

Laboratorium voor Chemische Technologie

Verslag behorende
bij het fabrieksvoorontwerp
van

F.G. Kalkman en P. Verbrugge

onderwerp:

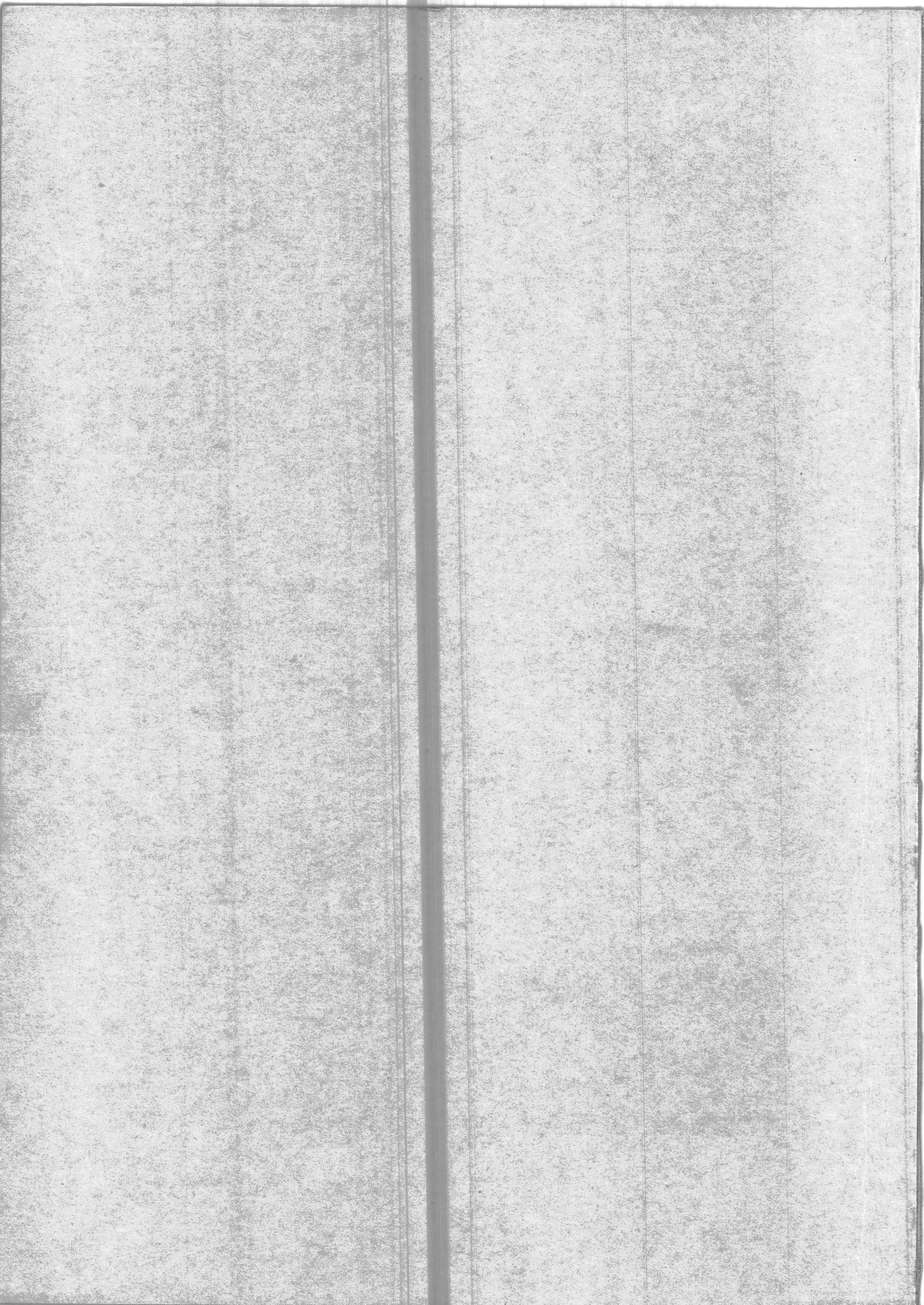
De bereiding van ureum volgens een

gecombineerd strip- en H.G.R.-proces

adres: H. Tollensstraat 158, Delft
Kemperweg 188, Rotterdam-12

opdrachtdatum: sept. '71

verslagdatum: jan. '72



Inhoudsopgave.

Ia	Samenvatting.	1
Ib	Conclusies.	3
II	Inleiding.	7
III	Uitgangspunten.	10
IV	Procesbeschrijving.	25
V	Procescondities.	27
VI	Apparatuurberekening.	49
Bijlagen :		
I	Berekening conversie.	64
II	Berekening carbamaatontleders en kompressor.	68
III	Weergave grafieken en tabellen in analytische vorm.	88
IV	Berekening van de stripper.	91
V	Fasenregel en ontwerp.	96
VI	Condensatie van het gasmengsel.	98
	Symbolenlijst.	101
	Literatuurlijst.	103
	Massa- en warmtebalans, flowsheet.	omslag.

I.^a Samenvatting van de technische aspecten

Dit verslag beschrijft een ureumfabriek volgens het D.S.M.-strip-proces in combinatie met het heetgas-recirculatieproces, het zgn. WAGOE-proces met een capaciteit van 1500 ton per dag. Knelpunt bij dit proces is de compressor. In verband met de hoge temperatuur van het koelmiddel, wat noodzakelijk is om condensatie van de gassen en daarmee corrosie te voorkomen, wordt het koeloppervlak dermate groot, dat technische realisering miniem is. Dit processchema beschrijft een andere manier van koelen.

Ureum wordt in de vloeistoffase gevormd volgens de volgende reacties:



De eerste reactie is sterk exotherm, de tweede is zwak endotherm. De eerste reactie kan als aflopend worden beschouwd; NH_3 en CO_2 reageren vrijwel momentaan volledig tot ammoniumcarbamaat. De tweede reactie is een evenwichtsreactie: een hoge druk heeft een gunstige invloed op de conversie naar ureum, een hogere temperatuur op de reactiesnelheid. De omstandigheden in de reactor zijn: 144 atm. en 190°C . De conversie naar ureum (betrokken op CO_2) is dan ongeveer 0,65 en de reactietijd ca. 20 minuten (lit. l). De reactor is een vat, dat met roestvrij staal is bekleed. Hij is door een aantal zeefplaten in een aantal compartimenten verdeeld, die ieder als een continu geroerde tankreactor beschouwd kunnen worden. Een juiste dimensionering draagt ervoor zorg, dat bij een voldoende aantal zeefplaten de reactor kan worden beschouwd als een ideale buisreactor.

Stoekim?

Om theoretische redenen doorlopen gas en vloeistof de reactor in dezelfde richting. Overtollige reactiewarmte wordt afgevoerd door een totale condensor boven de reactor.

Als grondstoffen worden gebruikt:

- a. vloeibaar NH_3 van 5 atm. en 15°C
- b. gasvormig CO_2 van 5 atm. en 15°C

De vorming van bijprodukten is gering; er ontstaat ongeveer 0.5% biureet.

Niet-omgezet carbamaat wordt nl. ontleed in gasvormig NH_3 en CO_2 in de stripper (ca.90%), die bij dezelfde druk en temperatuur werkt als de reaktor. De rest van het carbamaat wordt ontleed in de carbamaat-ontleders, die bij lagere druk en temperatuur werken. De gassen die hierbij vrijkomen, moeten gecompriemd worden tot synthesesdruk. De temperatuur mag tijdens het comprimeren niet hoger worden dan 250°C i.v.m. constructie- en afdichtingseisen. De koeling van de gassen mag niet te diep gebeuren i.v.m. condensatie van de gassen o.v.v. een corrosief carbamaatmengsel. De koeling van de gassen gebeurt bij dit proces door de carbamaatontleders als koeler te gebruiken. De warmte die nodig is voor de ontleding van ammoniumcarbamaat wordt geleverd door de hete gassen door direct contact tussen vloeistof- en gasfase. De CO_2 -voeding doorloopt ook de compressor. Dit heeft twee voordelen:

- a. er is maar één compressor nodig om CO_2 en de ontledingsprodukten op synthesesdruk te brengen.
- b. CO_2 heeft een gunstige invloed op de carbamaatontleding.

De ureum-smelt uit de laatste carbamaatontleder wordt geconcentreerd en de zo verkregen smelt wordt naar een priltoren gevoerd, waar het produkt vast wordt.

I^b. Conclusies.

Het trekken van conclusies over het hier beschreven proces zal geschieden door vergelijken met het Wagoeproces. Dit zal gedaan worden voor verschillende onderdelen uit de beide processen.

De reaktor is 1.7 maal zo groot als die uit het Wagoeproces. Het reaktorvolume van 150 m³ is geschat met lit. 4. Bij het Wagoeproces wordt gebruik gemaakt van een geschatte verblijftijd van 3 minuten voor het gas. De verblijftijd die uit ons reaktorvolume volgt is ca. 7 minuten. De stripper uit het Wagoeproces is niet juist berekend. In de krachtenbalans over een elementje dl is de zwaartekrachtversnelling g vergeten. Onze stripper is in drie delen berekend, met een gelijk aantal pijpen per deel. Nu wordt voorkomen dat de vloeistof na elk deel herverdeeld moet worden. De verblijftijd in de stripper is volgens lit. 1 10 sec, terwijl in het Wagoeproces hiervoor 40 sec. genomen wordt. Dit heeft invloed op de lengte van de stripper: 10 m (Wago 24 m)

Het voordeel van het hier beschreven proces t.o.v. het Wagoeproces is de koeling van het kompressorgas door direkt contact met de vloeistof. Hierdoor zijn geen koelers met zeer grote oppervlakken nodig i.v.m. condensatie van het gas. Verder werken de carbamaatontleders, waarin de koeling plaats vindt autotherm, wat een besparing in stoomkosten geeft. Koeling van de vloeistofstroom tussen de carbamaatontleders is dan noodzakelijk, maar eenvoudig. Wel dienen de carbamaatontleders voorzien te zijn van druppelvangers, die vermijden dat vloeistof in de kompressor komt.

De kompressor is 18-traps, wat een technisch haalbare drukverhouding van 1.2 betekent. Tevens is dan de temperatuurstijging per trap niet te groot, zodat niet te vaak gekoeld hoeft te worden.

Nadere punten van onderzoek zijn:

1. Een meer betrouwbare berekening van gas-vloeistof-evenwichten in stripper, reaktor en ontleders.
2. Warmte- en stofoverdracht in de carbamaatontleder, noodzakelijk voor een goed ontwerp van de ontleder.
3. Kompressorberekening, waarbij rekening gehouden wordt met de toenemende massastromen.

Vergelijking met berekening koeloppervlak Hoogendijk.

In het afstudeerverslag van Hoogendijk (lit.26) vindt men een berekening van het koeloppervlak, dat nodig is om het kompressor-gas te koelen. Hierbij is uitgegaan van het Wagoeproces.

Het oppervlak moet dan totaal 4650 m^2 zijn, wat on-economisch groot is. Bij ons proces hoeft maar vier maal direkt gekoeld te worden. Puntsgewijs zal nu besproken worden, waarom er zo'n groot koeloppervlak werd gevonden.

1. De berekening is geschied m.b.v. de T-S-diagrammen der afzonderlijke componenten (zie ook blz.23)
2. De maximale gastemperatuur is op 225°C gesteld. Het is echter aannemelijk, dat voor deze temperatuur zeker 250°C genomen kan worden.

De temperatuur van 225°C betekent, dat er al gekoeld moet worden als de gastemperatuur bij ingaan van een trap ongeveer 200°C is.

*De waarde
in hoekjes?*

Of er gekoeld zal worden, wordt per komponent bepaald. Wordt bijv. de NH_3 -temperatuur 190°C bij ingang in de vierde trap, dan wordt er eerst gekoeld tot 170°C . Bij CO_2 en H_2O moet dan ook vóór de vierde trap worden gekoeld. Echter de temperatuur vóór koelen is dan resp. 170° en 250°C ! Het is duidelijk, dat de temperatuur van het totale gas het criterium voor koelen moet zijn. Bij de door Hoogendijk gebruikte methode blijken deze gemiddelde temperaturen maximaal 200 à 210°C te zijn. We willen echter zo dicht mogelijk de maximale temperatuur bereiken. In ons geval is de maximaal bereikte temperatuur 230 - 240°C .

*mozes even
trilichken*

3. Daar er door Hoogendijk met 10 trappen wordt gewerkt (drukverhouding 1.4) zal de temperatuurstijging per trap groter zijn dan bij 18 trappen. Dit betekent, dat gekoeld moet worden bij lagere temperaturen, die dichter bij de condensatietemperatuur komen te liggen. De afkoeling van het gas wordt daardoor erg klein (maximaal 30°C). Daar de gastemperaturen dicht bij de condensatietemperaturen liggen zal de drijvende kracht ook niet groot zijn.

De wandtemperatuur mag nl. niet onder de condensatietemperatuur komen. Hoogendijk neemt de temperatuur van het koelmiddel 10°C onder de wandtemperatuur. Voor het logaritmisch gemiddelde temperatuurverschil krijgt hij dan maximaal 21°C .

4. De overall-warmteoverdrachtscoefficient k , die berekend is, is vrij klein: $42 \text{ W/m}^2 \text{ }^\circ\text{C}$. Deze is echter berekend op het buitenoppervlak. Het oppervlak dat we met deze waarde vinden is dan ook het buitenoppervlak: ongeveer 600 m^2 per trap.

Daar de pijpen geribt zijn, is het aantal pijpen toch "normaal": 750 pijpen van 70 cm lang en 2 cm diameter.

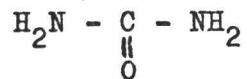
Resumerend: er wordt een groot oppervlak gevonden omdat:

- de maximale gastemperatuur te laag is
- het aantal kompressortrappen te weinig is
- het criterium om te gaan koelen niet juist is.

Dit alles veroorzaakt een te kleine drijvende kracht.

II. Inleiding

Ureum is (in vaste vorm) een witte stof met een smeltpunt van 132,7°C bij 1 atm. (lit. 2). De structuurformule is:



Het vindt toepassing als:

- a. kunstmest.
- b. grondstof voor melamine- en ureumformaldehyde-harsen
- c. scheidingsmiddel voor koolwaterstoffen met een rechte en een vertakte keten. Ureum heeft de eigenschap, dat het met onvertakte koolwaterstoffen kristallijne complexen kan vormen kan vormen, zgn. clathraten. Deze toepassing wordt veel gebruikt in de petrochemische industrie bij de produktie van straalmotorbenzine.

en in geringere mate als:

- d. toevoeging aan veevoer.
- e. grondstof voor lijmsorten, oplosmiddelen en medicijnen.
- f. strooimiddel bij gladheid.

De grootste toepassing vindt ureum echter wel als kunstmest.

Het dankt deze toepassing aan drie eigenschappen:

- a. het lost gemakkelijk op in water en ontleedt daarbij langzaam in NH_3 en CO_2 .
- b. het gewichtspercentage aan stikstof is vrij hoog, nl. 46,7.
- c. het is niet explosief.

Deze eigenschappen hebben ertoe geleid, dat de ureumproduktie de afgelopen 15 jaar zo sterk is toegenomen (van 300.000 naar ca. 11.000.000 ton per jaar). Het is nu ook weer niet zo, dat ureum de meest ideale meststof is. Nadeel is o.a. dat de korrels onder de grond gewerkt moeten worden om verlies van stikstof tegen

te gaan, dit in tegenstelling tot klassieke stoffen als b.v. NPK-mest. Bij deze laatste komt immers als voedingsmateriaal nitraat vrij en bij ureum ammoniak, wat gemakkelijk verdampt. Om deze reden is ureum dan ook niet geschikt voor gebieden waar hevige regenbuien worden afgewisseld met perioden van grote droogte. De vraag naar ureum in vloeibare vorm is, vooral in de U.S.A., de laatste jaren gestegen, maar voor exportdoeleinden zal de vaste vorm aantrekkelijker zijn. Hoewel de behoefte aan stikstofmeststoffen duidelijk toeneemt i.v.m. de wereldvoedselvoorziening, is het tragische dat die landen die het meest behoefte hebben aan deze stoffen niet in staat zijn voldoende te kopen om aan hun eisen te voldoen. Mede gezien de stijgende produktie van ureum en de dalende prijzen is het niet aannemelijk te veronderstellen, dat ureum nog een hoge prijs zal opbrengen. De huidige prijs is f 0,33 per kg. (lit.3).

Ter illustratie volgt hieronder een overzicht van de produktie van ureum in duizenden tonnen per jaar (niet-communistische landen).

	1967	export (%) in 1967	1971
België	237	56	237
Frankrijk	458	25	859
West-Duitsland	840	21	840
Italië	746	43	1386
Nederland	1002	64	1502
Noorwegen	250	80	250
Groot-Brittannië	350	66	350
Japan	2042	60	3116
U.S.A.	2000	4	2750
totaal	<u>7925</u>		<u>11290</u>

De totale produktie is met ca. 40% gestegen. De Amerikaanse produktie is vooral gericht op afzet binnen het eigen land, maar de West-europese producenten moeten wel rekening houden met een toenemende concurrentie van Japanse en eventueel Oosteuropese producenten. De situatie van Japan is vrij gunstig; het ligt immers dichterbij de grote afzetgebieden, zoals India, Pakistan en China, zodat hun transportkosten lager zullen zijn. Voor Nitrex, de gemeenschappelijke verkooporganisatie van Westeuropese producenten, waren de transportkosten naar Azië in 1967 na de sluiting van het Suezkanaal al f 30,-- per ton hoger dan die voor de Japanse producenten. Een nieuwe markt voor m.n. Westeuropees ureum ligt misschien in Zuid-Amerika.

III. Uitgangspunten:

Op technische wijze wordt ureum gevormd door de reactie tussen NH_3 en CO_2 bij hoge druk en hoge temperatuur. NH_3 -gas en CO_2 -gas reageren eerst tot vloeibaar ammoniumcarbamaat, een sterk exotherme reactie ($\Delta H = -28 \text{ kcal/mol}$, 160°C). Ureum wordt gevormd door dehydratatie van carbamaat, wat een zwak endotherme evenwichtsreactie is ($\Delta H = +7 \text{ kcal/mol}$, 160°C) (lit.4). Een hogere temperatuur zal op deze laatste reactie een gunstige invloed hebben. Boven 160°C gaat de dehydratatie zo snel, dat het technisch gezien aantrekkelijk wordt om ureum te produceren. De keuze van de temperatuur in de reactor wordt bepaald door o.a. de reactiesnelheid en de conversie. Gekoppeld aan een keuze van deze temperatuur ligt dan de keuze van de druk in de reactor. De reactie naar ureum vindt immers in de vloeistoffase plaats. Het is dus gewenst om zoveel mogelijk vloeistof in de reactor te hebben. Uit een keuze van een hoge temperatuur volgt dan automatisch een keuze van een hoge druk. Ureumprocessen werken bij drukken tussen 140 en 420 atm. en bij temperaturen tussen 150° en 250°C (lit.5). Verder is van belang de NH_3/CO_2 -verhouding in de reactor. Een hoge NH_3 -druk heeft een gunstige invloed op de conversie en vermindert de kans op volgreacties van ureum naar bv. biureet en cyanuurzuur. Omdat de vorming van een bijproduct als carbamaat evenzeer ongewenst is, is het noodzakelijk om dit carbamaat weer om te zetten in NH_3 en CO_2 . Dit kan door het reactiemengsel in contact te brengen met de gasvormige CO_2 -voeding. Deze doorloopt met dit doel in tegenstroom met de vloeistof de stripper. Dit gebeurt bij dezelfde temperatuur en druk, wat het gebruik van pompen of compressoren hier overbodig maakt.

~~110² 40) 57~~
~~110² .50) 61~~
~~100² 60) 60~~
~~90² 70) 56~~

13² . 3 510

Hierbij moet enige warmte worden toegevoerd. De strippende werking van CO_2 kan verklaard worden uit de volgende vergelijking:

$$x = K \cdot y^2 \cdot z, \text{ waarin}$$

x = molfractie carbamaat in oplossing

K = evenwichtsconstante

y = molfractie NH_3 in de gasfase

z = molfractie CO_2 in de gasfase

Uit de vergelijking is te zien, dat verminderen van de partiaalspanning van NH_3 door de partiaalspanning van CO_2 te verhogen bij constante totale druk effectiever is dan het omgekeerde, omdat de partiaalspanning van NH_3 in de tweede macht voorkomt. Verdere voor- en nadelen van het strippen met NH_3 of CO_2 zullen niet worden besproken.

De in de reactor geproduceerde overtollige warmte wordt afgevoerd in een condensor die boven de reactor is geplaatst. De condensor werkt bij dezelfde druk als de reactor. Een voordeel hiervan is, dat de condensatiewarmte bij een hoge temperatuur vrijkomt. Al deze warmte kan benut worden om stoom te produceren (van ca. 3 atm.). Dit komt de warmte-economie van het proces aanzienlijk ten goede.

