

IPT toets 1 - 08-05-2015, 10:45-12:30

Cursus: 4051IPTECY Inleiding ProcesTechnologie
Docenten: F. Kapteijn & V. van Steijn

- Lees elke vraag goed door voordat je begint
 - Schrijf op elk blad je naam en studentnummer en nummer alle bladen
 - Gebruik een pen, geen potlood
 - Schrijf op welke berekeningen je uitvoert, de weg naar het antwoord is minstens zo belangrijk als het antwoord zelf
 - Geef bij getallen ook de bijbehorende eenheden
 - Je kunt in totaal **65** punten halen. De punten zijn per vraag en per deelvraag aangegeven, verdeel je tijd goed
 - Het is alleen toegestaan om een gewone rekenmachine en een handgeschreven A4-tje te gebruiken, andere zaken zoals boek en grafische rekenmachine zijn niet toegestaan
 - Smartphones dienen uitgezet te zijn
-

Vraag 1 (3 pt) Definities

Leg uit wat de volgende algemene begrippen betekenen:

- (a) "Gauge pressure" (**1pt**)
- (b) "Yield" (**1 pt**)
- (c) "Critical pressure" (**1 pt**)

Vraag 2 (7 pt)

Benodigde gegevens voor deze opgave:

- Molmassa's: H=1 g/mol, O=16 g/mol, S=32 g/mol, N=14 g/mol, Na=23 g/mol
 - Gasconstante $R = 0.08314 \text{ L bar / (mol K)}$
- (a) Bereken de SG van een stroom perslucht (N_2 molfractie 0.79, rest O_2) bij 20 °C en 10 bar. Je kunt dit als een ideaal gas beschouwen. (**4 pt**)
- (b) Zwavelzuur met massafractie 0.20 H_2SO_4 in water moet geneutraliseerd worden met een loogoplossing (25 gewichts% NaOH in water). In welke massaverhouding zwavelzuur/loog moeten deze gemengd worden? (**3 pt**)

-- vervolg op volgende pagina ---

Vraag 3 (55 pt) Ammoniaksynthese

Ammoniak wordt in grote fabrieken gemaakt door stikstof en waterstof te laten reageren met behulp van een katalysator bij hoge druk (100 atm) en temperatuur (700 K). Het proces draait dag en nacht door, en ziet er als volgt uit: een ingangsstroom ① die N_2 en H_2 bevat in stoichiometrische verhouding wordt gemengd met een recycle-stroom ⑤ en deze gecombineerde stroom ② gaat de reactor in. De stroom ③ die de reactor uitgaat is 320 mol/minuut bevat 33.3 mol% NH_3 . Deze stroom wordt gevoed aan een koel-unit, waarin het grootste deel van de ammoniak condenseert. Aan de vloeistofuitgang van de koel-unit verkrijgen we een productstroom ④ van pure ammoniak. Het gas dat de koel-unit verlaat bevat N_2 , H_2 en nog 1.00 mol% niet gecondenseerde NH_3 damp, en wordt teruggevoerd als de recycle-stroom ⑤.

- (a) Geef de meest algemene vorm van de materiaalbalans. (1 pt)
- (b) Leg gemotiveerd uit welke termen je kunt weglaten in (a) indien je het hele proces beschouwt: (1) met molecuulbalansen, (2) met atoombalansen. (2 pt)
- (c) Geef de reactievergelijking voor de reactie in de reactor. (1 pt)
- (d) Teken en label een stromingsdiagram van dit proces en verwerk daarin alle relevante informatie die gegeven is in de beschrijving van het proces. (8 pt)
- (e) Voer een complete vrijheidsgradenanalyse uit voor het hele proces én over de subonderdelen; benoem daarbij expliciet welke parameters onbekend zijn en welke relaties gebruikt kunnen worden bij het oplossen. Leg op basis van deze analyse uit welke subsystemen achtereenvolgens te analyseren om alle onbekenden op te lossen. (12 pt)

Uit (e) zou moeten volgen dat alle onbekenden uitgerekend kunnen worden; mocht je hier niet op uitkomen en bijvoorbeeld 1 gegeven tekort komen, neem dan dat gegeven aan om opgave (f) te kunnen maken. Specificeer in dat geval duidelijk wat je hebt aangenomen!

