

TKP4120
Prosjektoppgave
CO₂-fangst
Vår 2025

Prosjektoppgaven omhandler prosessen *post-combustion* CO₂-fangst (se Figur 1). *post-combustion* vil si at CO₂-gassen fjernes *etter* en forbrenningsprosess. Denne forbrenningsprosessen kan for eksempel være et gasskraftverk. Vi skal i resten av oppgaveteksten bruke begrepet "CO₂-fangst" om denne prosessen, men merk at det også finnes andre varianter av CO₂-fangst (f.eks. *pre-combustion*).

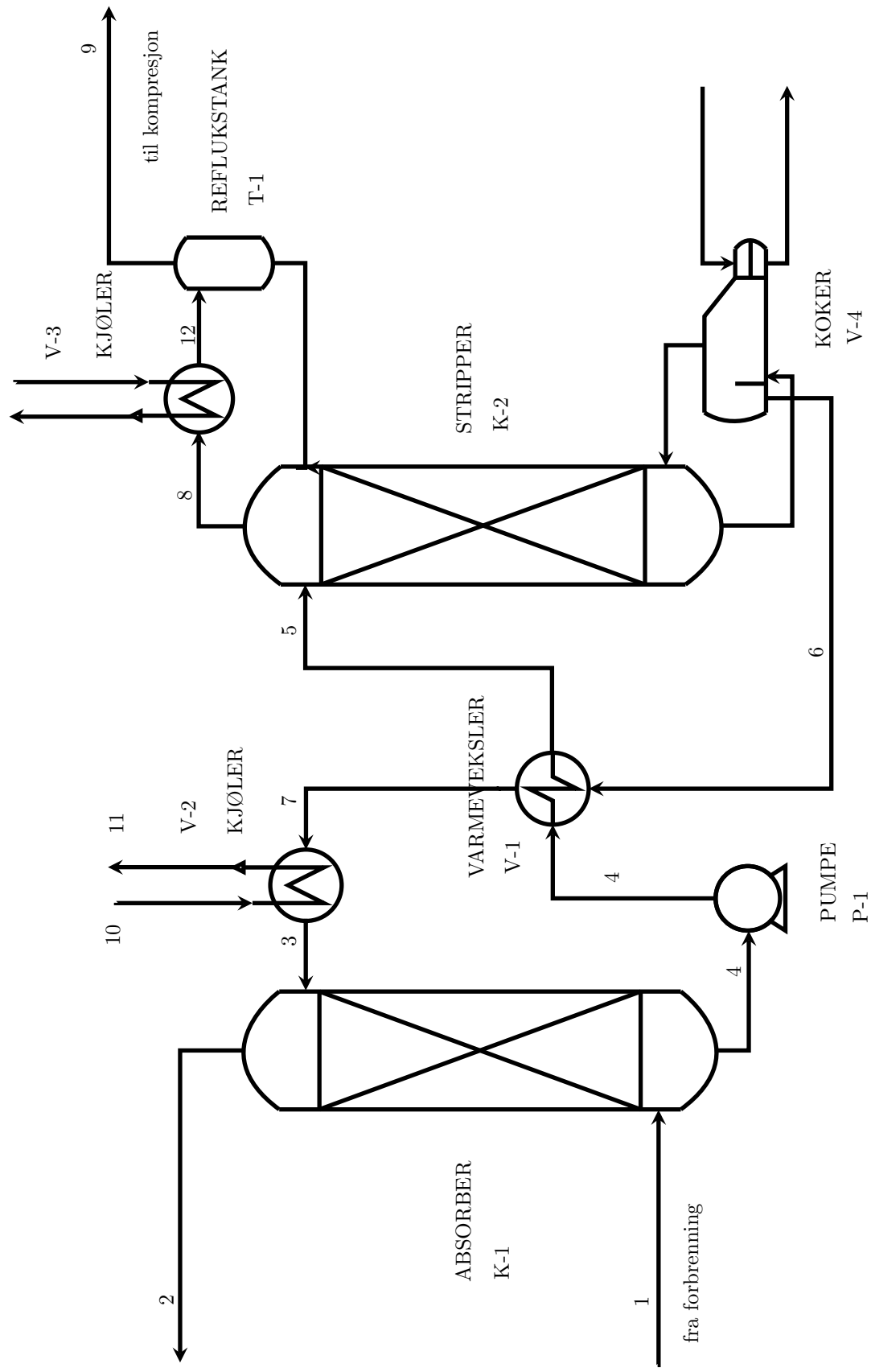
Prosjektoppgaven er delt inn i fire deler:

1. Del 1 omhandler kjemien bak CO₂-fangst, spesifikt CO₂-absorpsjon.
2. Del 2 omhandler massebalanser; her skal prosessen *post-combustion* CO₂-fangst simuleres.
3. Del 3 omhandler energibalanser; her skal simulatoren laget i Del 2 utvides med energibalanser.
4. Del 4 omhandler rapportskriving; etter at oppgaven er løst skal dere presentere arbeidet i en rapport.