Wat betreft de te kiezen druk, temperatuur en NH_3/CO_2 -verhouding kunnen we de volgende opmerkingen maken: het systeem in de reactor bevat 5 stoffen, nl. NH_3 , CO_2 , H_2O , ureum en ammoniumcarbamaat die met elkaar in relatie staan door twee evenwichtsreacties. Het aantal componenten is dus 3, het aantal fasen 2. Dan volgt uit de fasenregel, dat $f = 3$, d.w.z. het aantal vrijheidsgraden is 3. Kiezen we druk en temperatuur, dan blijft er nog 1 over. Hiervoor nemen we bv. de NH_3/CO_2 -verhouding van het gas uit de stripper. Deze wordt zo gekozen, dat de NH_3/CO_2 -verhouding van het gas naar de condensor 3 is,

Wijzend op de afbeelding op de volgende pagina.

wat een min of meer azeotrope samenstelling voor deze gassen betekent, d.w.z. in dit geval: het temperatuurtraject voor de totale condensatie is erg klein.

Wat is nu de invloed van de veranderende samenstelling van de vloeistof op de temperatuur en de druk? Onderin de reactor wordt vloeistof toegevoerd (uit de condensor) die geen ureum bevat. Bovenin de reactor bevat de vloeistof wel ureum. Een ureumrijke smelt heeft een lagere dampspanning dan een smelt die alleen uit NH_3 , H_2O en carbamaat bestaat. Om een constante druk in de reactor te houden zal de vloeistof onderin de reactor een lagere temperatuur moeten hebben dan bovenin. Daartoe worden de condenserende gassen in de condensor afgekoeld tot 170°C (lit.6) Voor de temperatuur in de reactor kiezen we 190°C , wat een conversie naar ureum geeft van 0,65, betrokken op CO_2 . De bijbehorende druk is 144 atm. In de stripper wordt ca. 90% van de NH_3 en het ammoniumcarbamaat uit de vloeistof verwijderd. De resterende 10% wordt teruggewonnen in een serie carbamaat-ontleders. Hier gebeurt eigenlijk hetzelfde als in de stripper. Ook hier worden NH_3 en carbamaat uit de smelt gestript, maar temperatuur en druk zijn lager. Het principe is als volgt: verse CO_2 -voeding wordt in de eerste carbamaatontleder geblazen. Hierbij worden NH_3 , CO_2 en H_2O uit de oplossing gestript. De ontwijkende gassen worden in een aantal trappen van de compressor gecomprimeerd. Als de temperatuur van de gassen te hoog wordt (meer dan 250°C), moet het gasmengsel gekoeld worden. Hiervoor gebruiken we een volgende carbamaatontleder, die zich op een lagere temperatuur bevindt dan de gassen uit de compressor. De vrijkomende warmte wordt gebruikt om carbamaat te ontleden en NH_3 , CO_2 en H_2O te strippen. De warmteoverdracht gebeurt door direct

omdat pi -
het minimum
niet is

normaal
en deze was
een vrijheit-



gasvloeistof-contact. De uit de ontleder komende gassen worden weer verder gecomprimeerd tot de temperatuur weer te hoog wordt. Dan wordt het hete gas weer door een carbamaatontleder geleid. Deze procedure herhaalt zich totdat het gas op synthesesdruk is. Het gas dat zich op synthesesdruk bevindt, wordt onder in de stripper ingevoerd. Door het opstellen en oplossen van een gecombineerde massa- en warmtebalans worden de optimale procesomstandigheden voor de carbamaatontleders bepaald. Doel van deze manier van ontleden en comprimeren is, te komen tot een gunstige warmte-economie. Het idee van een dergelijk proces is vastgelegd door Cook in een octrooi (lit.7). Voorzover bekend is een dergelijk proces nog niet in de praktijk getoetst.

Een groot probleem bij ureumfabrieken is de corrosie van de apparatuur onder invloed van het agressieve vloeibare reactiemengsel.

De gasfase is niet of nauwelijks corrosief. Corrosie kan omschreven worden als chemische, ongewenste aantasting van een materiaal.

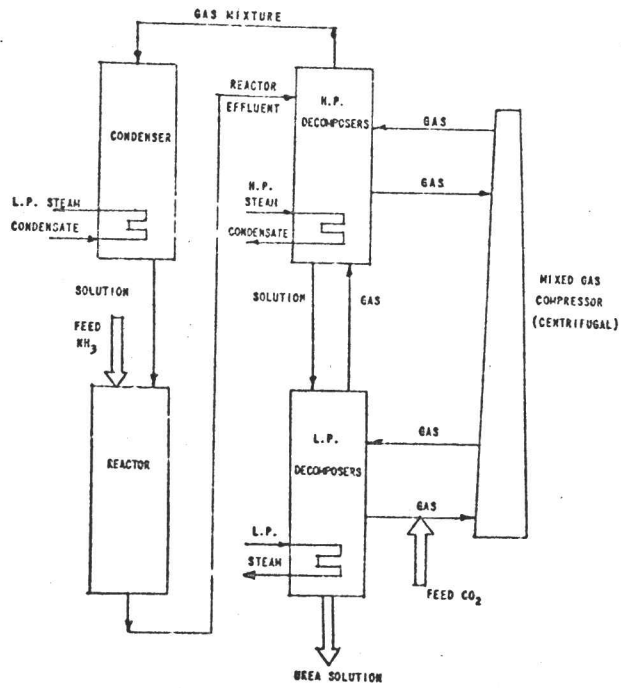
Bij corrosie van een metaal kunnen we globaal twee mechanismen onderscheiden:

- a. de corrosieprodukten (meestal oxiden) blijven niet aan het metaal gehecht. In dit geval zal de gewichtsafname van het metaal met de tijd ongeveer constant zijn. Deze vorm van corrosie is natuurlijk funest voor de apparatuur.
- b. de corrosieprodukten hechten zich wel aan het metaal. Een gunstige eigenschap van de ontstane oxidehuid kan zijn, dat hij het metaal beschermt tegen verdere aantasting door de corrosieve vloeistof (of corrosief gas). Men spreekt dan van passivering van het oppervlak.

Met de
corrosie-
de corrosie-
ontleders

Met de
tijd

↓
selvst



— Flow diagram Chemico thermo-urea process.

(lit. 28)

Die delen van de apparatuur die in aanraking komen met de vloeistof zullen bij voorkeur bestaan uit austenitisch chroomnikkelstaal met een gehalte aan chroom van 16 - 20 %, aan nikkel 10 - 14% en aan molybdeen of zirkoon 1, 75 - 4%. Ook andere chroomnikkelstaalsoorten kunnen gebruikt worden, als ze maar minstens 16% chroom en 8% nikkel bevatten. Deze legeringen vertonen de eigenschap, dat zich een passiverende oxidehuid aan het oppervlak hecht. Om deze oxidehuid in stand te houden is het wenselijk 0,1 vol. % O_2 gebaseerd op CO_2 aan de gassen toe te voegen in afwezigheid van zwavel, 0,2 vol. % O_2 bij aanwezigheid van hoeveelheden zwavel tot $2 \text{ mg/m}^3 CO_2$ en 0,5 - 1 vol. % O_2 als het gehalte aan zwavel tussen 5 en $10 \text{ mg/m}^3 CO_2$ ligt. Grotere hoeveelheden dan 3 vol. % O_2 zijn niet gewenst i.v.m. reacties van O_2 met de carbamaatsmelt (lit.8).

Corrosie in ureumfabrieken kan verder nog bestreden worden door het voorkomen van condensatie van de reactiegassen op die plaatsen waar dat niet gewenst is, m.n. in de compressor. Daartoe is het noodzakelijk de fysische condensatiepunten van $NH_3-CO_2-H_2O$ -gasmengsels te kennen. We spreken van een fysisch condensatiepunt als bij condensatie van de gassen alleen nog maar carbamaat wordt gevormd. Bij een thermodynamisch condensatiepunt heeft zich in de vloeistof het evenwicht naar ureum al in gesteld. De omstandigheden in de compressor zijn zodanig, dat we mogen aannemen dat de fysische condensatie een rol speelt.

In de compressor zal bij eventuele condensatie een combinatie van corrosie en mechanische slijtage door de snelbewegende vloeistofdruppels voorkomen. Mede hierdoor is het niet alleen voldoende om als constructiemateriaal voor de compressor een metaallegering te kiezen, waarbij na enige tijd passivering optreedt.

Bij het hier beschreven proces treden gekoppelde gas- en vloeistofstromen op, m.n. in de stripper en in de carbamaatontleders. Uit de

Handwritten note:
9.4.50
Austenitisch
103

Handwritten note:
Kun je het
condensatiepunt
in de compressor
bepalen?

praktijk is bekend, dat hierbij pulsaties kunnen optreden (lit. 4). Er zal geen aandacht worden besteed aan de technische voorzieningen aan de apparatuur die deze pulsaties zo klein mogelijk moeten houden.

Bij het ontwerp van de fabriek is uitgegaan van een produktie van 1500 ton ureum per dag, wat bij een stilstand van 1 week per jaar een jaarlijkse produktie van 537.000 ton ureum oplevert. Al naar gelang de toepassing van het eindprodukt ureum worden er verschillende eisen aan de zuiverheid gesteld. Aan ureum, dat bedoeld is als kunstmest, stelt men andere eisen dan aan ureum, dat gebruikt wordt voor technische processen zoals de bereiding van harsen. Bij deze laatste toepassing is een laag biureetgehalte gewenst, terwijl bv. in het produkt dat als veevoeder is bestemd een hoger biureetgehalte wenselijk is.

*bedoeld bij
Kunstmest*

Specificaties volgen hieronder:

		kunstmest	technisch ureum
stikstof,	min., gew. %	46,3	46,3
water,	max., gew. %	0,3	0,3
biureet,	max., gew. %	0,9	0,4
vrij NH_3 ,	max., ppm	150	100
ijzer,	max., ppm	2	1

Interne gegevens,

a. met betrekking tot de massabalans

b. met betrekking tot de warmtebalans

ad a.

De conversie in de reactor wordt berekend m.b.v. Russische literatuur (lit. 9). Hierin wordt de evenwichtsconversie (gebaseerd op CO_2) naar ureum gegeven:

$$X = 34,28 L - 1,77L^2 - 29,3 W + 3,699 LW + 0,9129 t - 0,07482 Lt + \\ - 10^{-6} \cdot 5,395 t^3 + 0,002293 P - 112,1$$

waarin: X = conversie in %.

L = NH_3/CO_2 -verhouding in de voeding.

W = $\text{H}_2\text{O}/\text{CO}_2$ -verhouding in de voeding.

t = temperatuur in $^{\circ}\text{C}$.

P = druk in kg/cm^2 .

dat's carbamaat + ureum? + ammon?

*keuze van
concentratie
systeem?*

De samenstelling van het gas naar de condensor en het gas uit de stripper werden berekend m.b.v. een artikel van dezelfde schrijver (lit.10).

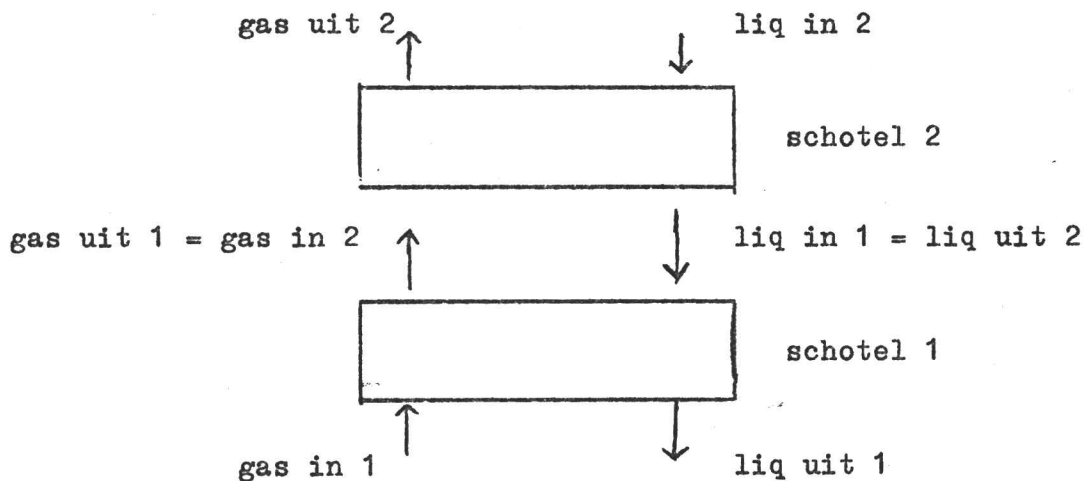
Hierin worden vergelijkingen gegeven voor de samenstellingen van gasfasen die in evenwicht zijn met NH_3 -carbamaat-ureum-water mengsels.

Hierbij dient het volgende aangetekend te worden:

De schrijver geeft 3 formules voor de berekening van de fracties NH_3 , CO_2 en H_2O in de gasfase. Bij de berekeningen is gebleken, dat de som van deze drie fracties die onafhankelijk van elkaar berekend kunnen worden, ongelijk aan 1 is. De vergelijking van de berekening van de fractie CO_2 bleek niet te voldoen, waarschijnlijk, omdat te weinig rekening was gehouden met de afwijking van het ideale gedrag van CO_2 met betrekking tot de oplosbaarheid in de vloeistof. De fracties NH_3 en H_2O werden berekend en de fractie CO_2 werd gevonden door de som van de eerste twee van 1 af te trekken. Deze methode gaf bevredigende resultaten. Door koppelen van de gegevens uit beide artikelen in een computerprogramma (bijlage 1) werd de massabalans over de reactor en de stripper berekend.

Voor de berekening van de massabalans over de carbamaatontleders en de compressor werd gebruik gemaakt van een berekeningsmethode volgens Wicar (lit. 11). Deze auteur berekent L-G-evenwichten in het systeem $\text{NH}_3\text{-CO}_2\text{-H}_2\text{O}$ -ureum bij lagere drukken.

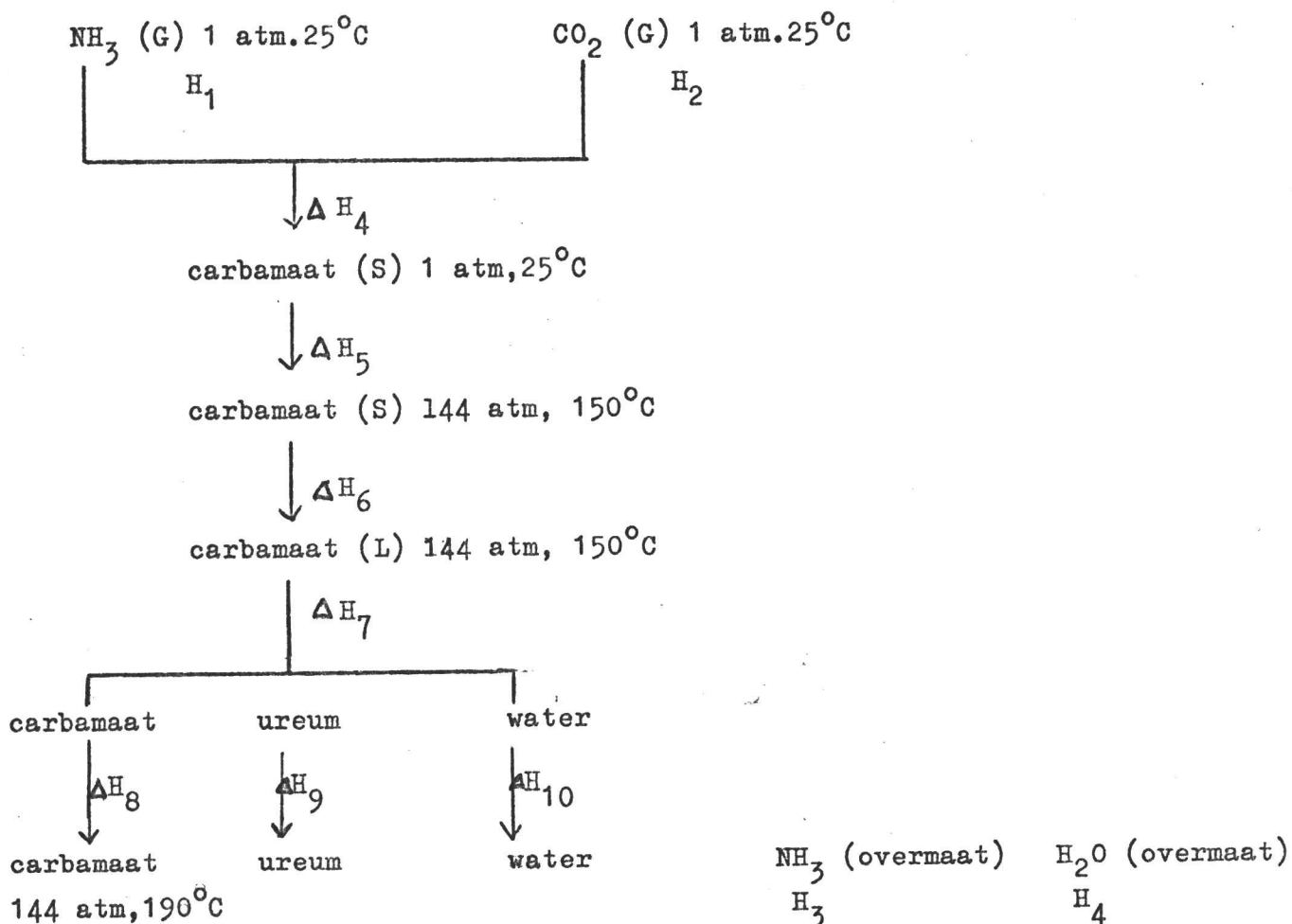
De massabalans over een ontleder wordt berekend door van de ontleder de uitgaande vloeistofstroom en de uitgaande gasstroom te bepalen. Deze zijn bekend via de vorige ontleder of omdat het de CO₂-voeding en de produktoplossing zijn. Nu wordt met de methode van Wicar bij een bepaalde vloeistofsamenstelling (die van de uitgaande vloeistof) de gassamenstelling berekend, welke hiermee in evenwicht is. De uitgaande gasstroom is dan ook bekend, zodat uit een balans over het geheel de inkomende vloeistof te berekenen is. Nu is de balans over de ontleder berekend voor één theoretische schotel. Voor meer schotels per ontleder wordt de berekening herhaald door nu als beginstromen te nemen de uitgaande gasstroom en de ingaande vloeistofstroom van de eerste schotel:



Via deze schotel-schotelberekening is dan de balans over de gehele ontleder te berekenen.

ad b

De warmtebalansen over condensor, reactor en stripper zijn berekend m.b.v. de enthalpie-inhouden van de verschillende molenstromen. Voor de gasstromen is de berekening niet al te moeilijk: de enthalpie-inhouden kunnen worden opgezocht in tabellen. Voor de vloeistofstromen is de berekeningswijze gevolgd zoals die is aangegeven door Otsuka (lit. 12) en nader uitgewerkt door Schoondorp (lit. 13). Een schema voor de berekening van een vloeistofmengsel, bestaande uit ammoniumcarbamaat, ureum, water en ammoniak is hieronder weergegeven:



Het gegeven schema geldt voor de vloeistof die uit de reactor komt en voor de vloeistof die uit de stripper komt. Voor de vloeistof uit de condensor geldt een analoog schema, hier is echter de temperatuur niet 190°C , maar 170°C . Immers, we stellen dat we het gasmengsel uit de reactor condenseren en koelen tot 170°C .

De enthalpie-inhoud van de gasstromen wordt als volgt berekend:

Stel de totaal druk op P atm, en de molaire fracties van NH_3 , CO_2 en H_2O zijn resp. X, Y en $(1-X-Y)$, dan kan de enthalpie-inhoud van de afzonderlijke componenten worden opgezocht in de beschikbare tabellen, nl. voor NH_3 bij $(X \times P)$ atm en 190°C , voor CO_2 bij $(Y \times P)$ atm en 190°C en voor H_2O bij $((1-X-Y) \times P)$ atm en 190°C .

M.b.v. de enthalpiebalansen over de verschillende onderdelen van de fabriek wordt de toe- of af te voeren warmte berekend.