- (f) Bereken hoeveel mol/min aan ammoniak de koeler verlaat en laat zien dat dit gelijk is aan 104 mol/min. Bepaal ook de grootte van de recyclestroom (mol/min) en de molfractie N_2 in de recyclestroom en laat zien dat deze gelijk zijn aan 216 mol/min en 0.248, respectievelijk. (12 pt)

-- vervolg op volgende pagina ---

- (g) Bepaal het moldebiet en samenstelling van de stroom aan de ingang van de reactor. **(7 pt)**
- (h) Bereken de 'overall conversion' voor het proces en de 'single-pass conversion' over de reactor. Doe je dat voor N_2 of voor H_2 ? Mocht je de benodigde waarden niet hebben gevonden in de vorige vragen, druk dan de conversies uit in de onbekenden. **(3 pt)**
- (i) Gebruik de grafiek en gegevens op de volgende pagina om te bepalen wat het volumedebiet is van de recyclestroom (temperatuur van $27.0\text{ }^\circ\text{C}$, druk 100 atm)? Is dit een ideaal gasmengsel? **(6 pt)**
- (j) Dit flowschema is niet compleet, er is een spui ("purge") nodig. Waar moet die geplaatst worden en waarom is zo'n spui nodig? **(3 pt)**

-- einde toets 1 ---

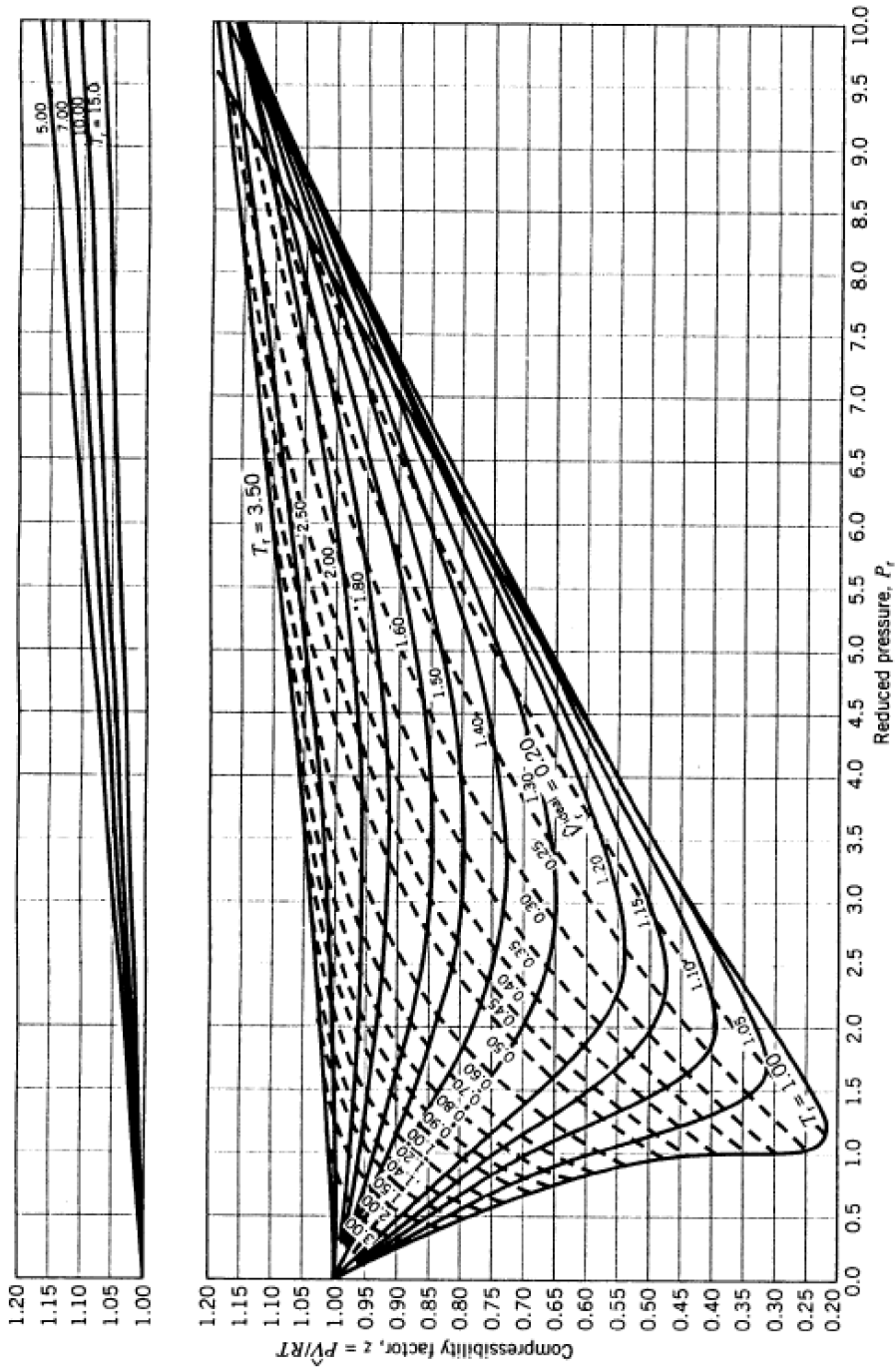


Figure 5.4-3 Generalized compressibility chart, medium pressures. (From D. M. Himmelblau, *Basic Principles and Calculations in Chemical Engineering*, 3rd Edition, copyright © 1974, p. 176. Reprinted by permission of Prentice Hall, Inc., Englewood Cliffs, NJ.)

Informatie over kritische temperaturen en drücken:

$p_c(\text{N}_2) = 33.5 \text{ atm}$

$p_c(\text{H}_2) = 12.8 \text{ atm}$

$p_c(\text{NH}_3) = 111.3 \text{ atm}$

$T_c(\text{N}_2) = 126.2 \text{ K}$

$T_c(\text{H}_2) = 33.3 \text{ K}$