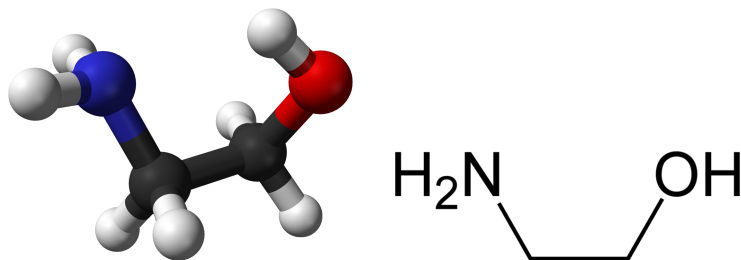
Bakerst i dokumentet finnes tabeller, ligninger og data. Utover dette refereres det til lærebøker og annet materiale i faget TKP4120, samt relevante oppslagsverk. Bruk symbolene gitt i Tabell 2 i hele rapporten.

Innhold

1	Del 1: Kjemien bak CO₂-fangst	3
2	Del 2: Simulering av CO₂-fangst: massebalanser	5
3	Del 3: Energiforbruk i CO₂-fangst	6
4	Del 4: Rapport	7
A	Data og vedlegg	9
A.1	Symboler	9
A.2	Henrys konstant som funksjon av temperatur	10
A.3	Likevektskonstant for Reaksjon (2) for ulike temperaturer	10
A.4	Parameterverdier og innløpsdata	10
A.5	Varmekapasitet	11
A.6	Entalpi	12
A.7	Kompressordata	12
B	Prosedyre for utledning av balanseligninger	14
C	Rapportveiledning	15
C.1	Rapportens struktur	15
C.2	Noen rapporttekniske detaljer	16



Figur 1: Forenklet prosessflytskjema for *post-combustion* CO₂-fangst. Tall indikerer strømnummer.



Figur 2: 3D-modell (venstre) og strukturformel (høyre) av *monoetanolamin*; C_2H_7NO , kan også skrives $HO(CH_2)_2NH_2$, som vi i resten av oppgaven kaller MEA. Sorte kuler er karbon, hvite kuler er hydrogen, blå kule er nitrogen og rød kule er oksygen. Kilde: Wikipedia Commons.

1 Del 1: Kjemien bak CO_2 -fangst

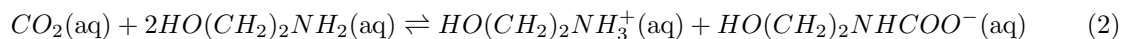
I denne deloppgaven skal kjemien bak prosessen CO_2 -fangst undersøkes.

Vi skal se på CO_2 -fangst ved *absorpsjon*. Ved absorpsjon blir først CO_2 løst, og deretter absorbert. Vi skal her se på absorbenten *monoetanolamin*; C_2H_7NO , kan også skrives $HO(CH_2)_2NH_2$, som vi også kan kalle MEA. MEA er tilsatt vann, og forholdet mellom de to er gitt ved vektfraksjoner av hver; ω_{MEA} og ω_{H_2O} . Den resulterende væsken kaller vi MEA-løsning. CO_2 blir med andre ord først løst, deretter absorbert, i en MEA-løsning.

Vi skal nå se videre på reaksjonene som finner sted ved CO_2 -fangst. CO_2 løser seg først i MEA-løsningen:



Etter dette etableres en likevekt mellom løst CO_2 og MEA-løsningen gjennom ulike likevektsreaksjoner. En sentral likevekt blant disse er Ligning 2:



Vi skal nå studere en størrelse kalt *loading*, α . Loading er et mål på mengde absorbert CO_2 av MEA-løsningen, og er definert som:

$$\alpha = \frac{[CO_2]_{\text{absorbert}}}{[MEA]_0} \quad (3)$$

der $[CO_2]_{\text{absorbert}}$ er konsentrasjon av CO_2 **absorbert** i væskefasen og $[MEA]_0$ er initiell konsentrasjon av MEA i væskefasen.

- Bruk reaksjonsskjema og likevektsuttrykk for Reaksjon 2 til å vise at partialtrykket til CO_2 i gassfase kan uttrykkes ved Ligning 4, gitt at systemet kan beskrives med de to hovedreaksjonene 1 og 2 og at Henrys lov er gyldig for likevekten i Reaksjon 1.

$$p_{CO_2} = \frac{K_H \alpha^2}{K_2(1 - 2\alpha)^2} \quad (4)$$

Henrys lov for systemet er definert som:

$$p_{CO_2} = K_H[CO_2] \quad (5)$$

der p_{CO_2} er partialtrykket til CO_2 i gassfasen, K_H er en systemspesifikk konstant og $[CO_2]$ er konsentrasjon av CO_2 **løst** i væskefasen, og K_2 er likevektskonstanten for reaksjonen gitt i Ligning 2.

- Basert på Ligning 4, vil partialtrykket til CO_2 i gassfasen øke eller minke med økende mengde av absorbert CO_2 i væskefasen (anta her konstant temperatur)? Bruk gjerne **Python** til å plote p_{CO_2} som funksjon av α for en gitt temperatur.