Vermelding van de verschillende enthalpietermen uit de schema's voor de reactiemengsels:

- H_1	: $H_1 = 9394$	kcal/kmol		(lit. 14)
- H_2	: $H_2 = 8495,5$	kcal/kmol		(lit. 15)
- ΔH_4	: $\Delta H_4 = -38060$	kcal/kmol		(lit. 13)
- ΔH_5	: $\Delta H_5 = 4650$	kcal/kmol		(lit. 13)
- ΔH_6	: $\Delta H_6 = 4850$	kcal/kmol		(lit. 13)
- ΔH_7	: $\Delta H_7 = 3700$	kcal/kmol		(lit. 16)
- $\Delta H_8, \Delta H_9, \Delta H_{10}$				
	$\Delta H_8 + \Delta H_9 + \Delta H_{10} = 97,5 \times (T_s - 150)$	kcal/kmol carb.		(lit.13)
- H_3	: $H_3 = 9614$	kcal/kmol	$190^\circ\text{C}, 144$ atm	(lit.14)
	$H_3 = 9076$	kcal/kmol	$170^\circ\text{C}, 144$ atm	(lit.14)
- H_4	: $H_4 = 3499$	kcal/kmol	$190^\circ\text{C}, 144$ atm	(lit.17)
	$H_4 = 3125$	kcal/kmol	$170^\circ\text{C}, 144$ atm	(lit.17)

De warmtebalans over de carbamaatontleders volgt eenvoudig uit de massabalans erover. De benodigde warmte voor de ontleding volgt uit de toename van de gasstromen aan NH_3, CO_2 en water. Wordt deze toename vermenigvuldigd met het enthalpie-verschil per kmol dan is de benodigde warmte bekend. De warmte die vrijkomt als het gas afkoelt wordt berekend via $\Delta H = C_p \Delta T$, als ΔT het temperatuurverschil is

tussen gekomprimeerd gas en de ontleder. Evenzo wordt de warmte die vrijkomt als de inkomende vloeistof afkoelt gevonden. Bij autotherm bedrijf van de ontleder moet de som van deze drie warmtehoeveelheden nul zijn.

De temperatuurstijging van het gekomprimeerd gas wordt berekend door de kompressie als polytroop te beschouwen. Voor adiabatische kompressie geldt voor een ideaal gas :

$$\frac{T_2}{T_1} = \left(\frac{P_2}{P_1} \right)^{\frac{K-1}{K}}$$

Daar in werkelijkheid de kompressie niet volledig adiabatisch is moet een iets gewijzigde formule worden gebruikt:

$$\frac{T_2}{T_1} = \left(\frac{P_2}{P_1} \right)^{\frac{K-1}{K \cdot \eta_{pol.}}}$$

$\eta_{pol.}$ is hier het rendement van de polytrope kompressie. De enthalpie-stijging is dan te berekenen volgens $\Delta H = \bar{c}_p (T_2 - T_1)$ waarbij \bar{c}_p de c_p is bij $T = .5 * (T_2 - T_1)$.

Bovenstaande formule geldt echter voor één gas. Daar wij echter met een gasmengsel te maken hebben zou deze methode niet opgaan. Dit kan wel als we als gas een "gemiddeld" gas nemen, d.w.z. met eigenschappen die gevonden worden uit de samenstelling en de afzonderlijke eigenschappen van de componenten.

Zo geldt voor c_p bijvoorbeeld: $\bar{c}_p = \sum c_{pi} f_i$ waarbij f_i de molfractie van de i-de komponent is.

Als de nu berekende eindtemperatuur boven een bepaalde waarde komt (hier is daarvoor 250°C gekozen) moet het gas gekoeld worden in een carbamaatontleder. Na deze algemene uiteenzetting volgt een meer gedetailleerde bij de beschrijving van de berekening.

Kompressor

*Als Cp
constante*

De kompressor bestaat uit een aantal trappen, die achtereenvolgens de druk verhogen van 5 tot 144 atm. Er is gekozen dat elke trap dezelfde drukverhouding tussen begin- en einddruk heeft. Per mol gas is dan steeds hetzelfde vermogen nodig. De drukverhouding per trap moet voor een centrifugaalkompressor met radiale waaier bij bepaalde waarden liggen nl. 1.15 tot 1.20. Daar de drukverhouding in dit geval $\sqrt[n]{\frac{144}{5}}$ is, met n als aantal trappen, is tevens het aantal trappen begrensd. Het aantal trappen hangt ook van de condensatiepunten van het gas af. Bovendien moet het aantal trappen zo gekozen worden, dat de carbamaatontleding voldoende kan geschieden. Bij een te hoge druk zal de werking van de ontleder niet groot zijn. Ook mag het niet voorkomen, dat er te vaak gekoeld moet worden, m.a.w. dat in één trap de temperatuurstijging zo groot is, dat de temperatuur weer boven 250°C komt. Een geschikt aantal trappen blijkt 18 te zijn, de drukverhouding is dan 1.21 .

Uit de formule

$$\frac{T_2}{T_1} = \left(\frac{P_2}{P_1} \right)^{\frac{k-1}{k \cdot \eta_{pol}}}$$

blijkt, dat naast η_{pol} ook k bekend moet zijn. Dit is de verhouding c_p/c_v . Voor een ideaal gas geldt $c_v = c_p - R$. Het is nodig c_p te weten als functie van druk, temperatuur en samenstelling. We beschouwen nl. een "gemiddeld" gas. Voor een niet-ideaal gas hangt c_p ook van de druk af. Deze drukafhankelijkheid kan gevonden worden uit gegeneraliseerde grafieken. In het ideale geval ($p = 0$) is de temperatuurafhankelijkheid van c_p berekend (lit. 18) voor ieder van de componenten. Om nu \bar{c}_p te vinden moet er twee maal gemiddeld worden. Allereerst moet c_p genomen worden bij de gemiddelde temperatuur van de kompressie.

Daar echter de eindtemperatuur T_2 van c_p afhangt, dient dit iteratief te gebeuren. Vervolgens moet c_p gemiddeld worden over de componenten van het gasmengsel: $\bar{c}_{p_m} = \sum \bar{c}_{p_{t_i}} f_i$, waarbij $\bar{c}_{p_{t_i}}$ de temperatuurgemiddelde c_p is van de i -de komponent en f_i de molfractie van de i -de komponent in het gas.

Van de zo gevonden c_p kan nu nog de drukkorrectie gevonden worden uit een gegeneraliseerde grafiek (lit. 18). Hierin is $c_p - c_p^*$ uitgezet als functie van p_r en T_r , de gereduceerde druk en temperatuur. c_p^* is de c_p bij ideale condities. De gereduceerde druk en temperatuur worden gevonden met de gemiddelde kritische konstanten van het mengsel:

$$\bar{T}_k = \sum T_{k_i} f_i \quad \text{en} \quad \bar{p}_k = \sum p_i f_i.$$

Voor druk en temperatuur worden weer gemiddelde waarden genomen. Als de zo berekende temperatuur van het gekomprimeerde gas niet boven de 250°C uitkomt, wordt deze temperatuur als starttemperatuur voor de volgende trap genomen en wordt de procedure herhaald. Is dit wel het geval dan wordt de laatst berekende trap als niet aanwezig beschouwd en gaat het kompressorgas ter koeling in een nieuwe carbamaatontleder. Voor de volledige berekening met het gebruikte programma zie bijlage II.

In voorgaande processchema's is de kompressorberekening anders verlopen. Er werd in een T - S -diagram opgezocht wat de temperatuurstijging van één komponent was bij een bepaalde drukverhouding in het geval van adiabatistische kompressie. Dit werd voor alle componenten gedaan waarna een gemiddelde eindtemperatuur bepaald werd. Aan deze methode kleven de volgende bezwaren:

1. de kompressie is niet isentroop, maar polytroop.
2. als isentrope kompressie wordt aangenomen, geldt $\Delta S = 0$ alleen voor het totale gasmengsel, niet voor iedere komponent. Voor een komponent

is niet isentroop

*is niet isentroop
het is met kompressie*

kan $\Delta S > 0$ voor een andere $\Delta S < 0$, zodanig dat $\sum \Delta S_i = 0$ (zie lit.19 blz. 399 example 12:4).

3. aflezen van benodigde gegevens uit grafieken is een minder geslaagde manier bij gebruik van computerprogramma's.

IV. Beschrijving van het proces

De apparatuur bestaat uit de volgende onderdelen:

	code
kompessor	C6, C9, C12, C15
carbamaatontleders	T7, T10, T13, T16
stripper	T4
reactor	R2
kondensor	H3
NH ₃ -pomp	P1
warmtewisselaars	H5, H8, H11, H14
stoomturbine	Tu17

Ammoniakvoeding wordt via de NH₃-voedingspomp onderin de reactor gepompt. De reactor werkt bij 190°C en 144 atm. CO₂-voeding wordt in de eerste carbamaatontleder T16 geblazen en wordt vervolgens door de kompressor op synthesesdruk gebracht in 18 trappen. Door de directe koeling van het te komprimeren gas in de carbamaatontleders nemen de massastromen NH₃, CO₂ en H₂O steeds toe. De carbamaatontleders werken bij lagere temperatuur en druk. Het gekomprimeerde gasmengsel wordt onderin de stripper geblazen. In tegenstroom met de uit de reaktor komende vloeistof strippen de gassen hier ca. 90% van de onomgezette reactanten uit de vloeistof. De stripper werkt bij dezelfde druk en temperatuur als de reaktor. De gassen, die de stripper verlaten, worden onderin de reaktor geleid. Tijdens het doorlopen van de reaktor treedt de reactie naar carbamaat en ureum op, waardoor de hoeveelheid gas afneemt. De reaktievloeistof verlaat de reaktor bovenin en wordt naar de stripper geleid. Een gasstroom van NH₃, CO₂ en H₂O verlaat hier ook de reaktor naar de kondensor waar overtollige reaktiewarmte wordt afgevoerd. Hier wordt stoom verkregen van 3 atm. De uit de kondensor komende vloeistof wordt onderin de reaktor geleid. In de stripper wordt de benodigde

warmte toegevoerd door kondenserende stoom om de pijpen van de stripper. De warmtehuishouding en massabalans van het lagedrukgedeelte (de carbamaatontleders) wordt geregeld m.b.v. een aantal kleine warmtewisselaars, H5, H8, H11 en H14.

In de carbamaatontleders wordt de resterende hoeveelheid NH_3 en carbamaat uit de oplossing verdreven. De produktstroom verlaat uiteindelijk de carbamaatontleder T16.

V. Procescondities en -gegevens.

A. De massabalans

Dit proces werd ontworpen voor een produktie van 1500 ton ureum per dag. Dit komt overeen met 17.37 kg/s ureum of .289 kmol/s ureum.

Nodig voor deze produktie is .578 kmol/s NH_3 en .289 kmol/s CO_2 . Bij deze hoeveelheden komt nog het verlies aan ammoniak en carbamaat, omdat de carbamaatontleders niet alle onomgezette NH_3 en carbamaat verwijderen. Niet verwijderd wordt .001 kmol/s NH_3 en .001 kmol/s carbamaat. Totaal aan reaktanten is dus nodig:

$$.581 \text{ kmol/s } \text{NH}_3 \text{ en } .290 \text{ kmol/s } \text{CO}_2$$

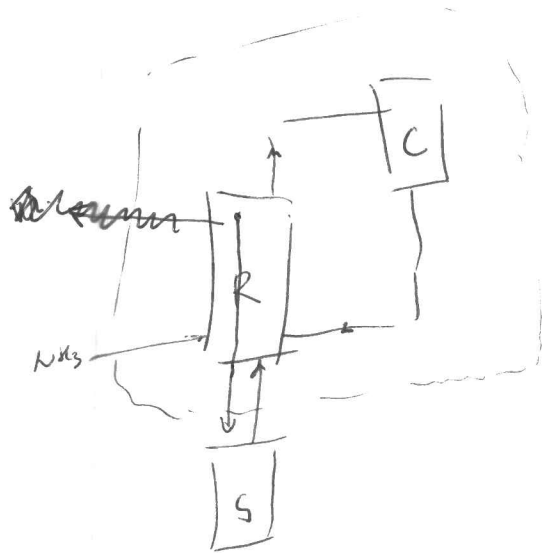
1. Massabalans over de reaktor

In de reaktor wordt ingevoerd de NH_3 -voeding en het gas komende uit de stripper. Tevens komt vloeistof uit de kondensor de reaktor in. Bij de massabalans over de reaktor is deze hoeveelheid niet van belang, daar de kondensor een totale kondensor is, m.a.w. al het inkomende gas wordt gekondenseerd. Dus de uitgaande reaktorgasstroom is even groot als de kondensstroom. Uit de reaktor komt een vloeistofstroom, die het gevormde ureum en water, de niet-omgezette carbamaat en ammoniak bevat.

Tevens bevat deze stroom water dat afkomstig is van het inkomende gas uit de stripper. Deze hoeveelheid water zal berekend worden met lit. 10.

Als de conversie naar ureum, betrokken op CO_2 X is, zal voor de produktie van .289 kmol/s ureum totaal nodig zijn:

$$.289/X \text{ kmol/s } \text{CO}_2 \text{ en } \textcircled{3} \cdot .289/X \text{ kmol/s } \text{NH}_3.$$



Wewerken immers met een bruto NH_3/CO_2 -verhouding $L = 3$.

De NH_3 -voeding (.581 kmol/s) wordt direkt als vloeistof in de reaktor ingevoerd. Dus het gas uit de stripper moet bevatten:

$$.289/X \text{ kmol/s CO}_2$$

$$3 \times .289/X - .581 \text{ kmol/s NH}_3$$

De onomgezette hoeveelheden zijn:

$$.289/X - .289 = .289 \times (1 - X)/X \text{ kmol/s CO}_2$$

$$3 \times .289/X - .578 \text{ kmol/s NH}_3 = .289 \left(\frac{3 - 2X}{X} \right)$$

Deze stromen zullen uit de reaktor naar de stripper gaan, waarbij de CO_2 met NH_3 wordt omgezet tot carbamaat. Bovendien zal de uitgaande reaktorstroom .289 kmol/s ureum bevatten en $.289 + w$ kmol/s H_2O als w de molstroom H_2O is die zich in het stripgas bevindt.

Uitgaande reaktorstroom: $.289 \times (1 - X)/X$ kmol/s carbamaat
.289/X kmol/s NH_3
.289 kmol/s ureum
.289 + w kmol/s H_2O

De conversie X is afhankelijk van de temperatuur, de druk en de twee brutoverhoudingen L (NH_3/CO_2) en W ($\text{H}_2\text{O}/\text{CO}_2$). X kan berekend worden met de formule van Kucheryavi (lit.9). De gegevens voor deze berekening zijn alle bekend, behalve W . Hiervoor is het nodig te weten wat w is, de molstroom H_2O in het stripgas. Deze kan berekend worden via een gassamenstelling, in evenwicht met een bepaalde vloeistof-samenstelling bij reaktorcondities. Zie bijlage I. Er werd via een iteratie berekend dat het molpercentage water in het stripgas 8,1 % was. Hier behoort een $\text{H}_2\text{O}/\text{CO}_2$ -verhouding van .238 bij. De conversie is dan .647. Ook kan met de berekende gassamenstelling worden gevonden, dat $w = .106$ kmol/s H_2O . De samenstelling van het kon-

densorgas zal zodanig zijn, dat dit gas in evenwicht is met de uitgaande reaktorvloeistof. Dit gas bevatte 8.1 % H₂O (zie bijlage I). De stromen van en naar de kondensor worden gevonden m.b.v. de warmtebalans (zie aldaar) wordt berekend, dat de gasstroom van reaktor naar kondensor bestaat uit:

.806 kmol/s NH₃

.316 kmol/s CO₂

.111 kmol/s H₂O

De massabalans over de reaktor wordt dan :

	in		uit	
	gas	vloeistof	gas	vloeistof
	kmol/s	kmol/s	kmol/s	kmol/s
NH ₃	.760	.849	.806	.446
CO ₂	.447		.269	
AC		.269		.158
U		.0		.289
H ₂ O	.106	.095	.095	.395
Totaal		71,62 kg/s		71,61 kg/s

2. Massabalans over de stripper

Van de massabalans over de stripper zijn al bekend de ingaande vloeistofstroom en de uitgaande gasstroom (zie reaktor). We stellen dat de stripper een rendement moet hebben van ongeveer 90%, d.w.z. 90% van de niet omgezette carbamaat en de overmaat NH₃ moet hierin verwijderd worden. Dit betekent dat de uitgaande vloeistofstroom van de stripper dan zal bevatten:

.045 kmol/s NH₃
 .016 kmol/s AC³
 .289 kmol/s U
 y kmol/s H₂O

Deze vloeistofstroom zal naar de carbamaatontleders gaan om de rest van het carbamaat en de ammoniak te verwijderen. De berekening van de massabalans over de carbamaatontleders geschiedt echter zodanig, dat de vloeistofstroom welke uit de stripper de ontleders inkomt nooit precies gelijk gemaakt kan worden aan bovenstaande vloeistofstroom. De volgende stroom is berekend:

.045 kmol/s NH_3
 .014 kmol/s AC
 .289 kmol/s U
 .313 kmol/s H_2O

Dit betekent voor de gewenste rendementen van de stripper 89.9% en 91.1% voor resp.: NH_3 en carbamaat. De water-vloeistofstroom in de stripper loopt terug van .395 naar .313 kmol/s, ofwel tot 79.2%, wat een rendement van 20.8% betekent. Dit rendement moet klein zijn, omdat er anders teveel water in het stripgas komt, wat nadelig op de conversie werkt.

De massabalans over de stripper wordt dan:

	in		uit	
	gas kmol/s	vloeistof kmol/s	gas kmol/s	vloeistof kmol/s
NH_3	.070	.446	.766	.045
CO_2	.302		.447	
AC		.158		.014
U		.289		.289
H_2O	.025	.395	.106	.313
totaal	59.6 kg/s		59.4 kg/s	

De massabalans over de carbamaatontleders

Het aantal carbamaatontleders volgt uit het aantal malen dat het kompressiegas gekoeld moet worden. Dit bleek vier maal te zijn, De drukken van de carbamaatontleders moeten steeds korresponderen met de druk van het kompressorgas, dat ter koeling in de ontleder komt. Deze drukken zijn resp. 5, 22.3, 56.6 en 99.1 atmosfeer. De druk van 5 atm. voor de eerste ontleder wordt gekozen, omdat de CO_2 -voeding beschikbaar is onder een druk van 5 atm. De voeding behoeft dan niet meer afzonderlijk gekomprimeerd te worden, maar kan direkt in het proces ingevoerd worden. De temperaturen waarbij de ontleders werken moeten zo gekozen worden, dat aan twee eisen wordt voldaan:

1. de ontleders moeten zo werken, dat de NH_3 - en carbamaat-vloeistofstromen teruggebracht worden van resp. .045 en .014 tot .001 en .001 kmol/s.
2. het kompressorgas moet voldoende kunnen worden gekoeld, zodat het aantal ontleders niet ondoelmatig groot wordt.

De gevonden temperaturen zijn: 70, 132, 174 en 193°C .

Het aantal schotels per ontleder moet zo gekozen worden, dat voldoende ontleding plaatsvindt. De beste combinatie van de aantallen schotels blijkt 3 theoretisch schotels per ontleder te zijn.

Ontleder nr.	T7	T10	T13	T16
druk, atm.	5	22.2	55.6	99.1
temp., $^\circ\text{C}$	70	132	174	193
aantal theor.schot.	3	3	3	3

De methode van Wicar ter berekening van de massabalans geeft in eerste instantie de partiaalspanningen van NH_3 en CO_2 . Hieruit moeten de molenstromen worden gevonden. Dit gebeurt als volgt:

Daar er .290 kmol/s CO₂-voeding meegekomprimeerd wordt, zal relatief gezien de CO₂-stroom weinig in grootte toenemen. De toename kan gekenmerkt worden door p_{cb}, de berekende CO₂-partiaalspanning. De totale CO₂-druk wordt gevonden als $p_{CO_2} = p - p_{NH_3} - p_{H_2O}$, als p de ontleder-druk is. p_{H₂O} wordt gevonden met de wet van Raoult. De nieuwe uitgaande molenstroom CO₂ wordt nu berekend uit de ingaande molenstroom CO₂ via : $g_{CO_2u} = g_{CO_2i} * p_{CO_2} / (p_{CO_2} - p_{cb})$;

evenzo voor bijv. NH₃

$$g_{NH_3u} = g_{NH_3i} * p_{NH_3} / (p_{CO_2} - p_{cb})$$

Voor verdere bijzonderheden zie bijlage II.

Het kan voorkomen, dat de nieuw berekende stroom kleiner is dan de voorgaande. Er treedt dan condensatie op. Dit gebeurt met H₂O in ontleder 4. De oorzaak ligt in het feit, dat de drukstijging groter is dan met de temperatuurstijging overeenkomt, zodat de aanwezige hoeveelheid water de berekende partiaaldruk overschrijdt. Dit is alleen maar gunstig daar de recirculatie van water zo gering mogelijk moet worden gehouden.