$T_c(\text{NH}_3) = 405.5 \text{ K}$

Gasconstante: $R = 0.08206 \text{ L atm / (mol K)}$

Eindantwoorden IPT toets 1 - 08-05-2015, 10:45-12:30

Cursus: 4051IPTECY Inleiding ProcesTechnologie
Docenten: F. Kapteijn & V. van Steijn

Opgave 1

(a) [1 pt]

gauge pressure is the pressure relative to atmospheric pressure: $P_{\text{gauge}} = P_{\text{abs}} - P_{\text{atm}}$.

(b) [1 pt]

Yield:
$$\frac{\text{moles of desired product formed}}{\text{moles that would have been formed if there were no side reactions and the limiting reactant had reacted completely}} \quad (4.6-4)$$

(c) [1 pt]

- The *critical temperature* T_c of a species is the highest temperature at which isothermal compression of the species vapor results in the formation of a separate liquid phase, and the *critical pressure* is the pressure at which that phase forms. Isothermal compression of a species

Opgave 2

(a) [4 pt]

Oplosstrategie:

1. Neem als basis 100 mol perslucht
2. Gebruik de molecuulgewichten om de massa van 100 mol perslucht uit te rekenen.
3. Gebruik de ideale gaswet om het volume van 100 mol perslucht uit te rekenen.
4. Nu massa en volume bekend zijn geeft een deling de dichtheid; deze is om te rekenen naar de Specific Gravity via de dichtheid van water bij 4 °C.

Uitwerken geeft:

$$SG = \rho / \rho_w = 0.012$$

(b) [3 pt]

Oplosstrategie:

1. Neem een basis aan bijvoorbeeld 1 mol OH^- (in de loogoplossing), die met 1 mol H^+ moet worden geneutraliseerd.

2. Reken uit hoeveel liter van de waterige loogoplossing nodig is voor 1 mol OH^- .
3. Reken uit hoeveel liter van de waterige zuur oplossing nodig is voor 1 mol H^+ .