- Basert på Ligning 4 og tilleggsdata gitt i Tabell 3 og Tabell 4, vil partialtrykket til CO_2 i gassfasen øke eller minke med minkende temperatur? Bruk gjerne **Python** til å beregne forholdet K_H/K_2 og plott p_{CO_2} som funksjon av temperatur for en valgt verdi av α .
- Mengden absorbert CO_2 i Strøm 3 og Strøm 4 er gitt ved *loading*, som er mol CO_2 per mol amin. Lag en funksjon `WtFracCO2()` (**Python**) som beregner vektfraksjon CO_2 i MEA-løsning gitt loading α som du kan bruke for å beregne vektfraksjon CO_2 i Strøm 3 og Strøm 4 i simulatoren. Uttrykket finner du i Ligning 6.

$$\omega_{\text{CO}_2} = \frac{M_{\text{CO}_2} \alpha}{\left(1 + \frac{0.7}{0.3}\right) M_{\text{MEA}}} \quad (6)$$

- Bonusutfordring: Vektfraksjonen av CO_2 i MEA-løsning er gitt ved

$$\omega_{\text{CO}_2} = \frac{m_{\text{CO}_2}}{m_{\text{CO}_2} + m_{\text{MEA}} + m_{\text{H}_2\text{O}}} \quad (7)$$

Ta utgangspunkt i dette uttrykket, sammen med Ligning 3 og gitt vektforhold mellom mengde vann og MEA i MEA-løsningen til å vise at sammenhengen mellom α og ω_{CO_2} kan skrives som i Ligning 6.

- Hint 1: Du kan anta at mengden CO_2 løst er mye mindre enn mengden absorbert: $m_{\text{CO}_2} \approx m_{\text{CO}_2, \text{abs}}$
- Hint 2: Du kan anta at massen av CO_2 er mye mindre enn massen av MEA i MEA-løsningen, altså at $m_{\text{CO}_2} \ll m_{\text{MEA}}$ i Ligning 7.

Følgende skal også besvares i gruppens prosjektrapport og bør gjøres før dere går videre:

- Presentér og forklar en figur av prosessen, gjerne med utgangspunkt i Figur 1.
- Beskriv hva som skjer i absorberen. Oppgi og forklar de to viktigste reaksjonene i prosessen.
- Beskriv hva som skjer i stripperen.
- Beskriv kort egenskapene til og hensikten med de andre enhetsoperasjonene gitt i Figur 1.
- Beskriv de viktigste faktorene for prosessen CO_2 -fangst; hva er de prosessmessige utfordringene?

2 Del 2: Simulering av CO₂-fangst: massebalanser

I denne deloppgaven skal dere bygge en simulator for CO₂-fangst-prosessen i **Python**. Ta utgangspunkt i Figur 1 og data gitt i Tabell 5 og filen `constants.py`. Bruk prosedyren presentert i læreboka side 49 (se også bakerst i oppgaveteksten).

Dere kan anta at kun CO₂ løses i MEA-løsningen. Dere kan også anta at MEA-løsningen ikke fordamper. Videre består Strøm 8 av kun CO₂ og H₂O (sammensetning i Strøm 8 er gitt).

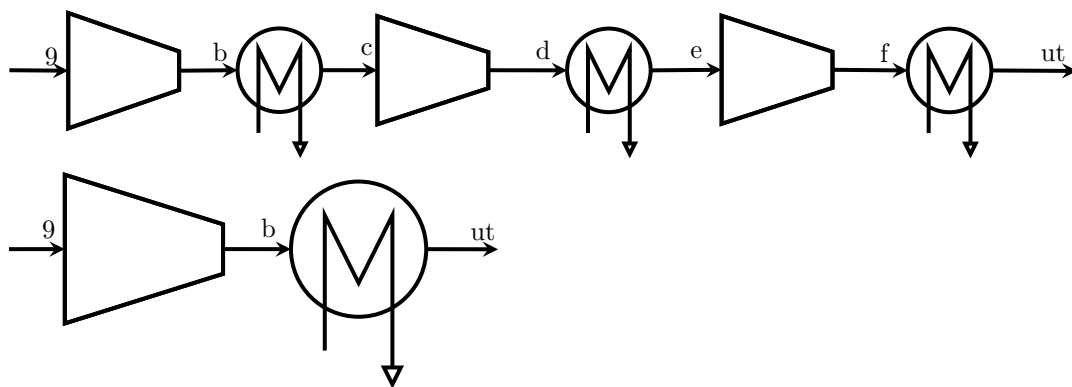
Hint til utledning av ligninger for simulatoren:

- Følg prosedyren presentert i læreboka (se også Vedlegg B).
- Bruk massebasis.
- Ikke løs massebalansene etterhvert, men samle dem opp til et ligningssystem.
- Skriv alle massestrømmer på formen $m_j \omega_i^j$, der m_j er total massestrøm i strøm j og ω_i^j er vektfraksjon av komponent i i strøm j .

Hint til bygging av simulator i **Python**:

- Ikke start på simulatoren før du er sikker på at ligningene dine er riktige og at antall ukjente stemmer overens med antall ligninger.
- Bruk gjerne følgende notasjon: $wc1 \quad wh1 \quad wn1 \quad wo1 = \omega_{CO_2}^1 \quad \omega_{H_2O}^1 \quad \omega_{N_2}^1 \quad \omega_{O_2}^1$.
- Spesifiser alle kjente opplysninger først i koden.
- Lag gjerne en funksjon som tar inn molfraksjoner for gasskomponentene og returnerer massefraksjoner.
- Bruk en ligningsløser (som `scipy.optimize.root()`) til å beregne de ukjente som kommer fra massebalansene. Husk oppskriften presentert i forelesning. Løs deretter de resterende tilleggsligningene.

Resultatet av simulatoren i denne delen skal være lister med vektfraksjoner (gass- og væskefraksjoner separat) og massestrøm (gass- og væskestrøm separat) for strømmene 1-9.



Figur 3: Kompresjon av strøm 9 (CO_2) ved (i) tre steg med mellomkjøling (øverst) og (ii) ett steg (nederst).