B. Warmtebalans

Voor de berekening hiervan werd gebruik gemaakt van de in hoofdstuk III genoemde gegevens. Voor de warmtebalans over stripper, reaktor en kondensor werden de volgende enthalpie-inhouden berekend:

1. De enthalpie-inhoud van de vloeistofstroom uit de reaktor: L 2

144 atm., 190°

De samenstelling van deze vloeistof is:

ammoniumcarbamaat	:	.158 kmol/s
ammoniak	:	.447 kmol/s
ureum	:	.289 kmol/s
water	:	.395 kmol/s

dus zonder reactie : $2 \times (.289 + .158) = .894$ kmol/s NH_3 en $.447$ kmol/s overmaat.
 en $.447$ kmol/s CO_2
 en $.106$ kmol/s H_2O

Enthalpietermen:

H_1	:	9394	\times	.894	=	8398	kcal/s
H_2	:	8495.5	\times	.447	=	3797	kcal/s
ΔH_4	:	-38060	\times	.447	=	-17013	kcal/s
ΔH_5	:	4650	\times	.447	=	2079	kcal/s
ΔH_6	:	4850	\times	.447	=	2168	kcal/s
ΔH_7	:	3700	\times	.289	=	1069	kcal/s
$\Delta H_{8, 9, 10}$:	3900	\times	.447	=	1740	kcal/s
H_3	:	9614	\times	.447	=	4297	kcal/s
H_4	:	3499	\times	.106	=	371	kcal/s

HL2 = 6907 kcal/s

2. De enthalpie-inhoud van de vloeistof uit de stripper : L3

144 atm. 190°C

De samenstelling van deze vloeistof is:

ammoniumcarbamaat : .014 kmol/s
ammoniak : .045 kmol/s
ureum : .289 kmol/s
water : .313 kmol/s

dus zonder reactie: .606 kmol/s NH₃ en .045 kmol/s (overmaat)
en .303 kmol/s CO₂
en .024 kmol/s H₂O

Enthalpietermen:

H ₁	:	9394	⊗	.606	=	5693	kcal/s
H ₂	:	8495.5	⊗	.303	=	2574	kcal/s
ΔH ₄	:	-38060	⊗	.303	=	-11532	kcal/s
ΔH ₅	:	4650	⊗	.303	=	1409	kcal/s
ΔH ₆	:	4850	⊗	.303	=	1470	kcal/s
ΔH ₇	:	3700	⊗	.289	=	1069	kcal/s
ΔH _{8,9,10}	:	3900	⊗	.303	=	1182	kcal/s
H ₃	:	9614	⊗	.045	=	433	kcal/s
H ₄	:	3499	⊗	.024	=	84	kcal/s

HL3 = 2381 kcal/s

3. De enthalpie-inhoud van de vloeistof uit de kondensor: L1

144 atm., 170°C

De grootte van deze vloeistofstroom is nog onbekend; zij volgt uit de warmtebalans. Daarom wordt aangenomen, dat deze vloeistofstroom = X kmol/s. (zonder reactie)

De samenstelling wordt dan:

ammoniumcarbamaat	:	.230 X kmol/s	(.269 kmol/s)
ammoniak	:	.229 X kmol/s	(.268 kmol/s)
water	:	.081 X kmol/s	(.095 kmol/s)
dus zonder reactie	:	.460 X kmol/s NH ₃	en .229 X kmol/s overmaat
		en .230 X kmol/s CO ₂	
		en .081 X kmol/s H ₂ O	

Enthalpietermen:

H ₁	:	9394	⊗	.460 X =	4321 X kcal/s
H ₂	:	8495.5	⊗	.230 X =	1954 X kcal/s
ΔH ₄	:	-38060	⊗	.230 X =	-8754 X kcal/s
ΔH ₅	:	4650	⊗	.230 X =	1070 X kcal/s
ΔH ₆	:	4850	⊗	.230 X =	1116 X kcal/s
ΔH ₇	vervalt				
ΔH _{8,9,10}	:	1950	⊗	.230 X =	449 X kcal/s
H ₃	:	9076	⊗	.229 X =	2078 X kcal/s
H ₄	:	3125	⊗	.081 X =	253 X kcal/s
					<hr/>
				HL1 =	2487 X kcal/s
				(HL1 =	2910 kcal/s)

De tussen haakjes geplaatste waarden werden berekend met de later te berekenen waarde van X.

ΔH₇ vervalt omdat er nog geen reactie naar ureum plaats vindt.

4. De enthalpie-inhoud van de gasstroom uit de kompressor : G1
144 atm, 230°C (zie voor de keuze van de temperatuur de massa-
balans over de carbamaatontleders en bijlage II)

Samenstelling : .070 kmol/s NH₃
.303 kmol/s CO₂
.025 kmol/s H₂O

dus:

P_{NH_3}	= 25,4 atm.	H = 11157 kcal/kmol (lit.14)
P_{CO_2}	= 109,6 atm.	H = 10032 kcal/kmol (lit.15)
$P_{\text{H}_2\text{O}}$	= 9,0 atm.	H = 12481 kcal/kmol (lit.17)

Enthalpietermen:

NH ₃	: .070	× 11157	= 825 kcal/s
CO ₂	: .303	× 10032	= 3040 kcal/s
H ₂ O	: .025	× 12481	= 312 kcal/s

HG1 = 4177 kcal/s

5. De enthalpie-inhoud van de gasstroom uit de stripper: G2
144 atm., 190° C

Samenstelling: .760 kmol/s NH₃
.447 kmol/s CO₂
.106 kmol/s H₂O

dus:

P_{NH_3}	= 83.4 atm.	H = 10260 kcal/kmol (lit.14)
P_{CO_2}	= 49 atm.	H = 9768 kcal/kmol (lit.15)
$P_{\text{H}_2\text{O}}$	= 11.6 atm.	H = 11990 kcal/kmol (lit.17)

Enthalpie-termen:

$$\text{NH}_3 : .760 \times 10260 = 7798 \text{ kcal/s}$$

$$\text{CO}_2 : .447 \times 9768 = 4366 \text{ kcal/s}$$

$$\text{H}_2\text{O} : .106 \times 11990 = 1271 \text{ kcal/s}$$

$$\text{HG2} = 13435 \text{ kcal/s}$$

6. De enthalpie-inhoud van de gasstroom uit de reaktor: G3

144 atm., 190° C

De totale hoeveelheid gas hebben wij op blz. = X kmol/s
gesteld.

Samenstelling:

$$\text{NH}_3 : .689 \text{ X kmol/s} \quad (= .806 \text{ kmol/s})$$

$$\text{CO}_2 : .230 \text{ X kmol/s} \quad (= .269 \text{ kmol/s})$$

$$\text{H}_2\text{O} : .081 \text{ X kmol/s} \quad (= .095 \text{ kmol/s})$$

dus:

$$P_{\text{NH}_3} = 99.2 \text{ atm.} \quad H = 10100 \text{ kcal/kmol (lit.14)}$$

$$P_{\text{CO}_2} = 33.1 \text{ atm.} \quad H = 9680 \text{ kcal/kmol (lit.15)}$$

$$P_{\text{H}_2\text{O}} = 11.7 \text{ atm.} \quad H = 11990 \text{ kcal/kmol (lit.17)}$$

Enthalpietermen:

$$\text{NH}_3 : .689 \text{ X} \times 10100 = 6959 \text{ X kcal/s}$$

$$\text{CO}_2 : .230 \text{ X} \times 9680 = 2226 \text{ X kcal/s}$$

$$\text{H}_2\text{O} : .081 \text{ X} \times 11990 = 971 \text{ X kcal/s}$$

$$\text{HG3} = 10156 \text{ X kcal/s}$$

$$(\text{HG3} = 11883 \text{ kcal/s})$$

De tussen haakjes geplaatste waarden werden weer berekend met de later te berekenen waarde van X.

7. De enthalpie-inhoud van de voedingsstromen

Ammoniak: 144 atm., 15°C

$$H = 4229 \text{ kcal/kmol} \quad (\text{lit.14})$$

$$\text{HFN} = 4229 \times .58 \text{ kcal/s} = 2453 \text{ kcal/s}$$

Kooldioxide: 5 atm., 15°C

$$H = 8359 \text{ kcal/kmol} \quad (\text{lit.15})$$

$$\text{HFC} = 8359 \times .290 \text{ kcal/s} = 2424 \text{ kcal/s}$$

M.b.v. de voorgaande berekeningen kunnen de volgende drie balansen worden berekend:

a. De warmtebalans over de reaktor en de kondensor

Q1 is de afgevoerde warmte in de kondensor.

$$Q1 + \text{HL2} = \text{HFN} + \text{HG2}$$

$$Q1 + 6907 = 2453 + 13435$$

$$Q1 = 8981 \text{ kcal/s}$$

De afvoer gebeurt door gas van 190°C en 144 atm. te kondenseren en af te koelen tot 170°C.

b. De warmtebalans over de stripper

Q2 is de toegevoerde warmte in de stripper

$$Q2 + \text{HL2} + \text{HG1} = \text{HL3} + \text{HG2}$$

$$Q2 + 6907 + 4177 = 2381 + 13435$$

$$Q2 = 4732 \text{ kcal/s}$$

De toevoer gebeurt door kondenserende stoom op de pijpen van de stripper.

c. De warmtebalans over de kondensor

Hiermee wordt de molenstroom naar de kondensor berekend:

$$Q_1 + HL_1 = HG_3$$

$$8981 + 2487 X = 10156 X$$

$$X = 1,17 \text{ kmol/s}$$

Met deze waarde kan ter controle de warmtebalans over de reaktor worden berekend:

$$HL_1 + HG_2 + HF_N \stackrel{?}{=} HG_3 + HL_2$$

$$2910 + 13435 + 2453 \stackrel{?}{=} 11883 + 6907$$

$$18798 \stackrel{?}{=} 18790$$

De reaktor werkt dus inderdaad autotherm,

De warmtebalans over de carbamaatontleders.

Zoals al eerder is gezegd moeten de carbamaatontleders zorgen voor koeling van het kompressorgas. De warmte die het gas afstaat kan gebruikt worden voor de ontleding. Het zal dan mogelijk zijn de ontleders autotherm te laten werken, wat een besparing in stoomkosten geeft. In een ontleder komen het hete kompressorgas en de vloeistof van de volgende ontleder. Daar iedere ontleder steeds bij een hogere temperatuur werkt dan de voorafgaande, zal deze inkomende vloeistofstroom ook warmte kunnen leveren voor de ontleding. Om te onderzoeken of autotherme werking mogelijk is zullen nu achtereenvolgens de benodigde warmtestroom voor de ontleding en de warmtestromen van gas en vloeistof berekend worden voor de tweede ontleder.

De ontledingswarmte voor ammoniumcarbamaat ($AC_1 \rightleftharpoons 2 NH_3_g + CO_2_g$) bedraagt : 28000 kcal/kmol (lit.4)

De desorbtiwarmte van NH_3 is volgens Otsuka (lit.12) moeilijk te bepalen. De waarde varieert van .5 tot 1.0 kcal/mol. Wij zullen nemen 500 kcal/kmol. Verder zal er nog water verdampen. Voor de verdampingswarmte vinden we (zie bijlage III) : $\Delta H = 15552 - 15.408 \times T$ kcal/kmol.

T : temperatuur in graden Kelvin.

Met behulp van de massabalans over de tweede ontleder kunnen nu de volgende warmtestromen berekend worden :

Carbamaatontleding : $Q_w = (.004 - .002) \times 28000 = 56.0$ kcal/s
NH₃-desorbtie : $Q_w = (.017 - .004) \times 500 = 6.5$ kcal/s
H₂O-verdamping : $Q_w = (.309 - .298) \times 9311 = \underline{102.4}$ kcal/s
Totaal nodig voor ontleding : $Q_{wo} = 164.9$ kcal/s

Om de warmtestroom van het kompressorgas te berekenen zijn de c_p -waarden van de componenten nodig. Deze vinden we in lit.18 :

$$\begin{aligned} \text{NH}_3 : \quad c_p &= 5.316 + 1.4285 \times 10^{-2} \times T - .8362 \times 10^{-5} \times T^2 + 1.784 \times 10^{-9} \times T^3 \\ \text{CO}_2 : \quad c_p &= 6.585 + .61251 \times 10^{-2} \times T + .2366 \times 10^{-5} \times T^2 - 1.598 \times 10^{-9} \times T^3 \\ \text{H}_2\text{O} : \quad c_p &= 7.700 + .04594 \times 10^{-2} \times T + .2521 \times 10^{-5} \times T^2 - .8587 \times 10^{-9} \times T^3 \end{aligned}$$

c_p wordt hier gegeven in kcal/kmol $^{\circ}\text{K}$. T is de temperatuur in graden Kelvin.

Als temperatuur bij de berekening nemen we de gemiddelde temperatuur tussen niet-gekoeld kompressorgas en carbamaatontleder. De totale warmtestroom wordt nu :

$$Q_{wg} = (\sum c_{pi} \times g_i) \times (T_2 - T_1)$$

g_i : molenstroom i-de komponent in kmol/s.

T_2 : temperatuur gas aan uitgang kompressortrap.

T_1 : temperatuur ontleder.

Voor de tweede ontleder wordt zo berekend :

$$Q_{wg} = 328.8 \text{ kcal/s}$$

Tenslotte moet de warmtestroom die de inkomende vloeistof levert berekend worden. De berekening valt uiteen in drie gedeelten.

1 $^{\circ}$. De c_p van vloeibaar carbamaat kan 105 kcal/kmol gesteld worden.

(lit.12). Otsuka berekent namelijk voor vast carbamaat bij 180 $^{\circ}\text{C}$

$c_{ps} = .618 \text{ kcal/kg}^{\circ}\text{C}$. Met $c_{pl}/c_{ps} = 2.5$ (voor anorganische zouten)

en door vermenigvuldigen met 78 wordt dan de waarde 105 kcal/kmol $^{\circ}\text{K}$ verkregen.

2 $^{\circ}$. Voor vloeibaar NH_3 is c_p als functie van t bekend. Uit lit. 12 :

$$c_{pl} = 1.07 + .378 \times 10^{-2} \times t - .130 \times 10^{-4} \times t^2 - .325 \times 10^{-6} \times t^3$$

c_{pl} in kcal/kg $^{\circ}\text{K}$, t = temperatuur in graden Celsius.

3 $^{\circ}$. Nu moet voor ureum en water nog een c_p gevonden worden. Volgens

lit.25 : $c_p = .9988 - .6494 \times W + .3025 \times W^2 - .1286 \times W^3 \text{ kcal/kg}^{\circ}\text{C}$.

W : gewichtsfractie ureum.

Deze formule geldt voor ureum-watermengsels bij 25 $^{\circ}\text{C}$. Daar er geen andere relatie bekend is zal toch bovenstaande gebruikt worden.

De warmtestroom kan nu berekend worden volgens :

$$Q_{wl} = (\sum c_{pi} \times l_i) \times \Delta T_1$$

l_i : molenstroom i-de component, kmol/s

ΔT_1 : temperatuurverschil van opeenvolgende ontleders.

Voor de tweede ontleder geeft dit :

$$Q_{wl} = 634.8 \text{ kcal/s.}$$

We verkrijgen nu de netto hoeveelheid warmte die per seconde nog moet worden toegevoerd :

$$Q_{wn} = Q_{wo} - Q_{wg} - Q_{wl} = -798.7 \text{ kcal/s.}$$

Dit betekent dat er meer warmte vrijkomt dan voor ontleding nodig is.

Om dit op te vangen zal de in de ontleder komende vloeistof gekoeld moeten worden. Dit zal makkelijker zijn dan gaskoeling omdat de warmteoverdrachtscoëfficiënt veel hoger zal zijn. Bovendien behoeft geen rekening gehouden te worden met condensatie van het gas. De berekening van de vloeistoftemperatuur waarmee de inkomende vloeistof de ontleder autotherm laat werken geschiedt met bovenstaande gegevens over de c_p van de vloeistofcomponenten. De in de ontleder netto toe te voeren warmtestroom moet nul zijn. Dit betekent dan voor Q_{wl} :

$$Q_{wl} = Q_{wo} - Q_{wg} = -163.9 \text{ kcal/s.}$$

De vloeistof moet hier zelfs tot onder ontledertemperatuur gekoeld worden. Met behulp van $(\sum c_{pi} l_i) \times (T_k - T_1) = -163.9 \text{ kcal/s}$ kan nu T_k berekend worden. Dit dient iteratief te geschieden, daar de c_p 's bij de gemiddelde temperatuur genomen moeten worden. Voor de tweede ontleder krijgen we dan voor de temperatuur tot waar gekoeld moet worden 121.1°C .

De in de warmtewisselaar af te voeren warmte is dan 798.1 kcal/s .

De berekening van de warmtebalans voor de overige ontleders verloopt op identieke wijze. Alleen voor de eerste ontleder is er geen inkomende hete gasstroom, maar moet de inkomende CO₂-voedingsstroom opgewarmd worden van 15°C tot 70°C , wat 138.8 kcal/s vraagt. De verdere berekening verloopt dan als boven.

De vier balansen worden in onderstaande tabel gegeven. Dat de hierboven berekende waarden afwijken van de overeenkomstige waarden in de tabel wordt veroorzaakt doordat bij de eerste berekening van afgeronde waarden gebruik is gemaakt.

Nummer ontleder		1	2	3	4
Ontledertemp.	°C	70.0	132.0	174.0	193.0
Ontleding	kcal/s	130.7	163.5	180.8	155.2
Gas in	kcal/s	-138.8 [⊗]	328.8	215.1	153.6
Vloeistof in	kcal/s	269.5	-165.3	-34.3	1.6
Koeltemp.	°C	88.4	121.1	171.9	193.0
Afvoer wisselaar	kcal/s	640.5	798.1	329.1	-50.1

[⊗] opwarmen CO₂-voeding.

Het kompressorvermogen.

Om het vermogen dat aan de kompressor toegevoerd moet worden te berekenen is het nodig de enthalpiestijging van het gas te weten. Het vermogen is dan :

$$P_{\text{eff.}} = \Delta H \times Q_{\text{mol}}$$

ΔH : enthalpiestijging in kcal/kmol.

Q_{mol} : gasstroom in kmol/s.

In ons geval is Q_{mol} echter niet konstant over de kompressor, maar neemt ten gevolge van de ontleding toe. Voor iedere kompressortrap wordt daarom het produkt $\Delta H \times Q_{\text{mol}}$ berekend. Een gemiddelde ΔH wordt berekend via

$$\Delta H = \bar{c}_p \times (T_2 - T_1)$$

Hierbij is \bar{c}_p gemiddeld over de temperatuur en de samenstelling (zie ook blz.22). Door vermenigvuldigen met de som der molenstromen verkrijgen we dan de enthalpiestijging van het gas in een trap. De uitkomsten van de berekening zijn als volgt :

trap	ΔH	$\Delta H \times Q_{\text{mol}}$	trap	ΔH	$\Delta H \times Q_{\text{mol}}$	trap	ΔH	$\Delta H \times Q_{\text{mol}}$
	kcal/kmol	kcal/s		kcal/kmol	kcal/s		kcal/kmol	kcal/s
1	174.2	53.2	7	237.1	72.5	13	248.1	82.1
2	183.7	56.1	8	249.0	76.1	14	226.0	84.0
3	193.5	59.1	9	205.3	67.9	15	235.9	87.7
4	203.8	62.3	10	215.4	71.3	16	246.0	91.4
5	214.5	65.6	11	225.9	74.8	17	235.0	93.5
6	225.6	68.9	12	236.8	78.4	18	244.0	97.1

Bij optellen van de enthalpiestijgingen krijgen we het effectief vermogen dat aan de kompressor toegevoerd moet worden. Dit is $P_{\text{eff.}} = 1342.0$ kcal/s.

Het werkelijk vermogen is dan : $P = 1/\eta \times P_{\text{eff.}}$. Hierin is η het totale rendement van de kompressor, wat we .8 stellen. Het werkelijke vermogen wordt dan : $P = 1677.5$ kcal/s.

Handwritten note:
 Het werkelijk vermogen
 aan mijn aanpassen

De stoombalans

Warmte wordt toegevoerd in:

a. de stripper

door condenseren van verzadigde stoom

van 40 atm. en 250°C $\Delta H = - 409.5 \text{ kcal/kg}$

b. de warmtewisselaar na de stripper H5

door condenseren van verzadigde stoom

van 40 atm. en 250°C $\Delta H = - 409.5 \text{ kcal/kg}$

c. de turbine

door expansie van oververhitte stoom van

40 atm. en 450°C tot verzadigde stoom

van 3 atm. en 133°C $\Delta H = - 145.3 \text{ kcal/kg}$

Warmte wordt afgevoerd in:

d. de warmtewisselaars tussen de carbamaatontleders

H8 en H11 door opwarmen van water van 3 atm.

en 20°C tot water van 3 atm. en 133°C

$$\Delta H = 113.4 \text{ kcal/kg}$$

e. de warmtewisselaar H14 door opwarmen van water

van 3 atm. en 20°C tot water van 3 atm. en 120°C

$$\Delta H = 100.2 \text{ kcal/kg}$$

f. de totale condensor boven de reaktor

door verdamping van water van 3 atm.

en 133°C

$$\Delta H = 317.1 \text{ kcal/kg}$$

ad a.

