ligningsløser.

Varmekapasitet som funksjon av trykk

I denne oppgaven skal vi lage funksjoner som kan brukes til effektive beregninger.

Varmekapasitet ved konstant trykk, $c_p(T)$, er ofte tilnærmet som polynomial funksjon av temperatur. Vi skal her bruke sammenhengen gitt i ligning 1 til å beregne varmekapasitet.

$$c_p(T) = a + bT + cT^2 + dT^3 \text{ [J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}] \quad (1)$$

Parametrene a , b , c , og d er gitt for noen utvalgte komponenter i tabell 1.

Tabell 1: Data for beregning av varmekapasitet som funksjon av temperatur.

Komp.	$a \text{ [J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}]$	$b \text{ [J mol}^{-1} \text{ K}^{-2}]$	$c \text{ [J mol}^{-1} \text{ K}^{-3}]$	$d \text{ [J/mol/K}^{-4}]$
CO	30,87	$-1,285 \cdot 10^{-2}$	$2,789 \cdot 10^{-5}$	$-1,272 \cdot 10^{-8}$
H ₂	27,14	$9,274 \cdot 10^{-3}$	$-1,381 \cdot 10^{-5}$	$7,645 \cdot 10^{-9}$
CH ₄	19,25	$5,213 \cdot 10^{-2}$	$1,197 \cdot 10^{-5}$	$-1,132 \cdot 10^{-8}$
N ₂	31,15	$-1,357 \cdot 10^{-2}$	$2,680 \cdot 10^{-5}$	$-1,168 \cdot 10^{-8}$
CH ₃ OH	21,15	$7,092 \cdot 10^{-2}$	$2,587 \cdot 10^{-5}$	$-2,852 \cdot 10^{-8}$

Relevant bakgrunnstoff: Tilstandsligninger (A1-A5)

- 2 a) Lag en funksjon `HeatCapacity(T, coeff)` som returnerer varmekapasitet for en komponent ved en gitt temperatur. Funksjonen skal ta inn følgende som argument: Temperatur T (float) og polynomkoeffisienter `coeff` (liste).
Polynomkoeffisientene i tabell 1 kan hentes fra filen `cp_data.txt`.
- b) En kjemisk enhetsoperasjon involverer ofte en endring i temperatur fra innløp til utløp, et eksempel på en slik operasjon er varmevekslere. Da bruker vi ofte størrelsen *midlere varmekapasitet*, $\bar{c}_p(T)$. Midlere varmekapasitet er definert i ligning 2¹

$$\bar{c}_p = \frac{\int_{T_0}^{T_1} c_p(T) dT}{T_1 - T_0} \quad (2)$$

Lag en funksjon `MeanHeatCapacity(T0, T1, coeff)` som returnerer midlere varmekapasitet for en komponent over et temperaturintervall T_0 til T_1 . Funksjonen skal ta inn nedre integrasjonsgrense T_0 (float), øvre integrasjonsgrense T_1 (float) og polynomkoeffisienter `coeff`.

Tips: Integrer polynomet i ligning 2 for hånd før du skriver koden.

- c) Beregn c_p for hver av komponentene i tabell 1 for $T = 450 \text{ K}$.

¹Se Skogestad kap. A.13.2

- d) Beregn $\overline{c_p}$ for hver av komponentene i tabell 1 i temperaturområdet [300, 600] K.

NB: Funksjonene fra denne oppgaven kommer til nytte senere i kurset.

Relevant bakgrunnstoff: Molbalanser med reaksjon (kap. 3)

3 Molbalanser

Vi skal her sette opp molbalanser for en prosess og hvordan vi kan bruke Python for å sette opp en enkel modell for prosessen.

Proessen vi skal studere er produksjon av propen, C_3H_6 , ved dehydrogenering av propan, C_3H_8 . Dette skjer katalytisk under følgende reaksjon:



Det fødes ren propan rett til reaktoren. Dehydrogenering av propan skjer i reaktoren. Produktene blir deretter separert i en separator.

Gitte opplysninger:

- Omsetningsgrad over reaktoren er $X = 0.80$.
 - Molmengde i innløpsstrømmen er $\hat{n}_1 = 100 \text{ mol s}^{-1} C_3H_8$.
 - Splittfaktor over separator: $s = [0.01 \quad 0.9 \quad 0.99]$ for hver av komponentene C_3H_8 , C_3H_6 , H_2 , der tallet angir andel (i mol) av komponenten som går ut i toppstrømmen av separatoren. Resten går ut i bunnstrømmen.
- a) Tegn en figur for prosessen hvor du gir et nummer til hver strøm. Skriv inn alle kjente størrelser. Bruk gjerne følgende notasjon: $\hat{n}_i$ for total molstrøm i strøm i , x_i^j for molfraksjon for komponent j i strøm i .
- b) Marker systemgrenser og sett opp molbalanser for *reaktoren*
- c) Sett opp ligninger for alle ukjente i utstrømmen fra reaktoren. Bruk gjerne støikiometrisk koeffisient ν og reaksjonsomfang ξ .
- d) Marker systemgrenser og sett opp molbalanser for *separatoren*
- e) Finn et uttrykk for alle ukjente i utstrømmene fra separatoren.
- f) Lag en modell av prosessen i Python. Beregn sammensetning og total molstrøm for de ukjente strømmene.

Modellen kan bestå av en enkelt python-fil, med følgende hoveddeler:

- En kort *header*.
- Spesifisering av alle kjente størrelser.
- Nødvendige mellomregninger.
- Løsning av ligningene (balansene)

- Utskrift av sammensetning og total molstrøm for alle strømmer til skjerm.

Til slutt kan du prøve modellen din ved å endre de ulike splittfaktorene. Kommenter effekten av å endre splittfaktor for hver av komponentene.

Utvalgte tallsvar:

Merk at som følge av avrundingsforskjeller kan det forekomme at dine tallsvar avviker noe fra disse.

[1] d) $\hat{m}_1 = 41,69 \text{ kg s}^{-1}$, $\hat{m}_2 = 19,35 \text{ kg s}^{-1}$, $\hat{m}_3 = 38,96 \text{ kg s}^{-1}$

[2] d) $c_p^{\text{CO}}(T = 450 \text{ K}) = 29,58 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}$

e) $\overline{c_p}$ for CO i temperaturområdet $[300, 600] \text{ K} = 29.66 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}$

[3] Toppstrøm: $\hat{\mathbf{n}}_3 = [0.200 \quad 72.0 \quad 79.2]$, bunnstrøm: $\hat{\mathbf{n}}_4 = [19.8 \quad 8.00 \quad 0.800]$