3 Del 3: Energiforbruk i CO_2 -fangst

I denne deloppgaven skal dere bygge videre på simulatoren dere laget i Del 2 ved å legge til energibalanser over hver enhet i prosessen. Følg også her prosedyren gitt i læreboka for utregning av balanseligninger. Dere kan anta at varmeveksler V-1 er en ideell motstrøms varmeveksler.

Resultatet av simulatoren skal være ferdig utfylt Tabell 1. I tillegg til enhetene i Prosessfigur 1 skal dere her også vurdere:

- temperatur i Strøm 7 og nødvendig varmeoverføringsareal A [m^2] i varmeveksleren V-1.
- nødvendig strømningsrate for kjølemedium (medium: H_2O (l)) i kjøleren V-2
- totalt energiforbruk Q [J/s] i kjøleren V-3
- totalt energiforbruk Q [J/s] i kokeren V-4
- ett-stegskompresjon av den resulterende CO_2 -gassen i Strøm 9, gitt i Figur 3. Til simulering av kompressorene er data gitt i Kapittel A.7.
- tre-stegskompresjon av den resulterende CO_2 -gassen i Strøm 9, gitt i Figur 3. Til simulering av kompressorene er data gitt i Kapittel A.7.

Hint til energibalansene i Python:

- Til beregning av varmekapasitet kan det være lurt å skrive en separat funksjon (Python: `EnthalpyMEAsol()`), som minner om varmekapasitetsfunksjonen fra øvingsopplegget. Data for beregning av varmekapasitet og entalpi er litt komplisert i denne oppgaven og gitt i Kapittel A.5.
- Bruk en ligningsløser (`scipy.optimize.root()`) til å beregne temperatur i Strøm 7 etter at entalpiene i de resterende kjente strømmene er beregnet.
- Temperatur i Strøm 12 er lik temperatur i Strøm 9. Det er rimelig å anta at alt vann inn i Strøm 8 kondenserer i kjøler V-3 mens CO_2 forblir i gassfase.

4 Del 4: Rapport

I denne delen skal det skrives en rapport for prosjektet, som dekker alle resultatene dere har kommet frem til. Se vedlagte rapportmal.

Her er noen elementer dere bør sjekke at er med i rapporten:

- figur av prosessen med strømnummer, navn på enheter og anvendt kontrollvolum for massebalanser
- massebalanser (totale) over samtlige enhetsoperasjoner
- komponentbalanser for alle komponenter over over samtlige enhetsoperasjoner, gass- og væskefase
- endelig uttrykk for spesifikk entalpi for hver enkelt strøm ($h_j(T) = \dots$)
- temperatur og total entalpi for hver av strømmene 1-9; H_j [J/s], $j = [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9]$
- ferdig utfylt Tabell 1
- egenskaper for vekslerne V-1, V-2, V-3, V-4

I tillegg skal totalt energiforbruk for to alternative kompresjonsoppsett av Strøm 9 vurderes:

- kompresjon i ett steg med kjøling etter kompressor (se Figur 3)
- kompresjon i tre steg med mellomkjøling (se Figur 3)

Eksempelutregning med innsatt tall og enheter skal vises for hver type utregning. Øvrige resultater gis i hensiktsmessige tabeller / figurer. Husk å diskutere resultatene.

All kode som trengs for å simulere prosessen samles i en mappe, som komprimeres og legges ved rapporten ved innlevering. Alle funksjoner og moduler bør gis navn slik at det er tydelig hvilken oppgave disse har. Legg ved en oversikt over hvordan moduler og funksjoner er organisert i rapporten.

Et eksempel på organisering av Python-filer *kan* være som følger:

- `main.py`: hovedfil som setter sammen andre moduler.
- `WtFrac.py`: modul med funksjoner som håndterer utregninger av vektfraksjoner, evt. andre omregninger.
- `MassBalance.py`: modul med modell for massebalansen
- `enthalpy.py`: modul med funksjoner for beregning av varmekapasiteter, entalpi og temperatur
- `compression.py`: modul for kompressorberegninger
- `constants.py`: konstantfil (utdelt)

I tillegg limes koden inn i vedlegg.

Tabell 1: Data for hovedstrømmer i *post-combustion* CO₂-fangst.

						massefraksjon					
		T	p	h	m	gass				væske	
strøm	beskrivelse	[K]	[bar]	[kJ kg ⁻¹]	kg s ⁻¹	CO ₂	H ₂ O	N ₂	O ₂	MEA-løsning	CO ₂
1											
2											
3											
4											
5											
6											
7											
8											
9											

A Data og vedlegg

A.1 Symboler

Tabell 2: Symbol, enhet og beskrivelse for størrelser brukt i denne rapporten.