Aan warmte nodig: 4732 kcal/s

dit betekent een gebruik van $\frac{4732}{409.5} = 11.55$ kg/s stoom
van 40 atm. en 250°C

ad b.

nodig 50 kcal/s

gebruik: $\frac{50}{409.5} = .12$ kg/s stoom van 40 atm. en 250°C

ad c.

nodig 1677.5 kcal/s

gebruik: $\frac{1677.5}{145.6} = 11.54$ kg/s stoom, 40 atm. en 450°C

ad d. H8:

reaktievloeistof koelt van 193°C naar 172°C:

afvoer 329. kcal/s

verbruik: $\frac{329.1}{113.4} = 2.90$ kg/s water 3 atm, 20°C

H11:

reaktievloeistof koelt van 174°C naar 121°C:

afvoer 798.1 kcal/s

verbruik: $\frac{798.1}{113.4} = 7.04$ kg/s water 3 atm, 20°C

ad e.

H14:

reaktievloeistof koelt van 132°C naar 80°C

afvoer 640.5 kcal/s

verbruik: $\frac{640.5}{100.2} = 6.39$ kg/s water 3 atm, 20°C

ad f.

teveel 8981 kcal/s

verbruik: $\frac{8981}{517.1} = 17.37$ kg/s water, 3 atm, 133°C

We kunnen het verbruik en de produktie van water en stoom samenvatten in onderstaande tabel, waarbij

- A water 3 atm , 20°C
- B water 3 atm , 120°C
- C water 3 atm , 133°C
- D stoom 3 atm , 133°C
- E water 40 atm , 250°C
- F stoom 40 atm , 250°C
- G stoom 40 atm , 450°C

De hoeveelheid geproduceerde stoom in de kondensor is meer dan voldoende om (na drukverhoging en oververhitting) de turbine aan te drijven. Toch laten we in onderstaand schema ter vereenvoudiging de volledige stroom via het ketelhuis lopen.

plaats	verbruik (kg/s)						
	A	B	C	D	E	F	G
condensor			17.37				
stripper						11.55	
warmtewisselaar H5						.12	
warmtewisselaar H8	2.90						
warmtewisselaar H11	7.04						
warmtewisselaar H14	6.39						
turbine							11.54
ketelhuis	1.04	6.39		17.37	11.67		
totaal	17.37	6.39	17.37	17.37	11.67	11.67	11.54

plaats	produktie (kg/s)						
	A	B	C	D	E	F	G
condensor				17.37			
stripper					11.55		
warmtewisselaar H5					.12		
warmtewisselaar H8			2.90				
warmtewisselaar H11			7.04				
warmtewisselaar H14		6.39					
turbine				11.54			
ketelhuis			7.43	5.83		11.67	11.54
totaal	-	6.39	17.37	34.74	11.67	11.67	11.54

Resultaat: verbruik 17.37 kg/s water 3 atm, 20°C

produktie 17.37 kg/s stoom 3 atm, 133°C

VI. Berekening van de apparatuur:

a. De kondensor

Uit de warmtebalans volgt, dat in de kondensor moet worden afgevoerd: 8981 kcal/s. We kunnen de enthalpie-inhoud van de vloeistof die bij condensatie bij 190°C ontstaat ook berekenen en vinden daarvoor: 3614 kcal/s.

Bij condensatie komt nu vrij:

$$11883 - 3614 = 8269 \text{ kcal/s} = 34647 \text{ kW}$$

Bij afkoelen komt vrij:

$$3614 - 2910 = 704 \text{ kcal/s} = 2950 \text{ kW}$$

Voor kondenserende damp vinden we in lit. 24 p.85 $\alpha = 1000 \text{ W/m}^2\text{°C}$ en voor afkoelende vloeistof $\alpha = 500 \text{ W/m}^2\text{°C}$.

In de kondensor produceren we lage druk stoom van 3 atm. en 133°C.

De berekening wordt nu in twee delen uitgevoerd:

deel 1 : kondenserende damp

deel 2 : afkoelende vloeistof

deel 1: oppervlakteberekening m.b.v. de formule

$$\bar{\Phi}_w = \alpha \cdot \Delta T \cdot A$$

$$34647 \times 10^3 = 1000 \times 57 \times A \rightarrow A = 607 \text{ m}^2$$

deel 2: oppervlakteberekening m.b.v. de formule

$\bar{\Phi}_w = \alpha \cdot \Delta T_m \cdot A$, waarin ΔT_m het logaritmiisch temperatuurverschil is.

$$\Delta T_m = 0,435 \times (-57 + 37) / \log(1,541) = 46^\circ\text{C}$$

$$\text{dus: } 2950 \times 10^3 = 500 \times 46 \times A \rightarrow A = 128 \text{ m}^2.$$

*voor Verticaal
pijpen?*

Het totale oppervlak is 735 m^2 .

Nemen wij ongeveer 10% extra voor niet juist benutte ruimte dan wordt het totale oppervlak van de kondensor:

$$A_{\text{tot.}} = 800 \text{ m}^2$$

=====

De kondensor wordt uitgevoerd als een verticale bundel pijpen, waarin de gassen kondenseren en waaromheen stoom wordt gevormd. Omdat de vloeistof corrosief is, worden roestvrijstalen pijpen genomen (RVS 316). Voor pijpen met een inwendige diameter van 25 mm en een wanddikte van 3 mm geldt:

$$\text{het(binnen)oppervlak per meter} = \pi \times 25 \times 10^{-3} \text{ m}^2 = .0785 \text{ m}^2$$

Aan pijplengte is dus nodig:

$$\frac{800}{.0785} = 10191 \text{ m}$$

Als we voor de lengte van 1 pijp 6 m nemen, hebben we $\frac{10191}{6} = 1698$

pijpen nodig.

De inwendige diameter van de pijpenplaat kan berekend worden met de formule:

$$D_i = m \times st + D_{\text{upijp}} + 1.5 \times st, \text{ waarin}$$

m = factor die afhankelijk is van het aantal pijpen

st = steek; de steek is hier $= 1.3 \times D_{\text{upijp}}$; omdat deze pijpen gelast worden (lit.20);

$$D_i = 43.28 \times 1.3 \times 31 + 31 + 1.5 \times 1.3 \times 31 = 1836 \text{ mm}$$

$$D_i = 1,85 \text{ m}$$

De wanddikte van de kondensor kan gevonden worden uit de formule

$$t = P_i D_i / 2\sigma$$

dus:

$$t = 3 \times 1836 / 2000 = 2.75 \text{ mm (lit.21)}$$

De wanddikte van de pijpen moet minimaal gelijk zijn aan:

$$144 \times 25/2000 \text{ mm} = 1,8 \text{ mm.}$$

De gekozen dikte van 3 mm zal dus ruim voldoende zijn; een deel daarvan kunnen we beschouwen als een corrosietoeslag.

Resumerend beschrijven we de kondensor:

totaal oppervlak	:	800 m ²
diameter pijpen D_i	:	25 mm
D_u	:	31 mm
lengte pijpen	:	6 m
aantal pijpen	:	1698
diameter pijpenplaat	:	1.85 m
wanddikte kondensor	:	3 mm
diameter kondensor	:	1.88 m

b. De reaktor

Voor de berekening van de afmetingen van de reaktor moet eerst het volume berekend worden:

$$\begin{aligned} V_{\text{reaktor}} &= V_{\text{vloeistof}} + V_{\text{gas}} = \\ &= \dot{V}_{\text{ml}} \cdot \tau_1 / \rho_1 + \dot{V}_{\text{mg}} \cdot \tau_g / \rho_g \end{aligned}$$

Van al deze factoren is alleen τ_g (de verblijftijd van het gas in de reaktor) een nauwelijks te schatten factor. Een berekening van het volume op deze manier zal dan ook weinig reëel zijn, ook al omdat de massastromen van de vloeistof en het gas niet konstant zijn.

over de reaktor

In lit. 4, blz. 7, staan de afmetingen vermeld van een ureum-reaktor die geschikt is voor een produktie van 500 ton ureum per dag. Als ruwe schatting voor het volume van een reaktor die 1500 ton ureum per dag maakt kan dan gelden:

$$V_{1500} = \frac{1500}{500} \times V_{500} \rightarrow V_{1500} = 3 \times 50 \text{ m}^3 = 150 \text{ m}^3$$

Voor een dergelijke reaktor is het volume gelijk aan

$$\frac{\pi}{4} D^2 \times H.$$

De afmetingen kunnen dan b.v. zijn:

H(m)	D(m)
20	3,1
30	2,5
40	2,2
50	2,0
60	1,8

De meest aannemelijke afmetingen lijken te zijn:

$$H = 30 \text{ m} \quad \text{en} \quad D = 2,5 \text{ m.}$$

De wanddikte van de reaktor wordt uitgerekend met:

$$t = \frac{P_i D}{2\sigma}$$

Neem voor $D_u = 2,7 \text{ m.}$, dan volgt voor $t = 0,19 \text{ m.}$

We kunnen de verblijftijd van het gas in de reaktor schatten

m.b.v. de volgende gegevens:

$$\begin{array}{ll} V_r = 150 \text{ m}^3 & \rho_l = 1100 \text{ kg/m}^3 \\ \dot{Q}_{ml} = 44.37 \text{ kg/s} & \rho_g = 150 \text{ kg/m}^3 \\ \dot{Q}_{mg} = 34.50 \text{ kg/s} & \tau_l = 1200 \text{ sec.} \end{array}$$

Hieruit volgt dat: $\tau_g = 441 \text{ sec.} = 7,35 \text{ minuten.}$

De reaktor: $H = 30 \text{ m}$

$$D_i = 2,5 \text{ m}$$

$$D_u = 2,7 \text{ m}$$

c. De stripper

De stripper wordt uitgevoerd als een verticale bundel pijpen, waardoor de vloeistof als een film naar beneden stroomt. Het gas doorloopt dezelfde pijpen van beneden naar boven. Voor de berekening van de stripper is het o.a. nodig de dichtheden van de gas- en vloeistofstromen te weten.

Uit de massabalans over de stripper, die we hier nog eens vermelden, zijn de massastromen bekend. Hieruit kunnen op de manier als in lit. 6 beschreven de dichtheden van de in- en uitgaande vloeistof- en gasstromen worden berekend:

	vloeistof		gas	
	uit (kmol/s)	in (kmol/s)	uit (kmol/s)	in (kmol/s)
NH ₃	.045	.446	.706	.070
AC	.014	.158		
U	.289	.289		
H ₂ O	.313	.395	.106	.025
CO ₂			.447	.303
	<hr/>	<hr/>	<hr/>	<hr/>
	24.8 kg/s	44.4 kg/s	34.6 kg/s	14.9 kg/s

Voor 190°C en 144 atm. vinden we voor het molaire volume van NH₃: 0.17 m³/kmol en voor CO₂: 0.23 m³/kmol.

Voor de volume-stroom vinden we:

$$\text{gas in} : \frac{100}{94.0} * (0.17 * 0.070 + 0.23 * 0.303) = 0.0876 \text{ m}^3/\text{s}$$

$$\text{gas uit} : \frac{100}{92.0} * (0.17 * 766 + 0.23 * .447) = 0.253 \text{ m}^3/\text{s}$$

Voor de dichtheden vinden we dan:

$$\text{gas in } \rho = 14.9/0.0876 = 170 \text{ kg/m}^3$$

$$\text{gas uit } \rho = 34.6/0.253 = 137 \text{ kg/m}^3$$

De vloeistofdichtheid nemen we constant nl.

$$\rho_1 = 1100 \text{ kg/m}^3 \quad (\text{lit. 23})$$

De nu volgende gegevens zijn verkregen m.b.v. het in bijlage IV opgenomen CPS-programma.

We kiezen eerst pijpen met een inwendige diameter van 25 mm.

De buitendiameter van dergelijke pijpen is 31 mm, wat ruim voldoende is om de druk van 144 atm. te houden ($t = \frac{144 \times 25}{2000} = 1.8$ mm, de rest is corrosietoeslag). Omdat de massastromen en de dichtheden in de stripper veranderen zal deze in 3 stappen worden berekend.

deel 1: bovenste deel van de stripper

vloeistof in, gas uit

$$\bar{\Phi}_{m1} = 44 \text{ kg/s}, \quad \bar{\Phi}_{mg} = 35 \text{ kg/s}$$

$$\rho_1 = 1100 \text{ kg/m}^3, \quad \rho_g = 137 \text{ kg/m}^3$$

deel 2: het middelste stuk

$$\bar{\Phi}_{m1} = 35 \text{ kg/s}, \quad \bar{\Phi}_{mg} = 25 \text{ kg/s}$$

$$\rho_1 = 1100 \text{ kg/m}^3, \quad \rho_g = 154 \text{ kg/m}^3$$

deel 3: het onderste deel

$$\bar{\Phi}_{m1} = 25 \text{ kg/s}, \quad \bar{\Phi}_{mg} = 15 \text{ kg/s}$$

$$\rho_1 = 1100 \text{ kg/m}^3, \quad \rho_g = 170 \text{ kg/m}^3$$

Voor de konstruktie van de stripper zal het het eenvoudigst zijn als we voor alle drie de delen van de stripper het zelfde aantal pijpen kunnen berekenen. Bij de berekening beginnen we bij deel 1, omdat hier de massastromen het grootst zijn.

Uit de berekeningen blijkt, dat bij een filmdikte van 3.00 mm de drukval over de stripper nog niet te groot is. Vervolgens berekenen we bij deze filmdikte een vloeistofsnelheid van 1.447 m/s met bijbehorend aantal pijpen 117 en een drukval van 4647 N/m^3 (= 0.046 atm/m).

Voor het 2e deel van de stripper moet een filmdikte berekend worden, waarbij het aantal pijpen ongeveer 117 moet zijn. Uit oriënterende berekeningen blijkt, dat deze filmdikte dan 1.70 mm is. Bij deze filmdikte behoort een vloeistofsnelheid van 2.10 m/s, een aantal pijpen : 114 en een drukval van 1190 N/m^3 .

De berekening van het derde deel geschiedt op dezelfde manier. We vinden $m = 1.20 \text{ mm}$, vloeistofsnelheid = 2.07 m/s, aantal pijpen 117 en drukval 294 N/m^3 .

Volgens lit. 1 is een verblijftijd van 10 sec. van de vloeistof voldoende om het grootste deel van het carbamaat te ontleden. Bovendien is de hydrolyse van ureum en de vorming van biureet dan nog gering. Met deze kennis kunnen we de lengte van de pijpen van de stripper berekenen (zie bijlage IV): $L = 17.7 \text{ m}$.

stripper 1

	m mm	v_l m/s	v_g m/s	n	dp/dl N/m^3	L m
deel 1	3.00	1.447	7.71	117	4647	7.4
deel 2	1.70	2.10	3.73	114	1190	6.1
deel 3	1.20	2.07	1.88	117	294	4.2

In feite is deze stripper wel erg lang. We kunnen er daarom ook voor zorgen, dat de lengte wat kleiner wordt. Berekeningen geven dan als resultaat, dat de diameter van de pijpen kleiner genomen moet worden. We nemen hiervoor: 13 mm, en een buitendiameter van 18 mm. De minimale wanddikte is:

$$t = \frac{144 \times 13}{2000} = 1 \text{ mm}$$

De resterende 1.5 mm dient als corrosietoeslag.

Identieke berekeningen als boven beschreven leveren dan de volgende gegevens:

stripper 2

	m mm	v_l m/s	v_g m/s	n	dp/dl N/m^3	L m
deel 1	2.00	.748	6.13	655	6284	4.2
deel 2	0.87	1.38	2.24	647	955	3.4
deel 3	0.62	1.39	1.15	651	248	2.5

De lengte van de stripper is nu: $L = 10.1 \text{ m}$.

Het blijkt, dat de filmdikte in het midden en het onderste deel van de stripper wel erg klein is, daarom werd de stripper nogmaals uitgerekend, maar nu met een ongeveer constante filmdikte en een afnemend aantal pijpen.

stripper 3

	m	v_l	v_g	n	dp/dl	L
	mm	m/s	m/s		N/m ³	m
deel 1	2.00	.748	6.24	655	6284	2.5
deel 2	2.00	.869	5.72	448	6069	2.9
deel 3	2.00	1.050	5.26	265	5687	3.5

De lengte van de stripper wordt nu:

$$L = 8.9 \text{ m}$$

Aan pijpenmateriaal hebben we bij de drie strippers nodig:

	totale lengte (m)	totaal volume (m ³ x 10 ⁶)
nr. 1	2071	695856
nr. 2	6616	575592
nr. 3	3864	336168

De stripper werkt tevens als warmtewisselaar. Immers, konderende stoom van 250°C levert de benodigde warmte voor de ontleding van ammoniumcarbamaat. Deze warmte bedraagt:

$$4732 \text{ kcal/s} = 19827 \text{ kW.}$$

Het hiervoor benodigde pijpenoppervlak vinden we uit:

$$\dot{Q}_w = \alpha \cdot A \cdot \Delta T$$

$$= 1000 \text{ W/m}^2 \text{ } ^\circ\text{C (ruwe schatting)}$$

$$\text{dus: } 1000 \times 19827 = 1000 \times A \times 60$$

$$A = 330 \text{ m}^2$$

De pijpoppervlakte van de 3 berekende strippers berekenen we nu met:

$$A = n \cdot \pi \cdot D_i \cdot L$$

We vinden dan:

	A (m ²)
stripper 1	163
stripper 2	270
stripper 3	158

Hieruit blijkt, dat alleen stripper 2 bijna voldoende oppervlak heeft om de benodigde hoeveelheid stoom te laten condenseren. Omdat de stripper in 3 delen is berekend zou het natuurlijk logisch zijn om ook het warmte-wisselend oppervlak in 3 delen te berekenen. Het is immers te verwachten dat boven in de stripper meer warmte moet worden toegevoerd, omdat daar meer ammoniumcarbamaat ontleedt en ammoniak uit de vloeistof ontwijkt dan onderin de stripper.

Om exact uit te rekenen hoeveel warmte aan de drie delen van de stripper toegevoerd moet worden, moet de samenstelling van de vloeistof- en gasfase op twee plaatsen in de stripper bekend zijn. Het is niet mogelijk dit te doen.

Wel kunnen we het oppervlak op een andere manier schatten:

Intuïtief kan men zeggen, dat de toe te voeren warmtes tot elkaar in verhouding staan als de bijbehorende volumestromen vloeistof. Werken we dit uit dan volgt:

$$\Phi_{w1} : \Phi_{w2} : \Phi_{w3} = \Phi_{v1} : \Phi_{v2} : \Phi_{v3} = 44 : 35 : 25$$

$$\Phi_{w1} + \Phi_{w2} + \Phi_{w3} = 19827 \text{ kW.}$$

$$\Phi_{w1} = 8386 \text{ kW} = 1000 \cdot 60 \cdot A_1 \quad A_1 = 140 \text{ m}^2$$

$$\Phi_{w2} = 6671 \text{ kW} = 1000 \cdot 60 \cdot A_2 \quad A_2 = 111 \text{ m}^2$$

$$\Phi_{w3} = 4765 \text{ kW} = 1000 \cdot 60 \cdot A_3 \quad A_3 = 79 \text{ m}^2$$

A_1 , A_2 en A_3 zijn de maximaal benodigde condensatie-oppervlakken van de 3 stripperdelen.

We berekenen nu de oppervlakte van de 3 onderdelen van de 3 strippers met:

$$A = n \cdot \pi \cdot D_i \cdot L$$

en vergelijken die met de maximaal benodigde oppervlakten in onderstaande tabel:

	stripper 1	stripper 2	stripper 3	maximaal nodig
A_1	68	112	68	140
A_2	56	91	53	111
A_3	39	67	38	79

Enige opmerkingen t.a.v. de warmteoverdrachtscoëfficiënt en het benodigde oppervlak:

α is een gekozen waarde. Het had naar onze mening dan ook weinig zin om met deze geschatte overdrachtscoëfficiënt exact het benodigde oppervlak uit te rekenen. Mocht bij exacte bepaling van α blijken, dat het oppervlak van de pijpen te klein is, dan kan

altijd nog aan de eisen voor de warmte-overdracht voldaan worden door stoom te gebruiken van hogere druk en temperatuur.

Uit de hierboven beschreven berekening volgt, dat stripper 2 wat betreft de warmte-overdracht het eerst in aanmerking komt.

Stripper 3 is b.v. wel het goedkoopst, maar afgezien van het feit, dat het oppervlak erg klein is in vergelijking met wat er nodig is, zal deze stripper toch niet snel gekozen worden.

Het grote bezwaar van deze stripper is, dat de vloeistof tweemaal herverdeeld moet worden.

Volgens D.S.M. is dit technisch lastig te realiseren. Bovendien wordt de verblijftijd in de stripper groter door de extra tijd die nodig is voor de herverdeling (met grotere kans op biureetvorming). We kiezen daarom toch stripper 2, of in het algemeen een stripper met doorlopende pijpen.