Uitwerken geeft:

$$\text{Massaverhouding (zuur/loog)} = 245 / 160 = 1.53$$

Opgave 3

(a) [1 pt]

$$\text{Accumulatie} = \text{input} + \text{generatie} - \text{output} - \text{consumptie}$$

(b) [2 pt]

(1) Moleculuulbalansen

- Accumulatie = 0 bij steady state (1 punt)

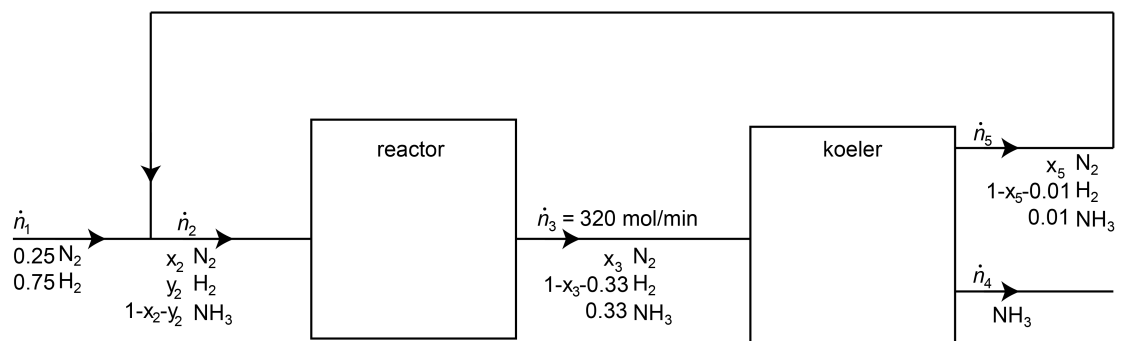
(2) Atoombalansen

- Naast accumulatie = 0 (steady state), ook
- Generatie = 0 & consumptie = 0, want atomen worden niet gegenereerd of geconsumeerd (1 punt)

(c) [1 pt]



(d) [8 pt]



(e) [12 pt]

Hele proces (op basis van atoombalans, zie p. 129)

2 onbekenden (\dot{n}_1, \dot{n}_4)

- 1 **onafhankelijke** atoombalans (let op: atoombalans voor N is hetzelfde als voor H)
 - 0 extra informatie
-

DF=1

Koeler (Op basis van atoombalansen)

4 onbekenden ($\dot{n}_4, \dot{n}_5, x_3, x_5$)

- 2 onafhankelijke atoombalans (N,H)
 - 1 extra informatie (“N₂ H₂ stoichiometrisch”)
-

DF=1

Koeler (opnieuw, nu op basis van molecuulbalansen)

4 onbekenden ($\dot{n}_4, \dot{n}_5, x_3, x_5$)

- 3 onafhankelijke molecuulbalansen (N₂, H₂, NH₃)
 - 1 extra informatie (“N₂ H₂ stoichiometrisch”)
-

DF= 0

Mengpunt (op basis van molecuulbalansen)

6 onbekenden ($\dot{n}_1, \dot{n}_2, x_2, y_2, \dot{n}_5, x_5$)

- 3 onafhankelijke molecuulbalansen (N₂, H₂, NH₃)
 - 0 additionele relaties
-

DF= 3

Oplosstrategie

1. Koeler (DF=0),

- Oplossen geeft: we $\dot{n}_4, \dot{n}_5, x_3, x_5$

2. Hele proces

- Voor oplossen koeler: DF=1

- Na oplossen koeler: \dot{n}_4 bekend, dus $DF=0$,
- Oplossen geeft ook \dot{n}_1

3. Mengpunt

- Voor oplossen koeler & hele proces: $DF=3$
- Na oplossen koeler & hele proces: $\dot{n}_1, \dot{n}_5, x_5$ bekend, dus $DF=0$.
- Oplossen geeft ook \dot{n}_2, x_2, y_2

Hiermee hebben we alle onbekende opgelost.

(f) [12 pt]

Analyse koeler

Gebruik informatie "stoichiometrisch"

Fractie N_2 : Fractie H_2 is als 1:3.