symbol	enhet	beskrivelse
a	-	aktivitet
C_p	J K^{-1}	varmekapasitet (konstant trykk)
c_p	$\text{J kg}^{-1}\text{K}^{-1}$	varmekapasitet (konstant trykk)
$C_{p,m}$	$\text{J mol}^{-1}\text{K}^{-1}$	varmekapasitet (konstant trykk)
C_v	J K^{-1}	varmekapasitet (konstant volum)
c_v	$\text{J kg}^{-1}\text{K}^{-1}$	varmekapasitet (konstant volum)
$C_{v,m}$	$\text{J mol}^{-1}\text{K}^{-1}$	varmekapasitet (konstant volum)
H_v	J K^{-1}	entalpi
h_v	$\text{J kg}^{-1}\text{K}^{-1}$	spesifikk entalpi, per kg
$H_{v,m}$	$\text{J mol}^{-1}\text{K}^{-1}$	spesifikk entalpi, per mol
K_H	systemavhengig	Henrys konstant
K	systemavhengig	likevektskonstant
m	kg	masse
\dot{m}	kg s^{-1}	masserate
M_w	g mol^{-1}	molvekt
N	mol	moltall
p	Pa	trykk
p_i	Pa	partialtrykk for komponent i
q, Q	J mol^{-1} , J	varme
R	$\text{J mol}^{-1}\text{K}^{-1}$	universell gasskonstant
t	s	tid
T	K	temperatur
u, U	J mol^{-1} , J	indre energi
U_a	$\text{W m}^{-2} \text{K}^{-1}$	varmeoverføringskoeffisient
V	m^3	volum
w, W	J mol^{-1} , J	arbeid
x	-	molfraksjon
γ	-	forholdstall mellom varmekapasitetene, c_p/c_v
η	-	termodynamisk virkningsgrad
ξ	-	reaksjonsomfang
ρ	kg m^{-3}	massetetthet
ω	-	massefraksjon
$\Delta_f H$	J	dannelsesentalpi (standardtilstand må spesifiseres)
i	-	komponent i
j	-	strøm j
0	-	initielt
*	-	ren komponent
rev	-	reversibelt

A.2 Henrys konstant som funksjon av temperatur

Henrys konstant k_H som funksjon av temperatur T [K] og loading α [-] for CO_2 i MEA i denne oppgaven er gitt i Ligning 8.

$$K_H(T[K], \alpha[-]) = (c_1 + c_2 \alpha T^{-1}) \exp [c_3 \alpha^2 + c_4 T^{-1} + c_5 \alpha T^{-2}] \quad (8)$$

Konstantene c_1 - c_5 er gitt i Tabell 3

Tabell 3: Verdi av konstantene c_1 - c_5 i uttrykk for Henrys konstant (Ligning 5) for MEA-løsningen i denne oppgaven.

Symbol	Enhet	Verdi
c_1	kPa m ³ mol ⁻¹	4.96563×10^2
c_2	kPa m ³ mol ⁻¹ K	3.41697×10^5
c_3	-	1.69131×10^0
c_4	K	1.47225×10^3
c_5	K ²	1.28338×10^5

A.3 Likevektskonstant for Reaksjon (2) for ulike temperaturer

Tabell 4: Verdier for likevektskonstanten for Reaksjon (2) (K_2) for et utvalg temperaturer.

Temperatur [K]	K_2 [mol m ⁻³]
273	3.93×10^5
298	3.70×10^4
313	1.14×10^4
333	2.43×10^3
353	5.78×10^2
373	2.46×10^2
393	4.08×10^1
423	6.74×10^0

A.4 Parameterverdier og innløpsdata

Tabell 5: Gitte data for prosjektoppgaven. Merk at ulike grupper kan ha ulike gitte data, dette er indikert ved se fil", som referer til fila "constants.py"/"constants.m".

symbol	enhet	verdi	kommentar
U_a	W m ⁻² K ⁻¹	se fil	varmeoverføringskoeffisient
ω_{MEA}	-	0.3	massefraksjon monoetylamin i monoetylaminløsning
$\omega_{capture}$	-	se fil	andel (masse) av CO_2 i innløpsstrøm (strøm 1) som blir fanget i løpet av prosessen
m_1	kg s ⁻¹	se fil	total massestrøm i føde
$\omega_{N_2,1}$	-	se fil	massefraksjon av N_2 i strøm 1

Tabell 5: Gitte data for prosjektoppgaven. Merk at ulike grupper kan ha ulike gitte data, dette er indikert ved se fil", som referer til fila "constants.py"/"constants.m".

symbol	enhet	verdi	kommentar
$\omega_{CO_2,1}$	-	se fil	massefraksjon av CO ₂ i strøm 1
$\omega_{H_2O,1}$	-	se fil	massefraksjon av H ₂ O i strøm 1
$\omega_{O_2,1}$	-	se fil	massefraksjon av O ₂ i strøm 1
α_3	-	se fil	loading av CO ₂ i strøm 3
α_4	-	se fil	loading av CO ₂ i strøm 4
$\omega_{CO_2,9}$		1	massefraksjon av CO ₂ i strøm 9
$x_{CO_2,8}$		0.7	molfraksjon av CO ₂ i strøm 8
T ₁	K	se fil	temperatur i strøm 1
T ₂	K	se fil	temperatur i strøm 2
T ₃	K	se fil	temperatur i strøm 3
T ₄	K	se fil	temperatur i strøm 4
T ₅	K	se fil	temperatur i strøm 5
T ₆	K	se fil	temperatur i strøm 6
T ₇	K	beregnes	temperatur i strøm 7
T ₈	K	se fil	temperatur i strøm 8
T ₉	K	se fil	temperatur i strøm 9
T ₁₀	K	se fil	temperatur i strøm 10
T ₁₁	K	se fil	temperatur i strøm 11
p ₁	bar	1	trykk i strøm 1
p ₂	bar	1	trykk i strøm 2
p ₃	bar	1	trykk i strøm 3
p ₄	bar	1	trykk i strøm 4
p ₅	bar	2	trykk i strøm 5
p ₆	bar	2	trykk i strøm 6
p ₇	bar	2	trykk i strøm 7
p ₈	bar	2	trykk i strøm 8
p ₉	bar	2	trykk i strøm 9
$\Delta_f h_{sol}$	kJ kg ⁻¹	-13599	dannelsesentalpi for MEA-løsning $\omega_{MEA} = 0.30$
$\Delta_{abs} h_{CO_2}$	kJ mol ⁻¹	80	absorpsjonsentalpi for CO ₂
η	-	0.85	virkningsgrad (alle kompressorer)