De diameter van de pijpenplaat wordt:

$$\begin{aligned} D_p &= m \times st + D_{up} + 1.5 \times st = \\ &= 26.6 \times 1.3 \times 18 + 18 + 1.5 \times 1.3 \times 18 \\ &= 622 + 18 + 35 = 675 \text{ mm} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} D_p &= 0.7 \text{ m} \\ &===== \end{aligned}$$

Samenvatting gegevens van de stripper:

inwendige diameter v.d. pijpen	D_i	= 13 mm
uitwendige diameter v.d. pijpen	D_u	= 18 mm
aantal pijpen	n	= 655
lengte van de pijpen	L	= 10.1 m
diameter pijpenplaat	D_{pp}	= 0.7 m

d. de warmtewisselaars H5, H8, H11, H14.

De oppervlakte van de warmtewisselaars wordt berekend met

$$\dot{Q}_w = \alpha \cdot A \cdot \Delta T_m, \text{ waarin}$$

\dot{Q}_w = toe- of af te voeren warmte (J/s)

α = overall-warmteoverdrachtscoefficient ($\text{W/m}^2 \text{ } ^\circ\text{C}$)

A = oppervlak (m^2)

ΔT_m = logaritmisch temperatuurverschil ($^\circ\text{C}$)

α wordt geschat op $500 \text{ W/m}^2 \text{ } ^\circ\text{C}$

H5

Condensatie van stoom van 40 atm. en 250°C om reaktievloeistof op te warmen van 190°C tot 193°C

$$\dot{Q}_w = 50.1 \text{ kcal/s} = 209.4 \text{ kW}$$

$$\Delta T_m = 57^\circ\text{C}$$

$$A = 7 \text{ m}^2$$

H8

Opwarmen van water van 3 atm. en 20°C tot water van 3 atm. en 133°C

Reaktievloeistof daalt in temperatuur: van 193°C tot 172°C

$$\dot{Q}_w = 329.1 \text{ kcal/s} = 1375.6 \text{ kW}$$

$$\Delta T_m = 100^\circ\text{C}$$

$$A = 27.5 \text{ m}^2$$

H11

Opwarmen van water van 3 atm. en 20°C tot water van 3 atm. en 133°C

Reaktievloeistof daalt in temperatuur van 174°C naar 121°C

$$\dot{Q}_w = 798.1 \text{ kcal/s} = 3336.0 \text{ kW}$$

$$\Delta T_m = 67^\circ\text{C}$$

$$A = 100 \text{ m}^2$$

H14

Opwarmen van water van 3 atm. 20°C tot water van

3 atm. en 120°C

Reaktievloeistof daalt in temperatuur van 132°C naar 80°C

$$\dot{Q}_w = 640.5 \text{ kcal/s} = 2677.3 \text{ kW}$$

$$\Delta T_m = 30^\circ\text{C}$$

$$A = 178 \text{ m}^2$$

BIJLAGE I

Het berekenen van de conversie in de reaktor.

Om de conversie met Kucheryavii's formule te kunnen berekenen moet eerst bekend zijn hoeveel water zich in het stripgas bevindt. Deze hoeveelheid kan berekend worden met lit. 10 door een bepaalde vloeistofsamenstelling aan te nemen en de hierbij behorende gassamenstelling te berekenen. De vloeistofsamenstelling zal in de buurt moeten liggen van de samenstelling van de uitgaande reaktorvloeistof. Het stripgas zal namelijk in evenwicht zijn met een vloeistof die zich op een afstand gelijk aan de hoogte, equivalent met een theoretische schotel (HETS), van de top van de stripper bevindt. Er zal hier nog maar weinig ammoniak en carbamaat gestript zijn. Bovendien zal voor deze vloeistof nog gelden dat de verhouding ammoniak/carbamaat = $1/(1-X)$, als X de conversie is. Voor het stripgas moet een NH_3/CO_2 -verhouding gelden van $3-2.01 \cdot X$. De werkwijze is nu als volgt :

Kies een conversie X (de bovenstaande verhoudingen liggen dan vast).
Kies een molfractie H_2O en een molfractie NH_3 (de vloeistofsamenstelling ligt nu vast).

Nu wordt de gassamenstelling berekend en de gevonden NH_3/CO_2 -verhouding getoetst aan de gevraagde. Klopt deze verhouding niet, dan moeten andere molfrakties gekozen worden. In het andere geval wordt W (verhouding H_2O/CO_2) berekend, zodat X berekend kan worden. Wijkt deze nieuwe conversie af van de gekozen conversie dan moet de berekening herhaald worden met deze nieuwe conversie, totdat de waarde ervan niet meer verandert. Met een geringe wijziging kan via deze methode ook het watergehalte in het condensorgas berekend worden. Voor de NH_3/CO_2 -verhouding moet nu gelden dat deze 3 is. Het berekende watergehalte is dan 6.1 %. Hier behoort een watergehalte in de vloeistof bij van 23.1 %. In werkelijkheid is dit 30.6 %. Het hierop gekorrigeerde gehalte in het gas is dan 8.1 %. Van het CPS-programma worden nu de gebruikte variabelen met hun betekenis gegeven.

X	conversie, betrokken op CO_2 .
n1	ondergrens molfractie NH_3 .
stepn	stapgrootte - -
n2	bovengrens - -

h1	ondergrens molfractie H2O.		
steph	stapgrootte	-	-
h2	bovengrens	-	-
p	druk in reaktor,		kg/cm ²
t	temperatuur in reaktor,		°K
tc	- - -		°C
l	verhouding NH ₃ /CO ₂ in stripgas.		
flun	molfractie NH ₃ in vloeistof.		
fluh	- H ₂ O	-	-
fluc	- carb.	-	-
fluu	- ureum	-	-
fguh	- H ₂ O	-	gas.
fgun	- NH ₃	-	-
fguc	- CO ₂	-	-
w	verhouding H ₂ O/CO ₂ in stripgas.		

Tenslotte volgt het gebruikte programma.

```

10.      PUT LIST('De berekening van gas-vloeistofevenwichten van NH3-CO2-H2O-Ureum-mengsels. ');
20.      PUT LIST('Geef de geschatte conversie. ');
30.      GET LIST(x);
40.      grens: PUT LIST('Grenzen en stapgrootte NH31 : ');
50.      GET LIST(n1,stepn,n2);
60.      PUT LIST('Grenzen en stapgrootte H2O1 : ');
70.      GET LIST(h1,steph,h2);
80.      p=148;
90.      t=463;
100.     tc=199;
110.     l=3-.58*x/.289;
115.     PUT LIST(' ');
120.     PUT IMAGE(1)(im1);
130.     PUT LIST(' ');
140.     PUT LIST('NH31   AC1   H2O1   UI       NH3g   CO2g   H2Og NH3/CO2g   SOM ');
150.     DO flun=n1 BY stepn TO n2;
160.     DO fluh=h1 BY steph TO h2;
170.     fluc=(1-x)*flun;
180.     fluu=1-flun-fluh-fluc;
190.     fguh=fluh*exp(2.303*(-log10(18.4)+7.444-3133.3/t-.4326*flun+.9207*fluu-.2114*fluh));
200.     fgun=flun*exp(2.303*(-log10(106)+5.5776-1140.6/t-1.0384*flun-.698*fluu-1.0899*fluh));
210.     fguc=1-fgun-fguh;
220.     PUT IMAGE(flun,fluc,fluh,fluu,fgun,fguc,fguh,fgun/fguc,fgun+fguc+fguh)(im2);
230.     END ;
240.     END ;
250.     PUT LIST(' ');
260.     kies:  PUT LIST('Nieuwe grenzen en/of stapgrootten kiezen ? (1=ja, 0=nee) ');
270.     GET LIST(keuze);
280.     IF keuze=1 THEN GO TO grens;
300.     PUT LIST('Geef beste H2Og en CO2g : ');
310.     GET LIST(fguh,fguc);
320.     w=fguh/fguc;
330.     x=.01*(86.97-18.2*w+.6886*tc-.0000054*tc**3+.0023*p-112.1);
340.     l=3-.58*x/.289;
350.     PUT IMAGE(1,w,x)(im3);
360.     PUT LIST('Is het conversie verschil te groot ? ');

```



```

370.      GET LIST(groot);
380.      IF groot=0 THEN GO TO uit;
390.      GO TO kies;
400.      im1:  IMAGE;
De gevraagde NH3/CO2 verhouding is  -.-.-
410.      im2:  IMAGE;
-.-.-
420.      im3:  IMAGE;
De nieuwe NH3/CO2 verhouding is  -.-.- ; de H2O/CO2 verhouding is  -.-.- ; de berekende conversie is  .---.
424.      PUT LIST('Frakties U,NH3,AC,H2O');
425.      GET LIST(flou,flun,fluc,fluh);
426.      luu=.289;
426.1     lun=luu*flun/flou;
426.2     luc=luu*fluc/flou;
426.3     luh=luu*fluh/flou;
427.      PUT IMAGE(lun,luc,luh,luu)(im4);
428.      im4:  IMAGE;
-.-.-
429.      END ;
430.      uit:  PUT LIST('Het programma is beëindigd.');
```

BIJLAGE II

De berekening van carbamaatontleders en kompressor.

De wijze van berekenen zal toegelicht worden aan de hand van het programma. Daarom zal eerst een lijst van de gebruikte variabelen volgen.

t1	temperatuur ontleder,	graden Kelvin.
t2	temperatuur uitgang kompressortrap,	graden Kelvin.
dh	enthalpiestijging kompressorgas,	kcal/kmol.
cp	gemiddelde c_p kompressorgas,	kcal/kmol °K.
cp1	c_p NH ₃ bij gem. temperatuur,	-
cp2	c_p CO ₂ - - -	-
cp3	c_p H ₂ O - - -	-
pb	begindruk kompressie,	atm.
pe	einddruk kompressie,	atm.
pver	drukverhouding per trap.	
eps	temp.verschil iteratie kompressie,	graden Kelvin.
dtl	temp. verschil tussen twee ontleders,	graden Kelvin.
t	gemiddelde temperatuur,	graden Kelvin.
p	druk kompressie,	atm.
cp1	c_p gasmengsel bij p=0,	kcal/kmol °K.
tk	kritische temp. gasmengsel,	graden Kelvin.
pk	kritische druk gasmengsel,	atm.
fnh3	molfractie NH ₃ kompressorgas.	
fco2	- CO ₂ -	
fh2o	- H ₂ O -	
fiwg	warmtestroom gas naar ontleder,	kcal/s.
fiwl	- ontledervloeistof,	kcal/s.
fiwo	- ontleding+verdamping,	kcal/s.
fiwc	- opwarmen CO ₂ -voeding,	kcal/s.
tc	gem. vloeistoftemperatuur,	graden Celsius.
w	gewichtsfractie ureum in ureum-watermengsel.	
cp11	c_p vloeibare NH ₃ ,	kcal/kg °K.
cp12	c_p vloeibare amm.carbamaat,	kcal/kmol °K.
cp13	c_p ureum-watermengsel,	kcal/kg °K.
fiwa	warmte stroom nodig voor ontleding,	kcal/s.
A	totaal concentratie NH ₃ ,	kmol/kg.

B	totaal concentratie CO ₂ ,	kmol/kg.
C	- - ureum,	kmol/kg.
ka1	} evenwichtskonstantes Wicarberekening.	
ka2		
ka3		
r,q,s	hulpvariabelen vierkantsvergelijking.	
hco3	} concentraties in vloeistof,	kmol/kg.
co3		
nh3		
nh4		
ac		
I	ionensterkte vloeistof,	kgeq/kg.
cof1	} coëfficiënten vergelijking voor K _{a1} .	
cof2		
pcb	berekende CO ₂ -druk,	atm.
h0	Henrycoëfficiënt zuiver water.	kmol/kg atm.
h	- vloeistof/NH ₃ .	kmol/kg atm.
pnh3	berekende NH ₃ -druk,	atm.
pco2	totale CO ₂ -druk,	atm.
ph2o	waterdampspanning,	atm.
n	nummer kompressortrap.	
m	nummer ontleder.	
nt	totaal aantal trappen.	
not	- - schotels van ontleder.	
no	nummer schotel.	
k	nummer kompressortrap.	
z	nummer berekening.	
zt	totaal aantal berekeningen.	
molt	totaal aantal molen kompressorgas.	
mtot	totale massastroom vloeistof uit ontleder, kg/s.	

De nu volgende variabelen zijn op de volgende wijze opgebouwd :

l	vloeistof	nh3	ammoniak	u	uitgaand
g	gas	car	carbamaat	i	ingaaand
		urm	ureum	b	startwaarde
		h2o	water	m	totale massastroom
		co2	kooldioxide		

Zij stellen de molenstromen voor om de ontleder, in kmol/s.

lnh3u lnh3i gnh3u gnh3i lnh3b gnh3b

lcaru lcari gco2u gco2i lcarb gco2b

lurmu lurmi gh2ou gh2oi lurmb gh2ob

lh2ou lh2oi lh2ob

mlu mli mgu mgi (kg/s)

Bij de nu volgende toelichting zullen tussen haakjes zo nodig de statementnummers gegeven worden om terugzoeken in het programma te vergemakkelijken.

Allereerst wordt er een aantal startwaarden via getallenkaarten ingelezen (29 e.v.). Hiertoe behoren vloeistof- en gasstroom die uit resp. in de eerste ontleder komen. Verder begin- en einddruk en het totaal aantal trappen. Nu kan de drukverhouding bepaald worden (46).

Bij (55) begint de berekening van de ontleder. Ingelezen worden het totaal aantal schotels, de ontledertemperatuur en het temperatuurverschil met de volgende ontleder. De berekening van Wicar gaat uit van de concentraties NH₃, CO₂ en ureum, resp. A, B en C (82 e.v.). Met evenwichtskonstantes, die als functie van de temperatuur bekend zijn (85,86), kan dan de ionensterkte van de oplossing bepaald worden. (95). Met de evenwichtskonstante K_{a1} , die ook afhangt van de ionensterkte, wordt dan de CO₂-druk berekend (99). Het blijkt namelijk dat de evenredigheidscoëfficiënt tussen CO₂-concentratie en CO₂-druk juist 1 is, zodat

$$p_{CO_2} = NH_4 * HCO_3 / (K_{a1} * NH_3)$$

De NH₃-druk wordt berekend via de Henrycoëfficiënt, die afhankelijk is van de NH₃- en de ureumconcentratie. Experimenteel volgt dan :

$$p_{NH_3} = 1 / (.0065 + .665 * H/NH_3)$$

De waterdampspanning wordt berekend uit die van zuiver water, via de wet van Raoult (103). De totale CO₂-druk verkrijgen we door van de ontlederdruk de berekende NH₃-druk en H₂O-spanning af terekken (105).

Om de ontledende werking te verhogen wordt immers de CO₂-voeding doorgeleid, welke niet in evenwicht zal verkeren met de vloeistof.

Om de molenstromen te berekenen wordt uitgegaan van deze CO₂-voeding.

Volgens de wet van Dalton geldt dan voor bijv. NH₃ :

$$gnh3u = gco2i * pnh3 / (pco2 - pcb) \quad (106)$$

pco2-pcb is de druk die de inkomende CO₂stroom gco2i heeft. Evenzo worden de overige gasstromen berekend. Met een massabalans over een schotel volgen dan de vloeistofstromen die de schotel binnenkomen (110 e.v.).

Als het totaal aantal schotels van de ontleder nog niet bereikt is, wordt bovenstaande berekening nogmaals uitgevoerd door uit te gaan van de berekende gas- en vloeistofstroom (114). Is dit wel het geval dan wordt de massabalans over de gehele ontleder uitgevoerd (127-208), benevens de laatst berekende drukken (209-223).

Nu wordt de warmtebalans over de ontleder berekend. Als het ontleder-nummer 1 is, wordt berekend hoeveel warmte nodig is om de CO₂-voeding op te warmen (226 e.v.). Anders wordt de warmtestroom van het te koelen gas berekend. Vanaf label "warm" vindt berekening van de vloeistofwarmte plaats. Voor ureum+water is c_{p13} gegeven in kcal/kg^oK. Door delen met $.055-.039 \cdot w$ wordt c_{p13} in kcal/kmol^oK verkregen. (248) en (249) geven de warmtestroom, nodig voor ontleding en verdamping. Het geheel wordt vervolgens uitgevoerd (250-272).

Vanaf (274) wordt de temperatuurstijging berekend van het kompressorgas. Eerst berekenen we de gemiddelde kritische druk en temperatuur van het gasmengsel (279,280). Er wordt een uitgangstemperatuur gekozen, waarna bij gemiddelde temperatuur de gemiddelde c_p van het gas berekend wordt (284-287). Dan volgt de drukcorrectie op c_p , als functie van gereduceerde druk en temperatuur (voor de druk is hier de gemiddelde druk genomen). De temperatuurstijging kan nu gevonden worden met :

$$T_2/T_1 = (p_{ver})^{1.987/1.75 + c_p} \quad (289)$$

Ligt deze temperatuur niet binnen een waarde $\epsilon_{ps} = .1$ °K van de geschatte, dan wordt de berekening herhaald met de berekende T₂ als nieuwe schatting. In het andere geval wordt het enthalpieverschil berekend en vindt uitvoer van de belangrijkste variabelen plaats. Blijkt de uitgangstemperatuur nu boven 250^oC te zijn, dan wordt de laatste berekende trap "weggelaten", m.a.w. het gas met temperatuur T₁ gaat naar een nieuwe ontleder (325-328).

Als het totaal aantal trappen nog niet bereikt is wordt met de uitgangstemperatuur T₂ een nieuwe trap doorgerekend (331).

Zonodig wordt na bereiken van de laatste kompressortrap een nieuwe berekening gestart (332) met het inlezen van nieuwe waarden.

De drukken waarbij de ontleders werken volgen uit de kompressie van het gas. Bij koelen wordt de uitgangsdruk van de voorlaatst berekende trap genomen voor de ontleder. De temperaturen van de ontleders moeten nu zo gekozen worden dat door de ontleders heen een gelijkmatige stijging