Hiermee kun je x_3 bepalen:

$$\text{Dus } x_3 / (1-x_3 - 1/3) = 1/3 \rightarrow x_3 = 1/6 = 0.167$$

Molecuulbalansen

$$\begin{aligned} N_2: & \quad x_3 \dot{n}_3 & & = x_5 \dot{n}_5 \\ H_2: & \quad (1-x_3 - 0.33) \dot{n}_3 & & = (1-x_5 - 0.01) \dot{n}_5 \\ NH_3: & \quad 0.33 \dot{n}_3 & & = \dot{n}_4 + 0.01 \dot{n}_5 \end{aligned}$$

Drie vergelijkingen met drie onbekenden; oplossen geeft

$$\dot{n}_5 = \mathbf{215.5 \text{ mol/min}}$$

$$x_5 = \mathbf{0.248}$$

$$\dot{n}_4 = 104.5 \text{ mol / min}$$

(g) [7 pt]

Analyse hele proces

$$\text{Atoombalans N: } 2 \cdot 0.25 \cdot \dot{n}_1 = \dot{n}_4$$

(atoombalans H zou dezelfde vergelijking opleveren)

$$\text{Dus: } \dot{n}_1 = \dot{n}_4 / 0.5 = 208.8 \text{ mol/min}$$

Analyse mengpunt

Molecuulbalansen

$$\begin{aligned} N_2: & \quad 0.25 \dot{n}_1 + x_5 \dot{n}_5 & & = x_2 \dot{n}_2 \\ H_2: & \quad 0.75 \dot{n}_1 + (1-x_5-0.01) \dot{n}_5 & & = y_2 \dot{n}_2 \\ NH_3: & \quad 0 \dot{n}_1 + 0.01 \dot{n}_5 & & = (1-x_2-y_2) \dot{n}_2 \\ \text{Alternatief: totaal: } & \quad \dot{n}_1 + \dot{n}_5 & & = \dot{n}_2 \end{aligned}$$

Oplossen geeft:

$$\dot{n}_2 = 424.5 \text{ mol/min}$$

$$x_2 = 0.249$$

$$y_2 = 0.746$$

(h) [3 pt]

Overall conversion:

$$N_2 \text{ proces in: } 0.25 * \dot{n}_1$$

$$N_2 \text{ proces uit: } 0$$

$$\text{Overall Conversion: } 100\% * (0.25 * \dot{n}_1 - 0) / 0.25 * \dot{n}_1 = 100\%$$

Single pass conversion:

$$N_2 \text{ reactor in: } x_2 * \dot{n}_2$$

$$N_2 \text{ reactor uit: } x_3 * \dot{n}_3$$

$$\text{Single pass conversion: } \frac{100\% * (x_2 * \dot{n}_2 - x_3 * \dot{n}_3)}{x_2 * \dot{n}_2} = 49.5\%$$

N_2 of H_2 ?

maakt niet uit

(i) [6 pt]

$T_c(N_2)$	y_{N_2}	$T_c(H_2)$	y_{H_2}	$T_c(NH_3)$	Y_{NH_3}	T'_c	T_{proces}	T_r
K		K		K		K	K	
126.2	$x_5=0.248$	33.3	$1-x_5-0.01=0.99-0.248$	405.5	0.01	66	$273.15+27=300$	$300/66=4.5$

$p_c(N_2)$	y_{N_2}	$p_c(H_2)$	y_{H_2}	$p_c(NH_3)$	Y_{NH_3}	p'_c	p_{proces}	p_r
atm		atm		atm		atm	atm	
33.5	$x_5=0.248$	12.8	$1-x_5-0.01=0.99-0.248$	111.3	0.01	24.9	100	$100/24.9=4.0$

$$T'_c = 0.248 \times 126.2 + 0.74 \times (33.3 + 8) + 0.01 \times 405.5 = 66 \text{ K}$$

$$p'_c = 0.248 \times 33.5 + 0.74 \times (12.8 + 8) + 0.01 \times 111.3 = 24.9 \text{ atm}$$

$$T_r = 300/66 = 4.5$$

$$p_r = 100/24.9 = 4.0$$

From compressibility graph:

$Z_m = 1.07$ dus, significante afwijking

$$\dot{V}_5 = z \dot{n}_5 RT/p = (1.07 * 215.5 * 0.08206 * 300) / 100 = 55.7 \text{ L/min} \quad \text{t}$$

(j) [3 pt]

Waar: recycle

Waarom: Nodig omdat invoer niet exact stochiometrisch kan zijn of verontreinigingen kan bevatten