A.5 Varmekapasitet

Varmekapasitet som funksjon av temperatur (K) for væskene i prosessen og absorbert CO₂ er gitt ved Ligning 9.

$$c_{p,i} = A_i + B_i T + C_i T^2 \quad (9)$$

Konstantene A_i , B_i og C_i for henholdsvis $i = H_2O$, $i = MEA$ er gitt i Tabell 6.

Varmekapasitet for MEA-løsningen i denne oppgaven er gitt ved uttrykket:

$$c_{p,sol} = (1 - \omega_{MEA})c_{p,H_2O} + \omega_{MEA}c_{p,MEA} + \omega_{MEA}(1 - \omega_{MEA})(A_{sol} + B_{sol}T + C_{sol}\omega_{MEA}(T - 273.15)^{-1.5859}) \quad (10)$$

Konstantene A_i , B_i og C_i for $i = sol$ er gitt i Tabell 7.

Tabell 6: Konstanter for beregning av varmekapasitet for væskene i prosessen og absorbert CO₂.

Symbol	Enhet	Verdi
A_{H_2O}	kJ kg^{-1}	5.0536
B_{H_2O}	$\text{kJ kg}^{-1} K^{-2}$	-5.6552×10^{-3}
C_{H_2O}	$\text{kJ kg}^{-1} K^{-3}$	9.1400×10^{-6}
A_{MEA}	$\text{kJ kg}^{-1} K^{-1}$	-0.64878
B_{MEA}	$\text{kJ kg}^{-1} K^{-2}$	1.6992×10^{-2}
C_{MEA}	$\text{kJ kg}^{-1} K^{-3}$	-1.9000×10^{-5}
A_{CO_2}	$\text{kJ kg}^{-1} K^{-1}$	0.585
B_{CO_2}	$\text{kJ kg}^{-1} K^{-2}$	9.00×10^{-4}
C_{CO_2}	$\text{kJ kg}^{-1} K^{-3}$	0

Tabell 7: Konstanter for beregning av varmekapasitet for MEA-løsningen.

Symbol	Enhet	Verdi
A_{sol}	$\text{kJ kg}^{-1} K^{-1}$	-4.9324
B_{sol}	$\text{kJ kg}^{-1} K^{-2}$	0.01469
C_{sol}	$\text{kJ kg}^{-1} K^{-2.5859}$	69.6243

A.6 Entalpi

Entalpi for MEA-løsningen med CO₂ inneholder to ekstra ledd for selve absorpsjonen av CO₂, som beskrives med Reaksjon (1) og Reaksjon (2). Se Ligning 11. Merk at $\Delta_{abs}h_{CO_2} = \Delta h_{reaksjon1} + \Delta h_{reaksjon2}$.

$$\begin{aligned}
 h_{[sol+CO_2]}(T) = & \omega_{sol} \left[\Delta_f h_{sol}(T_{ref}) + \int_{T_{ref}}^T c_{p,sol}(T) dT \right] + \\
 & \omega_{CO_2} \left[\Delta_f h_{CO_2}(T_{ref}) + \int_{T_{ref}}^T c_{p,CO_2}(T) dT \right] + \\
 & \omega_{CO_2} [\Delta h_{reaksjon1} + \Delta h_{reaksjon2}]
 \end{aligned}$$

A.7 Kompressordata

Tabell 8: Data for påkrevd trykk og temperatur for ett- og trestegskompresjon av Strøm 9 (se Figur 3).

Variabel	Enhet	verdi
Kompresjon i tre steg		
T_{inn}	[K]	T_9
p_{inn}	[bar]	p_9
T_b	[K]	beregnes
p_b	[bar]	4
T_c	[K]	303
p_c	[bar]	4
T_d	[K]	beregnes
p_d	[bar]	8
T_e	[K]	303
p_e	[bar]	8
T_f	[K]	beregnes
p_f	[bar]	20
T_{ut}	[K]	303
p_{ut}	[bar]	20
Kompresjon i ett steg		
T_{inn}	[K]	T_9
T_b	[K]	beregnes
p_b	[bar]	20
T_{ut}	[K]	303
p_{ut}	[bar]	20

B Prosedyre for utledning av balanseligninger

Tabell 2.2: Prosedyre for utledning av balanseligninger

1. **Tegn et forenklet flytskjema over prosessen med strømmer og blokker for de ulike enhetene.** (En skisse gir oversikt!)
2. **Velg basis.** Dette betyr at man spesifiserer mengden av en strøm, f.eks. kan en strøm være gitt. Et "lurt" valg av basis kan forenkle beregningene, men der er ikke noe kritisk valg siden vi senere kan skalere prosessen (se punkt 10).
3. **Skriv inn strømdata og andre gitte opplysninger på flytskjemaet og gi symboler på ukjente variable.** Generelt er en strøm spesifisert ved at man gir mengden av de c komponentene, pluss ytterligere to opplysninger, f.eks. temperatur og trykk ($c+2$ uavhengige opplysninger):

$$\text{Strømdata} = \begin{bmatrix} \text{totalmengde} \\ \text{sammensetning } (c - 1 \text{ stk.}) \\ \text{temperatur} \\ \text{trykk} \end{bmatrix}$$

Det er da enkelt å identifisere manglende data.