van de NH₃-, CO₂- en H₂O-molenstromen in het gas plaatsvindt, totdat de gewenste waarden (voor het gas dat de stripper ingaat) bereikt zijn. Samenhangend hiermee kan het aantal schotels optimaal bepaald worden. Tenslotte wordt nu de totale uitvoer van de berekening gegeven.

```
00000 'BEGIN' 'REAL' T1, T2, DH, CP, CP1, CP2, CP3, PB, PE, PVER, EPS, DTL
00000 , T, P, CPI, TB, TK, PK, FNH3, FCO2, FH2O, MOLT;
00001 'REAL' LNH3U, LCARU, LURMU, LH2OU, GNH3I, GH2OI, GCO2I, GCO2O,
00001 FIWG, FIWL, FIWO, FIWC, TC, W, CPL1, CPL2, CPL3, FIWA,
00001 LNH3I, LCARI, LURMI, LH2OI, GNH3U, GCO2U, GH2OU, MTOT,
00001 LNH3B, LCARB, LURMB, LH2OB, GNH3B, GCO2B, GH2OB,
00001 A, B, C, KA1, KA2, KA3, R, Q, S, HCO3, CO3, NH3, NH4, AC, I,
00001 COF1, COF2, PCB, HO, H, PNH3, PCO2, PH2O, MGI, MLI, MGU, MLU;
00002 'INTEGER' N, M, NT, NOT, NO, K, Z, ZT;
00003 'PROCEDURE' AFIX(D, M, N, X); 'VALUE' D, M, N, X; 'INTEGER' D, M, N; 'REAL' X; 'CODE';
00008 'PROCEDURE' FIX(D, M, N, X); 'VALUE' D, M, N, X; 'INTEGER' D, M, N; 'REAL' X; 'CODE';
00013 'PROCEDURE' BLANK(D, N); 'VALUE' D, N; 'INTEGER' D, N; 'CODE';
00017 'PROCEDURE' LINE(D, N); 'VALUE' D, N; 'INTEGER' D, N; 'CODE';
00021 'PROCEDURE' SETTING(D, P, Q); 'VALUE' D, P, Q; 'INTEGER' D, P, Q; 'CODE';
00025 'PROCEDURE' PAGE(D); 'VALUE' D; 'INTEGER' D; 'CODE';
00029 SETTING(1, 132, 66); ININTEGER(0, ZT); Z:=0;
00032 LEES: INREAL(0, LNH3I); INREAL(0, LCARI); INREAL(0, LURMI); INREAL(0, LH2OI);
00036 INREAL(0, GNH3U); INREAL(0, GCO2U); INREAL(0, GH2OU);
00039 INREAL(0, PB); INREAL(0, PE); INREAL(0, EPS); ININTEGER(0, NT);
00043 Z:=Z+1;
00044 OUTSTRING(1, '('('KOMPRESSORBEREKENING VOORONTWERP KALKMAN/VERBRUGGE
00044 ')'); LINE(1, 4);
00046 START: PVER:=(PE/PB)**(1/NT);
00047 OUTSTRING(1, '('('AANTAL TRAPPEN:'))'); BLANK(1, 21);
00049 AFIX(1, 2, 0, NT); LINE(1, 1);
00051 OUTSTRING(1, '('('DRUKVERHOUDING:'))'); BLANK(1, 21);
00053 AFIX(1, 1, 2, PVER); LINE(1, 4);
00055 'COMMENT' BEREKENING WICAR;
00055 P:=PB; N:=1; M:=0;
00058 WICAR: ININTEGER(0, NOT); INREAL(0, T1); INREAL(0, DTL); NO:=0; M:=M+1; K:=0;
00064 LNH3B:=LNH3I; LCARB:=LCARI; LURMB:=LURMI; LH2OB:=LH2OI;
00068 GNH3B:=GNH3U; GCO2B:=GCO2U; GH2OB:=GH2OU;
00071 SCHOT: NO:=NO+1;
00072 LNH3U:=LNH3I; LCARU:=LCARI; LH2OU:=LH2OI; LURMU:=LURMI;
00076 GNH3I:=GNH3U; GCO2I:=GCO2U; GH2OI:=GH2OU;
00079 LAGER: MTOT:=LNH3U*17+LCARU*78+LURMU*60+LH2OU*18;
00080 MOLT:=LNH3U+LCARU+LURMU+LH2OU; FH2O:=LH2OU/MOLT;
00082 A:=(LNH3U+2*LCARU)/MTOT; B:=LCARU/MTOT; C:=LURMU/MTOT;
00085 KA2:=EXP(2.303*(-2.214+797.7/T1));
00086 KA3:=EXP(2.303*(-8.017+2104/T1));
00087 Q:=1-2*KA3+A*KA3/B-2*B*KA2+A*KA2; S:=KA3/B+KA2; R:=-B;
00090 HCO3:=(-Q+SQRT(Q*Q-4*S*R))/(2*S);
00091 NH3:=HCO3-2*B+A; CO3:=KA3*NH3*HCO3/B;
00093 NH4:=B+CO3; AC:=KA2*NH3*HCO3;
00095 I:=.5*(NH4+HCO3+AC+4*CO3);
00096 COF1:=-7.958+1928/T1; COF2:=-318.1+160900/T1;
```

```
00098 KA1:=EXP(2.303*(COF1+COF2*I));
00099 PCB:=NH4*HCO3/(KA1*NH3);
00100 HO:=EXP(2.303*(-7.285+1795/T1));H:=HO/EXP(2.303*25*(NH3+C));
00102 PNH3:=1/(.0065+.665*H/NH3);
00103 PH2O:=EXP(2.303*(5.562-2071/T1));PH2O:=PH2O*FH2O;
00105 PCO2:=P-PH2O-PNH3;
00106 GNH3U:=PNH3*GCO2I/(PCO2-PCB);GH2OU:=PH2O*GCO2I/(PCO2-PCB);
00108 GCO2O:=PCB*GCO2I/(PCO2-PCB);GCO2U:=GCO2I+GCO2O;
00110 LNH3I:=GNH3U+LNH3U-GNH3I-2*GCO2O;LCARI:=LCARU+GCO2O;
00112 LURMI:=LURMU;LH2OI:=LH2OU+GH2OU-GH2OI;
00114 'IF'NO<NOT'THEN''GOTO'SCHOT;
00115 LNH3U:=LNH3B;LCARU:=LCARB;LURMU:=LURMB;LH2OU:=LH2OB;
00119 GNH3I:=GNH3B;GCO2I:=GCO2B;GH2OI:=GH2OB;
00122 OUTSTRING(1,('(ONTLEDER NUMMER:')));BLANK(1,5);AFIX(1,1,0,M);
00125 LINE(1,2);OUTSTRING(1,('(DRUK IN ATM.:')));BLANK(1,6);
00128 AFIX(1,3,1,P);LINE(1,1);OUTSTRING(1,('(TEMPERATUUR IN GR. C:')));
00131 BLANK(1,5);AFIX(1,3,1,T1-273);LINE(1,1);
00134 OUTSTRING(1,('(AANTAL SCHOTELS:')));BLANK(1,12);AFIX(1,1,0,NOT);
00137 LINE(1,4);BLANK(1,18);OUTSTRING(1,('(GAS IN')));BLANK(1,6);
00141 OUTSTRING(1,('(LIQ. IN')));BLANK(1,6);
00143 OUTSTRING(1,('(GAS UIT')));BLANK(1,6);
00145 OUTSTRING(1,('(LIQ. UIT')));LINE(1,1);
00147 BLANK(1,18);OUTSTRING(1,('(KMOL/S')));
00149 BLANK(1,7);OUTSTRING(1,('(KMOL/S')));
00151 BLANK(1,7);OUTSTRING(1,('(KMOL/S')));
00153 BLANK(1,7);OUTSTRING(1,('(KMOL/S')));LINE(1,2);
00156 OUTSTRING(1,('(AMMONIAK:')));BLANK(1,5);
00158 AFIX(1,1,3,GNH3I);BLANK(1,5);AFIX(1,1,3,LNH3I);BLANK(1,5);
00162 AFIX(1,1,3,GNH3U);BLANK(1,5);AFIX(1,1,3,LNH3U);LINE(1,1);
00166 OUTSTRING(1,('(KOOLDIOXIDE:')));BLANK(1,5);
00168 AFIX(1,1,3,GCO2I);BLANK(1,18);AFIX(1,1,3,GCO2U);LINE(1,1);
00172 OUTSTRING(1,('(AMM.CARB.:')));BLANK(1,18);
00174 AFIX(1,1,3,LCARI);BLANK(1,18);AFIX(1,1,3,LCARU);LINE(1,1);
00178 OUTSTRING(1,('(UREUM:')));BLANK(1,18);
00180 AFIX(1,1,3,LURMI);BLANK(1,18);AFIX(1,1,3,LURMU);LINE(1,1);
00184 OUTSTRING(1,('(WATER:')));BLANK(1,4);
00186 AFIX(1,1,3,GH2OI);BLANK(1,5);AFIX(1,1,3,LH2OI);BLANK(1,5);
00190 AFIX(1,1,3,GH2OU);BLANK(1,5);AFIX(1,1,3,LH2OU);LINE(1,2);
00194 MGI:=GNH3I*17+GCO2I*44+GH2OI*18;
00195 MLI:=LNH3I*17+LCARI*78+LURMI*60+LH2OI*18;
00196 MGU:=GNH3U*17+GCO2U*44+GH2OU*18;
00197 MLU:=LNH3U*17+LCARU*78+LURMU*60+LH2OU*18;
00198 OUTSTRING(1,('(TOTAAL IN KG/S:')));BLANK(1,1);
00200 AFIX(1,3,2,MGI);BLANK(1,4);AFIX(1,3,2,MLI);BLANK(1,4);
00204 AFIX(1,3,2,MGU);BLANK(1,4);AFIX(1,3,2,MLU);LINE(1,1);
00208 BLANK(1,23);AFIX(1,3,2,MGI+MLI);BLANK(1,17);AFIX(1,3,2,MLU+MGU);
00212 LINE(1,4);
00213 OUTSTRING(1,('(AMMONIAKDRUK IN ATM.:')));BLANK(1,5);
```



```
00215 AFIX(1,3,2,PNH3);LINE(1,1);
00217 OUTSTRING(1,('KOOOLDIOXIDEDRUK,BER. IN ATM.: '));BLANK(1,5);
00219 AFIX(1,3,2,PCB);LINE(1,1);
00221 OUTSTRING(1,('WATERDAMPSPANNING IN ATM.: '));BLANK(1,6);
00223 AFIX(1,3,2,PH2O);LINE(1,1);
00225 OUTSTRING(1,('KOOOLDIOXIDEDRUK IN ATM.: '));BLANK(1,5);
00227 AFIX(1,3,2,PCO2);LINE(1,4);
00229 'COMMENT'WARMTEBALANS CARB. ONTLEDER;
00229 FIWC:=0;
00230 'IF'M =1'THEN'
00230 'BEGIN'T:=.5*(T1+288);
00231 FIWC:=GCO2I*(6.585+.612'-2*T+.2366'-5*T*T-1.598'-9*T*T*T);
00232 FIWC:=FIWC*(T1-288);
00233 OUTSTRING(1,('OPWARMEN CO2 IN KCAL/S: '));BLANK(1,5);
00235 AFIX(1,4,1,FIWC);LINE(1,1);FIWG:=0;'GOTO'WARM;
00239 'END';
00240 T:=.5*(T1+T2);
00241 CP1:=5.316+1.4285'-2*T-.8362'-5*T*T+1.784'-9*T*T*T;
00242 CP2:=6.585+.61251'-2*T+.2366'-5*T*T-1.598'-9*T*T*T;
00243 CP3:=7.700+.04594'-2*T+.2521'-5*T*T-.8587'-9*T*T*T;
00244 FIWG:=(CP1*GNH3I+CP2*GCO2I+CP3*GH2OI)*(T2-T1);
00245 WARM: TC:=T1+.5*DTL-273;
00246 W:=LURMI*60/(LURMI*60+LH2OI*18);
00247 CPL1:=1.07+.378'-2*TC-.130'-4*TC*TC-.325'-6*TC*TC*TC;CPL2:=105;
00249 CPL3:=.9988-.649*W+.302*W*W-.129*W*W*W;
00250 FIWL:=(LNH3I*17*CPL1+LCARI*105+(LURMI+LH2OI)*CPL3/(.055-.039*W));
00251 FIWL:=FIWL*DTL;
00252 FIWA:=(LCARI-LCARU)*28'+3+(LNH3I-LNH3U)*500;
00253 FIWO:=FIWA+(LH2OI-LH2OU)*(864.0-.856*T1)*18;
00254 OUTSTRING(1,('WARMTE GAS IN KCAL/S: '));BLANK(1,5);
00256 AFIX(1,4,1,FIWG);LINE(1,1);
00258 OUTSTRING(1,('WARMTE LIQ. IN KCAL/S: '));BLANK(1,5);
00260 AFIX(1,4,1,FIWL);LINE(1,1);
00262 OUTSTRING(1,('WARMTE VRIJ IN KCAL/S: '));BLANK(1,5);
00264 AFIX(1,4,1,FIWG+FIWL);LINE(1,1);
00266 OUTSTRING(1,('WARMTE NODIG IN KCAL/S: '));BLANK(1,5);
00268 AFIX(1,4,1,FIWO+FIWC);LINE(1,1);
00270 OUTSTRING(1,('NETTO WARMTE NODIG IN KCAL/S: '));BLANK(1,5);
00272 FIX(1,4,1,FIWO+FIWC-FIWG-FIWL);PAGE(1);
00274 'COMMENT'KOMPRESSIE;
00274 MOLT:=GNH3U+GCO2U+GH2OU;
00275 FNH3:=GNH3U/MOLT;FCO2:=GCO2U/MOLT;FH2O:=GH2OU/MOLT;
00278 TK:=405.5*FNH3+304.2*FCO2+647.3*FH2O;
00279 PK:=111.3*FNH3+ 72.9*FCO2+218.3*FH2O;
00280 KOMPR:T2:=T1+50;P:=.5*P*(1+PVER);
00282 TEMP: T:=.5*(T2+T1);
00283 CP1:=5.316+1.4285'-2*T-.8362'-5*T*T+1.784'-9*T*T*T;
00284 CP2:=6.585+.61251'-2*T+.2366'-5*T*T-1.598'-9*T*T*T;
```

```
00285 CP3:=7.700+.04594*-2*T+.2521*-5*T*T-.8587*-9*T*T*T;
00286 CPI:=CPI*FNH3+CP2*FCO2+CP3*FH2O;
00287 CP:=CPI+EXP(2.303*(2.054-1.225*T/TK)+(-.454+1.265*T/TK)*LN(P/PK));
00288 T2:=T1*PVER**(1.987/(.75*CP));
00289 'IF'ABS(T2+T1-2*T)>EPS'THEN''GOTO'TEMP;
00290 DH:=CP*(T2-T1);P:=2*P*PVER/(1+PVER);
00292 OUTSTRING(1,('NUMMER TRAP:'));BLANK(1,5);AFIX(1,2,0,N);LINE(1,2)
00295 ;OUTSTRING(1,('INGANGSTEMPERATUUR IN GR. C:'));BLANK(1,6);
00298 AFIX(1,3,1,T1-273);LINE(1,1);
00300 OUTSTRING(1,('UITGANGSTEMPERATUUR IN GR. C:'));BLANK(1,5);
00302 AFIX(1,3,1,T2-273);LINE(1,1);
00304 OUTSTRING(1,('UITGANGSDRUK IN ATM.:'));BLANK(1,13);
00306 AFIX(1,3,1,P);LINE(1,1);
00308 OUTSTRING(1,('CP,IDEAAL IN CAL/MOL:'));BLANK(1,12);
00310 AFIX(1,3,2,CPI);LINE(1,1);
00312 OUTSTRING(1,('CP,GEKORR. IN CAL/MOL:'));BLANK(1,11);
00314 AFIX(1,3,2,CP);LINE(1,1);
00316 OUTSTRING(1,('ENTHALPIESTIJGING IN CAL/MOL:'));BLANK(1,4);
00318 AFIX(1,4,1,DH);LINE(1,1);
00320 OUTSTRING(1,('ENTHALPIESTIJGING IN KCAL/S:'));BLANK(1,5);
00322 AFIX(1,4,1,DH*MOLT);LINE(1,4);
00324 'IF'T2>523'THEN'
00324 'BEGIN'OUTSTRING(1,('UITGANGSTEMPERATUUR TE HOOG.'));LINE(1,1);
00326 OUTSTRING(1,('NIEUWE ONTLEDER.'));
00327 PAGE(1);P:=P/PVER;T2:=T1;'GOTO'WICAR;
00331 'END';
00332 'IF'N=NT'THEN''GOTO'EIND;
00333 N:=N+1;T1:=T2;K:=K+1;
00336 'IF'K=3'THEN'
00336 'BEGIN'PAGE(1);K:=0;
00338 'END';
00339 'GOTO'KOMPR;
00340 EIND: 'IF' Z<ZT'THEN'
00340 'BEGIN'PAGE(1);'GOTO'LEES;
00342 'END';
00343 'END';
```

KOMPRESSORBEREKENING VOORONTWERP KALKMAN/VERBRUGGE.

AANTAL TRAPPEN: 18
 DRUKVERHOUDING: 1.21

ONTLEDER NUMMER: 1

DRUK IN ATM.: 5.0
 TEMPERATUUR IN GR. C: 70.0
 AANTAL SCHOTELS: 3

	GAS IN KMOL/S	LIQ. IN KMOL/S	GAS UIT KMOL/S	LIQ. UIT KMOL/S
AMMONIAK:	.000	.004	.004	.001
KOOLDIOXIDE:	.290		.291	
AMM.CARB.:		.002		.001
UREUM:		.289		.289
WATER:	.000	.298	.010	.288
TOTAAL IN KG/S:	12.76	22.92	13.06	22.62
		35.68		35.68

AMMONIAKDRUK IN ATM.: .07
 KOOLDIOXIDEDRUK, BER. IN ATM.: .00
 WATERDAMPSPANNING IN ATM.: .17
 KOOLDIOXIDEDRUK IN ATM.: 4.76

OPWARMEN CO2 IN KCAL/S: 138.8
 WARMTE GAS IN KCAL/S: .0
 WARMTE LIQ. IN KCAL/S: 913.8
 WARMTE VRIJ IN KCAL/S: 913.8
 WARMTE NODIG IN KCAL/S: 269.5
 NETTO WARMTE NODIG IN KCAL/S: -644.3

NUMMER TRAP: 1

INGANGSTEMPERATUUR IN GR. C:	70.0
UITGANGSTEMPERATUUR IN GR. C:	88.7
UITGANGSDRUK IN ATM.:	6.0
CP,IDEAAL IN CAL/MOL:	8.95
CP,GEKORR. IN CAL/MOL:	9.34
ENTHALPIESTIJGING IN CAL/MOL:	174.2
ENTHALPIESTIJGING IN KCAL/S:	53.2

NUMMER TRAP: 2

INGANGSTEMPERATUUR IN GR. C:	88.7
UITGANGSTEMPERATUUR IN GR. C:	108.2
UITGANGSDRUK IN ATM.:	7.3
CP,IDEAAL IN CAL/MOL:	9.08
CP,GEKORR. IN CAL/MOL:	9.41
ENTHALPIESTIJGING IN CAL/MOL:	183.7
ENTHALPIESTIJGING IN KCAL/S:	56.1

NUMMER TRAP: 3

INGANGSTEMPERATUUR IN GR. C:	108.2
UITGANGSTEMPERATUUR IN GR. C:	128.5
UITGANGSDRUK IN ATM.:	8.8
CP,IDEAAL IN CAL/MOL:	9.22
CP,GEKORR. IN CAL/MOL:	9.50
ENTHALPIESTIJGING IN CAL/MOL:	193.5
ENTHALPIESTIJGING IN KCAL/S:	59.1

NUMMER TRAP: 4

INGANGSTEMPERATUUR IN GR. C:	128.5
UITGANGSTEMPERATUUR IN GR. C:	149.7
UITGANGSDRUK IN ATM.:	10.6
CP,IDEAAL IN CAL/MOL:	9.37
CP,GEKORR. IN CAL/MOL:	9.61
ENTHALPIESTIJGING IN CAL/MOL:	203.8
ENTHALPIESTIJGING IN KCAL/S:	62.3

NUMMER TRAP: 5

INGANGSTEMPERATUUR IN GR. C:	149.7
UITGANGSTEMPERATUUR IN GR. C:	171.8
UITGANGSDRUK IN ATM.:	12.7
CP,IDEAAL IN CAL/MOL:	9.52
CP,GEKORR. IN CAL/MOL:	9.73
ENTHALPIESTIJGING IN CAL/MOL:	214.5
ENTHALPIESTIJGING IN KCAL/S:	65.6

NUMMER TRAP: 6

INGANGSTEMPERATUUR IN GR. C:	171.8
UITGANGSTEMPERATUUR IN GR. C:	194.6
UITGANGSDRUK IN ATM.:	15.3
CP,IDEAAL IN CAL/MOL:	9.68
CP,GEKORR. IN CAL/MOL:	9.87
ENTHALPIESTIJGING IN CAL/MOL:	225.6
ENTHALPIESTIJGING IN KCAL/S:	68.9

NUMMER TRAP: 7

INGANGSTEMPERATUUR IN GR. C:	194.6
UITGANGSTEMPERATUUR IN GR. C:	218.3
UITGANGSDRUK IN ATM.:	18.5
CP,IDEAAL IN CAL/MOL:	9.85
CP,GEKORR. IN CAL/MOL:	10.02
ENTHALPIESTIJGING IN CAL/MOL:	227.1
ENTHALPIESTIJGING IN KCAL/S:	72.5

NUMMER TRAP: 8

INGANGSTEMPERATUUR IN GR. C:	218.3
UITGANGSTEMPERATUUR IN GR. C:	242.8
UITGANGSDRUK IN ATM.:	22.3
CP,IDEAAL IN CAL/MOL:	10.02
CP,GEKORR. IN CAL/MOL:	10.18
ENTHALPIESTIJGING IN CAL/MOL:	249.0
ENTHALPIESTIJGING IN KCAL/S:	76.1

NUMMER TRAP: 9

INGANGSTEMPERATUUR IN GR. C:	242.8
UITGANGSTEMPERATUUR IN GR. C:	268.0
UITGANGSDRUK IN ATM.:	26.8
CP,IDEAAL IN CAL/MOL:	10.20
CP,GEKORR. IN CAL/MOL:	10.35
ENTHALPIESTIJGING IN CAL/MOL:	261.3
ENTHALPIESTIJGING IN KCAL/S:	79.9

UITGANGSTEMPERATUUR TE HOOG.
NIEUWE ONTLEDER.