- Vi her har valgt å spesifisere total mengde og sammensetning, men vi kan alternativt gi mengdene for de c komponentene.
 - Ofte oppgis entalpi i stedet for temperatur fordi det generelt er en mer entydig spesifisering (se side 270).
 - Hvis vi kun er interessert i massebalansen trengs ofte ikke opplysninger om temperatur og trykk.
4. **Kvantifiser andre gitte opplysninger som ikke er inntegnet på flytskjemaet.** Dette kan være data for kjemiske reaksjoner og deres forløp (f.eks. omsetningsgrad, likevektkonstant eller hastighet) og data for separasjonsenheter.
 5. **Få alt på konsistente enheter.** For massebalansene betyr dette massebasis eller molbasis. For å regne om vil man typisk trenge tettheter og molvekter.
 6. **Ta en rask analyse på om problemet er løsbart.** Du bør ikke gå for langt her, men det kan være fornuftig å tenke litt på om og hvordan problemet skal løses (se side 59) før du setter i gang med å definere kontrollvolumer og skrive balanser.
 7. **Definer kontrollvolumer.** Typisk vil det være flere siden man vanligvis har ett rundt hver enhet (blokk).
 - Blandepunkter kombineres ofte med etterfølgende ("nedstrøms") enhet.
 - Ofte brukes totalbalanser rundt hele prosessen (kontrollvolumet er rundt alle blokkene), som da erstatter balansene over en av enkeltenhetene.
 8. **Formulér balansene** for total masse, komponentmasser, energi, etc. over hvert enkelt kontrollvolum. Pass på at du ikke setter opp ligninger som er avhengige (dvs. som kan utledes fra andre ligninger og derved ikke inneholder noen ekstra informasjon); f.eks. er den totale massebalansen lik summen av alle komponentbalansene.
 9. **Løs ligningene med hensyn på de ukjente.** Man bør selvfølgelig først sjekke at ligningssystemet er løsbart, dvs. at antall uavhengige ligninger = antall ukjente (se side 50).
 10. **Eventuelt skalér løsningen til en annen ønsket mengde.** Dette gjøres ved å anvende samme skaleringsfaktor på alle ekstensive variable (mengde, varme etc.), og forutsetter at virkningsgradene for prosessen er uavhengig av skalering.

C Rapportveiledning

C.1 Rapportens struktur

Fremside

Fremsiden skal inneholde følgende: Tittel, Fag, Gruppenummer, Medlemmer av gruppen, evt. Figur/bilde.

Sammendrag

Sammendraget er en oppsummering av de ulike delene i rapporten. Det skal inneholde hvorfor rapporten er skrevet, hvilke metoder som er brukt, resultater og konklusjoner. Sammendraget skal stå på en egen side.

Innholdsfortegnelse

1 Innledning

Innledningen skal introdusere leseren for temaet og sette rapporten i en kontekst. Gi en kort, generell innledning om prosessen og dens samfunnsrelevans. Kapitlet avsluttes med å forklare i hvilken sammenheng rapporten er skrevet og en direkte innledning til det som kommer i resten av rapporten.

Elementer å huske på i dette kapitlet: Kildehenvisninger, figurer og tabeller: introduksjon i hovedtekst, plassering og innhold.

2 Prosessbeskrivelse

Her skal den spesifikke prosessen som er gitt i oppgaven beskrives. Svar på Del 1 skal inngå her. Beskriv prosessen under hovedoverskriften og bruk i tillegg følgende underkapitler:

- 2.1 Reaksjoner
- 2.2 Viktige faktorer i prosessen
- 2.3 Utfordringer ved prosessen

Noen elementer å huske på i dette kapitlet: Kildehenvisninger, figurer og tabeller: introduksjon i hovedtekst, plassering og innhold

3 Metode

Her skal en presentasjon og evt. utledning av ligninger gis. I tillegg skal utledningen av formelen for loading inkluderes. Presenter eventuell generell informasjon under hovedoverskriften og bruk i tillegg følgende underkapitler:

- 3.1 Valg av basis og konvertering mellom ulike basis
- 3.2 Massebalanser og energibalanser for strømmene i prosessen
 - 3.2.1 Massebalanser
 - 3.2.2 Energibalanser
- 3.3 Energiforbruk i stripper
- 3.4 Varmeveksling i prosessen
- 3.5 Kompresjon av produktstrøm
 - 3.5.1 Kompresjon i tre steg
 - 3.5.2 Kompresjon i ett steg

Elementer å huske på i dette kapitlet: Kommentere hvor ligningene kommer fra (referanse til lærebok, oppgavetekst etc.), ligningsnummerering, symbolbeskrivelser, figurer og tabeller: introduksjon i hovedtekst, plassering og innhold.

4 Resultater og diskusjon

Her skal tallsvarene presenteres og diskuteres. Referer til ligningene i metodedelen (ligningsnummer) før innsetting av tall. Husk å påpeke eventuelle antagelser. De ulike resultatene kan diskuteres fortløpende. å diskutere et resultat vil si å vurdere om resultatet er rimelig eller ikke – er f.eks. ut-temperatur av varmeveksler fornuftig? Er varmevekslingsareal fornuftig? I tillegg skal spørsmål i oppgavene som «Hva skjer når...?» og «Hvorfor...?» besvares som en del av diskusjonen. Presenter eventuell generell informasjon under hovedoverskriften og bruk i tillegg følgende underkapitler:

- 4.1 Prosessdata ved gitte betingelser
 - 4.1.1 Massefraksjoner
 - 4.1.2 Massestrømmer
 - 4.1.3 Entalpier
 - 4.1.4 Oppsummering
- 4.2 Prosessdata ved eventuelle nye betingelser
- 4.3 Energiforbruk i stripper med tilhørende koker og kjøler
- 4.4 Varmeveksling i prosessen
- 4.5 Kompresjon av CO₂
- 4.6 Partialtrykk av CO₂ i gassfase

Delkapittelet Prosessdata ved eventuelle nye betingelser er et valgfritt kapittel der dere kan bruke simulatoren dere har laget til å justere litt på innløpsbetingelsene og kommentere konsekvensene for prosessen. Hva skjer for høyere strømningsrate inn? Hva dersom vi klarer å lage en aminløsning som absorberer CO₂? Hva om temperaturene i prosessen endres?

Elementer å huske på i dette kapitlet: Kommentere hvor ligningene kommer fra (referanse til tidligere i rapporten), kommentere hvor tallverdier kommer fra (referanse til SI Chemical Data, oppgavetekst etc.), benevnninger, antall signifikante siffer.

5 Konklusjon

Konklusjonen skal oppsummere slutningene som er kommet fram til gjennom rapporten, ingenting nytt skal komme fram i denne delen. Hovedresultater og konklusjoner fra diskusjonen skal presenteres.

Referanser

Rapporten skal ha en referanseliste.

C.2 Noen rapporttekniske detaljer

- **Bruk av ‘vi’:** Bruk gjerne ‘vi’ for å gi bedre flyt i teksten. Unngå derimot bruk av ‘jeg’ og navn på grupped medlemmer.
- **Kapittelnummerering:** Sammendrag, innholdsfortegnelse og referanser skal generelt ikke ha kapittelnummer.
- **Sidetall:** Visningen av sidetall begynner etter innholdsfortegnelsen. Det vil si at det skal ikke vises sidetall på forside, sammendrag eller innholdsfortegnelse. Disse er allikevel med i tellingen, slik at når sidetallene begynner å vises under 1 Innledning kan sidetallet være alt fra 4 og oppover.
- **Figurer, tabeller:** Figurer og tabeller skal introduseres i hovedteksten. Figurtekst skal stå under figuren. Tabelltekst skal stå over tabellen. Tabell- og figurtekst skal inneholde nok informasjon til at man ikke skal kunne trenge å lese hovedteksten for å forstå hva tabellen eller figuren inneholder/viser. Dere må referere til kilden hvis dere har med figurer som dere ikke har laget selv.
- **Nummerering av ligninger:** Ligninger bør nummereres for å kunne henvises til i teksten. Da bør de generelle ligningene presenteres først og så kan disse refereres til ved innsetting av tall og utregninger.

Det kan være lurt å ta med avsnittsnummeret i nummereringen for bedre oversikt over hvor man kan finne ligningen. Eks. ligninger i avsnitt 2 nummereres (2.1), (2.2), (2.3) osv.

- **Symbolbeskrivelse etter ligninger:** Når nye symboler introduseres i rapporten bør det være en beskrivelse av disse etter ligningen de inngår i.
- **Algebraiske uttrykk og innsetting av tall:** Det mest ryddige er å utlede rent algebraiske uttrykk først, for så å sette inn tall.
- **Benevninger:** Når dere setter inn tall for symboler i ligninger, så må benevningene være med.
- **Antall signifikante siffer:** Når man legger sammen, trekker fra, multipliserer osv. tall, kan svaret aldri bli mer nøyaktig enn det tallet som inngår i utregningen som har færrest desimaler. Eksempel: $2.475 \times 3 = 7$.
- **Kildehenvisninger:** Kildehenvisninger skal plasseres i teksten (med et tall eller navn som refererer til kildelisten). Hvis en bestemt setning er gitt av en kilde kan kildehenvisningen plasseres foran punktum i denne setningen. Hvis et helt avsnitt kommer fra en kilde plasseres kildehenvisningen på slutten av avsnittet. Husk å referere ved bruk av tallverdier. Ulike kilder (artikler, bøker, internett etc.) skal presenteres i kildelisten på ulike måter. Det er mulig å skrive en generell henvisning hvis samme referansen gjelder for flere tilfeller. For eksempel de fleste tallverdier: 'Verdiene benyttet i dette avsnittet er hentet fra SI Chemical Data [tall]'. En kildehenvisning (referanse) må inneholde tilstrekkelig med opplysninger til at leseren kan finne frem til kilden.

Bruk referanseverktøy slik som f.eks EndNote (Word), eller BibTeX (LaTeX)! Dette er verktøy dere vil få bruk for ved senere anledninger og holder orden på referansene deres.

- **Flyt i rapporten:** Rapporten blir best hvis de ulike delene bindes sammen ved krysshenvvisninger. For eksempel: 'Molbalansene i Seksjon 3.3.2 ble brukt til å simulere prosessen...'. For dere som skriver i LaTeX er det lurt å bruke *label*.