ONTLEDER NUMMER: 2

DRUK IN ATM.: 22.3
TEMPERATUUR IN GR. C: 132.0
AANTAL SCHOTELS: 3

	GAS IN KMOL/S	LIQ. IN KMOL/S	GAS UIT KMOL/S	LIQ. UIT KMOL/S
AMMONIAK:	.004	.012	.017	.004
KOOLDIOXIDE:	.291		.293	
AMM.CARB.:		.004		.002
UREUM:		.289		.289
WATER:	.010	.309	.021	.298
TOTAAL IN KG/S:	13.06	23.41	13.56	22.92
		36.47		36.47

AMMONIAKDRUK IN ATM.: 1.13
KOOLDIOXIDEDRUK, BER. IN ATM.: .05
WATERDAMPSPANNING IN ATM.: 1.42
KOOLDIOXIDEDRUK IN ATM.: 19.71

WARMTE GAS IN KCAL/S: 328.8
WARMTE LIQ. IN KCAL/S: 634.8
WARMTE VRIJ IN KCAL/S: 963.6
WARMTE NODIG IN KCAL/S: 163.5
NETTO WARMTE NODIG IN KCAL/S: -800.1

NUMMER TRAP: 9

INGANGSTEMPERATUUR IN GR. C:	132.0
UITGANGSTEMPERATUUR IN GR. C:	152.1
UITGANGSDRUK IN ATM.:	26.8
CP,IDEAAL IN CAL/MOL:	9.37
CP,GEKORR. IN CAL/MOL:	10.19
ENTHALPIESTIJGING IN CAL/MOL:	205.3
ENTHALPIESTIJGING IN KCAL/S:	67.9

NUMMER TRAP: 10

INGANGSTEMPERATUUR IN GR. C:	152.1
UITGANGSTEMPERATUUR IN GR. C:	173.0
UITGANGSDRUK IN ATM.:	32.3
CP,IDEAAL IN CAL/MOL:	9.52
CP,GEKORR. IN CAL/MOL:	10.30
ENTHALPIESTIJGING IN CAL/MOL:	215.4
ENTHALPIESTIJGING IN KCAL/S:	71.3

NUMMER TRAP: 11

INGANGSTEMPERATUUR IN GR. C:	173.0
UITGANGSTEMPERATUUR IN GR. C:	194.7
UITGANGSDRUK IN ATM.:	39.0
CP,IDEAAL IN CAL/MOL:	9.66
CP,GEKORR. IN CAL/MOL:	10.43
ENTHALPIESTIJGING IN CAL/MOL:	225.9
ENTHALPIESTIJGING IN KCAL/S:	74.8

NUMMER TRAP: 12

INGANGSTEMPERATUUR IN GR. C:	194.7
UITGANGSTEMPERATUUR IN GR. C:	217.1
UITGANGSDRUK IN ATM.:	47.0
CP,IDEAAL IN CAL/MOL:	9.82
CP,GEKORR. IN CAL/MOL:	10.58
ENTHALPIESTIJGING IN CAL/MOL:	236.8
ENTHALPIESTIJGING IN KCAL/S:	78.4

NUMMER TRAP: 13

INGANGSTEMPERATUUR IN GR. C:	217.1
UITGANGSTEMPERATUUR IN GR. C:	240.2
UITGANGSDRUK IN ATM.:	56.6
CP,IDEAAL IN CAL/MOL:	9.98
CP,GEKORR. IN CAL/MOL:	10.76
ENTHALPIESTIJGING IN CAL/MOL:	248.1
ENTHALPIESTIJGING IN KCAL/S:	82.1

NUMMER TRAP: 14

INGANGSTEMPERATUUR IN GR. C:	240.2
UITGANGSTEMPERATUUR IN GR. C:	263.9
UITGANGSDRUK IN ATM.:	68.2
CP,IDEAAL IN CAL/MOL:	10.14
CP,GEKORR. IN CAL/MOL:	10.96
ENTHALPIESTIJGING IN CAL/MOL:	259.6
ENTHALPIESTIJGING IN KCAL/S:	85.9

UITGANGSTEMPERATUUR TE HOOG.
NIEUWE ONTLEDER.

ONTLEDER NUMMER: 3

DRUK IN ATM.: 56.6
TEMPERATUUR IN GR. C: 174.0
AANTAL SCHOTELS: 3

	GAS IN KMOL/S	LIQ. IN KMOL/S	GAS UIT KMOL/S	LIQ. UIT KMOL/S
AMMONIAK:	.017	.034	.047	.012
KOOLDIOXIDE:	.293		.297	
AMM.CARB.:		.008		.004
UREUM:		.289		.289
WATER:	.021	.316	.028	.309
TOTAAL IN KG/S:	13.56	24.22	14.36	23.41
		37.78		37.78

AMMONIAKDRUK IN ATM.: 7.17
KOOLDIOXIDEDRUK, BER. IN ATM.: .24
WATERDAMPSPANNING IN ATM.: 4.22
KOOLDIOXIDEDRUK IN ATM.: 45.23

WARMTE GAS IN KCAL/S: 215.1
WARMTE LIQ. IN KCAL/S: 289.1
WARMTE VRIJ IN KCAL/S: 504.2
WARMTE NODIG IN KCAL/S: 180.8
NETTO WARMTE NODIG IN KCAL/S: -323.4

NUMMER TRAP: 14

INGANGSTEMPERATUUR IN GR. C:	174.0
UITGANGSTEMPERATUUR IN GR. C:	193.8
UITGANGSDRUK IN ATM.:	68.2
CP,IDEAAL IN CAL/MOL:	9.69
CP,GEKORR. IN CAL/MOL:	11.40
ENTHALPIESTIJGING IN CAL/MOL:	226.0
ENTHALPIESTIJGING IN KCAL/S:	84.0

NUMMER TRAP: 15

INGANGSTEMPERATUUR IN GR. C:	193.8
UITGANGSTEMPERATUUR IN GR. C:	214.1
UITGANGSDRUK IN ATM.:	82.2
CP,IDEAAL IN CAL/MOL:	9.83
CP,GEKORR. IN CAL/MOL:	11.63
ENTHALPIESTIJGING IN CAL/MOL:	235.9
ENTHALPIESTIJGING IN KCAL/S:	87.7

NUMMER TRAP: 16

INGANGSTEMPERATUUR IN GR. C:	214.1
UITGANGSTEMPERATUUR IN GR. C:	234.7
UITGANGSDRUK IN ATM.:	99.1
CP,IDEAAL IN CAL/MOL:	9.97
CP,GEKORR. IN CAL/MOL:	11.92
ENTHALPIESTIJGING IN CAL/MOL:	246.0
ENTHALPIESTIJGING IN KCAL/S:	91.4

NUMMER TRAP: 17

INGANGSTEMPERATUUR IN GR. C:	234.7
UITGANGSTEMPERATUUR IN GR. C:	255.6
UITGANGSDRUK IN ATM.:	119.5
CP,IDEAAL IN CAL/MOL:	10.12
CP,GEKORR. IN CAL/MOL:	12.28
ENTHALPIESTIJGING IN CAL/MOL:	256.2
ENTHALPIESTIJGING IN KCAL/S:	95.3

UITGANGSTEMPERATUUR TE HOOG.
NIEUWE ONTLEDER.

ONTLEDER NUMMER: 4

DRUK IN ATM.: 99.1
TEMPERATUUR IN GR. C: 193.0
AANTAL SCHOTELS: 3

	GAS IN KMOL/S	LIQ. IN KMOL/S	GAS UIT KMOL/S	LIQ. UIT KMOL/S
AMMONIAK:	.047	.045	.070	.034
KOOLDIOXIDE:	.297		.303	
AMM.CARB.:		.014		.008
UREUM:		.289		.289
WATER:	.028	.313	.025	.316
TOTAAL IN KG/S:	14.36	24.83	14.97	24.22
		39.20		39.20

-85-

AMMONIAKDRUK IN ATM.:	17.37
KOOLDIOXIDEDRUK, BER. IN ATM.:	.65
WATERDAMPSPANNING IN ATM.:	6.27
KOOLDIOXIDEDRUK IN ATM.:	75.49

WARMTE GAS IN KCAL/S:	153.6
WARMTE LIQ. IN KCAL/S:	46.4
WARMTE VRIJ IN KCAL/S:	107.1
WARMTE NODIG IN KCAL/S:	155.2
NETTO WARMTE NODIG IN KCAL/S:	+48.1

NUMMER TRAP: 17

INGANGSTEMPERATUUR IN GR. C:	193.0
UITGANGSTEMPERATUUR IN GR. C:	211.3
UITGANGSDRUK IN ATM.:	119.5
CP,IDEAAL IN CAL/MOL:	9.86
CP,GEKORR. IN CAL/MOL:	12.86
ENTHALPIESTIJGING IN CAL/MOL:	235.0
ENTHALPIESTIJGING IN KCAL/S:	93.5

NUMMER TRAP: 18

INGANGSTEMPERATUUR IN GR. C:	211.3
UITGANGSTEMPERATUUR IN GR. C:	229.5
UITGANGSDRUK IN ATM.:	144.0
CP,IDEAAL IN CAL/MOL:	9.99
CP,GEKORR. IN CAL/MOL:	13.37
ENTHALPIESTIJGING IN CAL/MOL:	244.0
ENTHALPIESTIJGING IN KCAL/S:	97.1

Programma ter berekening van de vloeistoftemperatuur bij ingang van de ontleders.

```

10.      PUT LIST('Geef vloeistofsamenstelling :');
20.      GET LIST(ln,lc,lu,lh);
30.      PUT LIST('Geef temperatuur ontleders (graden Celsius) :');
40.      GET LIST(t1,t2);
90.      PUT LIST('Geef warmte stroom (kcal/s) :');
100.     GET LIST(fiw);
110.     w=lu*60/(lu*60+lh*18);
120.     cp3=.9988-.649*w+.302*w*w-.129*w*w*w;
130.     cp2=105;
140.     fiww=(lu+lh)*cp3/(.055-.039*w)+lc*105;
150.     ON ATTENTION GET LIST(dt);
151.     weer: PUT LIST('Geef schatting koeltemperatuur :');
152.     GET LIST(t);
153.     PUT LIST('Geef delta t voor iteratie :');
154.     GET LIST(dt);
155.     PUT LIST('');
160.     temp: tc=.5*(t1+t);
170.     cp1=1.07+.00378*tc-.000013*tc*tc-.000000325*tc*tc*tc;
180.     fiw1=(ln*cp1+fiww)*(t-t1);
190.     PUT IMAGE(t,fiw1-fiw)(im1);
200.     IF fiw1>fiw THEN t=t-dt; ELSE GO TO print;
210.     GO TO temp;
240.     print: PUT LIST('');
250.     PUT LIST(' t1      t      t2      fiw1      dfiw      fiwk');
255.     t=t+dt;
260.     tc=.5*(t2+t);
270.     fiwk=(fiww+ln*(1.07+.00378*tc-.000013*tc*tc-.000000325*tc*tc*tc))*(t2-t);
280.     PUT IMAGE(t1,t,t2,fiw1,fiw-fiw1,fiwk)(im2);
284.5    PUT LIST('');
285.     PUT LIST('Nog een iteratie ? ja=1,nee=0');
286.     GET LIST(keuze);
287.     IF keuze=1 THEN GO TO weer;
290.     im1:  IMAGE;
-----
300.     im2:  IMAGE;
-----
310.     END ;

```

BIJLAGE III

Het weergeven van tabellen en grafieken in analytische vorm.

In verband met de berekeningen per computer was het wenselijk relaties welke in grafiek of tabel voorhanden zijn in analytische vorm over te brengen. Dan kan met één formule voor een bepaald gebied continu de waarde van een variabele bepaald worden. Een voorbeeld is de waterdampspanning als functie van de temperatuur. Bij een bepaalde temperatuur kan de spanning afgelezen worden uit stoomtabellen. Een analytisch verband zal waarschijnlijk de vorm hebben van $\log p = A + B/T$. Hoe wordt nu dit verband gevonden, m.a.w. welke zijn de konstantes A en B ?

Uit een grafiek worden een aantal punten afgelezen of uit een tabel worden een aantal aldaar vermelde waarden genomen. De waarden moeten zo gekozen worden dat een gebied ontstaat waar de te berekenen waarden in moeten liggen zodat niet geëxtrapoleerd hoeft te worden. Om controle achteraf te vergemakkelijken willen we nu een lineair verband verkrijgen. Dit kan door de gekozen punten als argumenten voor geschikt gekozen functies te gebruiken. In het bovengenoemde voorbeeld moeten dan $\log p$ en $1/(t+273)$ berekend worden, als de temperatuur in °C gegeven is. De konstantes A en B worden nu gevonden door met de methode der kleinste kwadraten die lijn te bepalen welke het beste aansluit bij de berekende punten. De berekening gaf tevens de standaardafwijking van de punten t.o.v. de berekende lijn, zodat al direkt gezegd kan worden of het gevonden verband goed gekozen is of niet. Voor bijlage II zijn de volgende betrekkingen berekend :

Met lit. 11 uit grafieken en tabellen :

$$\log K_{a1} = -7.958 + 1928/T + (-318.1 + 160900/T) * I$$

$$\log K_{a2} = -2.214 + 797.7/T$$

$$\log K_{a3} = -8.017 + 2104/T$$

$$\log H_o = -7.285 + 1795/T$$

Voor de dampdruk van zuiver water als functie van de temperatuur met

lit.17 : $\log p = 5.562 - 2071/T$

Eveneens uit lit. 17 volgt voor de verdampingswarmte van water :

$$\Delta H_{\text{verd.}} = 864.0 - .856 * T$$

Voor de kompressie kan de drukkorrectie op c_p berekend worden met lit.18.

Voor $.1 < p_r < 1$ en $1.0 < T_r < 1.4$ geldt bij benadering :

$$c_p - c_p^* = 2.054 - 1.225 * T_r + (-.454 + 1.265 * T_r) * \ln p_r.$$

Hierin is c_p^* bij $p=0$, c_p bij $p=p$.

Nu volgen de in het programma gebruikte variabelen.

- cof te berekenen coëfficiënten.
- sig standaardafwijkingen meetpunten.
- a argumentwaarden punten.
- b funktiewaarden punten.
- arg functie voor argumenten.
- func functie voor funktiewaarden.
- x waarden, berekend met arg uit a.
- y - - - func uit b.
- graad graad van het gevraagde verband.
- klepol procedure voor kleinste kwadratenmethode.
- n aantal punten.

Tenslotte volgt het gebruikte programma.

```

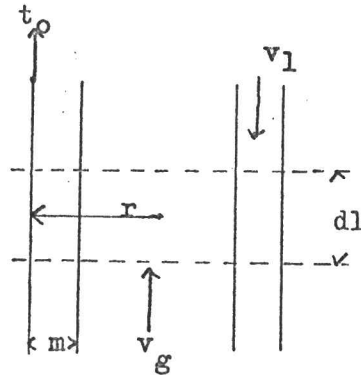
10. PUT LIST('Dit programma berekent een lineair verband tussen twee variabelen volgens de kleinste'
15. PUT LIST('kwadratenmethode. Het oorspronkelijke verband kan door goed gekozen functies lineair-
17. PUT LIST(');
20. DECLARE klepol ENTRY EXT LIB(STEM);
30. DECLARE sig(0:1) , cof(0:1) ;
40. DECLARE x(1) CONTROLLED , y(1) CONTROLLED , a(1) CONTROLLED , b(1) CONTROLLED ;
45. DECLARE arg CHAR(10) VAR, func CHAR(10) VAR;
45.1 nieuw=1;
50. lees: PUT LIST('Aantal punten :');
60. GET LIST(n);
70. ALLOCATE x(n),y(n),a(n),b(n);
80. PUT LIST('Geef de punten, eerst alle argumentwaarden, dan alle funktiewaarden. ');
90. GET LIST(a,b);
95. IF nieuw=0 THEN GO TO reken;
100. start: PUT LIST('Geef functies van a en b om een lineair verband te verkrijgen, eerst voor de argumente
110. PUT LIST('dan voor de funktiewaarden. ');
120. READ INTO(arg) ;
120.1 READ INTO(func) ;
125.5 -90- reken: x=eval(arg);
125.5 y=eval(func);
140. graad=1;
150. CALL klepol(x,y,n,graad,sig,cof);
160. PUT IMAGE(cof,sig)(in);
170. in: IMAGE;
De coëfficiënten zijn ----- en ----- ; de signawaarden zijn --.----- en --.-----
175. PUT LIST('');
185. PUT LIST('Wilt U nog een lineair verband berekenen ? Antwoord met 1 voor ja,0 voor nee. ');
185.1 GET LIST(antwrd);
185.2 IF antwrd=0 THEN GO TO eind;
187. PUT LIST('Moeten er nieuwe getallen ingelezen worden ? ');
188. GET LIST(antw);
189. IF antw=0 THEN GO TO start;
189.1 FREE x,y,a,b;
190. PUT LIST('Moeten voor een nieuwe berekening nieuwe functies gekozen worden ? ');
200. GET LIST(nieuw);
210. GO TO lees;
220. eind: PUT LIST('Einde programma. ');
230. FREE x,y,a,b;

```

gemaakt worden.');

Bijlage IV De berekening van de stripper.

Voor de berekening van de stripper is het noodzakelijk de filmdikte van de vloeistof in de pijpen te berekenen. Dit kan door een krachtenbalans over een gedeelte van een pijp van de stripper op te zetten.



De krachtenbalans over een stukje met lengte dl wordt nu:

$$g \left\{ \rho_1 (\pi r^2) - \rho_1 \pi (r-m)^2 \right\} dl + \rho_g \cdot g \cdot \pi (r-m)^2 dl =$$

$$= t_o \cdot 2\pi r \cdot dl + \frac{dp}{dl} \cdot \pi r^2 \cdot dl$$

Hieruit volgt :

$$2 m = \frac{2t_o - (\rho_g \cdot g - \frac{dp}{dl}) \cdot r}{(\rho_1 - \rho_g) \cdot g}$$

met:

$$t_o = f_1 \cdot \frac{1}{2} \rho_1 v_1^2$$

$$\frac{dp}{dl} = f_g \cdot \frac{1}{2} \rho_g v_g^2 \cdot \frac{S}{F}$$

$$S = 2\pi(r-m); F = \pi(r-m)^2$$

dus:

$$\frac{dp}{dl} = f_g \cdot \frac{1}{2} \rho_g v_g^2 \cdot \frac{2}{r-m}$$

De berekening gaat als volgt:

We nemen een bepaalde pijpdiameter aan. Vervolgens nemen we nog 2 waarden aan nl. de filmdikte in de stripper en de vloeistofsnelheid.

- Hiermee wordt de volumestroom per pijp berekend:

$$\bar{\Phi}_V \text{ per pijp} = \pi \cdot D \cdot m \cdot v_1$$

- dan volgt het aantal pijpen uit

$$n = (\bar{\Phi}_V \text{ tot} / \bar{\Phi}_V \text{ per pijp}).$$

- met dit aantal pijpen, berekenen we de volumestroom van het gas per pijp:

$$\bar{\Phi}_{Vg} \text{ per pijp} = \bar{\Phi}_{Vg} \text{ tot} / n$$

- vervolgens de gassnelheid m.b.v.

$$\bar{\Phi}_{Vg} \text{ per pijp} = \pi (r-m)^2 \cdot v_g$$

- m.b.v. ρ_g , v_g , η_g (geschat op $3 \cdot 10^{-5} \text{ Ns/m}^2$ lit. 22, p.3-197) berekenen we Re_g .

- uit Re_g volgt de frictiefactor f_g .

- uit f_g volgt de drukval per pijp

$$\text{m.b.v. } \frac{dp}{dl} = f_g \cdot \frac{1}{2} \cdot \rho_g \cdot v_g^2 \cdot \frac{2}{r-m}$$

- dan wordt Re_1 berekend met ρ_1 , v_1 en η_1 (geschat op $5 \cdot 10^{-4} \text{ Ns/m}^2$ lit.22, p. 3-199)

- met Re_1 berekenen we f_1 .

- en hiermede t_o .

Invullen van de verkregen waarden in de boven verkregen vergelijking levert een nieuwe waarde voor de filmdikte en de vloeistofsnelheid.

De filmdikte werd berekend m.b.v. een computerprogramma, dat hierbij ook opgenomen is. Er zijn natuurlijk een aantal mogelijkheden, maar bij de keuze moeten de volgende eisen worden gesteld:

a. de drukval mag niet te groot zijn.

b. het aantal pijpen moet binnen redelijke grenzen blijven.

c. de lengte van de stripper moet niet te groot worden.

De lengte van de stripper wordt als volgt berekend:

De verblijftijd van de vloeistof in een deel van de stripper is recht evenredig met de filmdikte. De stripper wordt in 3 delen berekend. Nu geldt:

$$\frac{t_1}{t_2} = \frac{m_1}{m_2} \quad \text{en} \quad \frac{t_1}{t_3} = \frac{m_1}{m_3}$$

of

$$t_1 = \frac{m_1}{m_2} \cdot t_2 \quad \text{en} \quad t_1 = \frac{m_1}{m_3} \cdot t_3 \quad \text{en} \quad t_3 = \frac{m_3}{m_2} \cdot t_2$$

Uit lit. 1 blijkt dat de totale verblijftijd 10 sec. is, dus:

$$t_1 + t_2 + t_3 = 10$$

$$\left(\frac{m_1}{m_2} + 1 + \frac{m_3}{m_2} \right) t_2 = 10$$

$$t_2 = \frac{10m_2}{m_1 + m_2 + m_3}$$

$$t_1 = \frac{10m_1}{m_1 + m_2 + m_3}$$

$$t_3 = \frac{10m_3}{m_1 + m_2 + m_3}$$

De lengte van de stripper is nu:

$$L = v_{11}t_1 + v_{12}t_2 + v_{13}t_3$$

Symbolen in het programma

m	= filmdikte	m
stepm	= stapgrootte van de filmdikte	m
m1	= ondergrens filmdikte	m
m2	= bovengrens filmdikte	m
v1	= vloeistofsnelheid	m/s
v11	= ondergrens vloeistofsnelheid	m/s
stepv	= stapgrootte vloeistofsnelheid	m/s
v12	= bovengrens vloeistofsnelheid	m/s
d	= binnendiameter v.d.pijpen	m
rog	= dichtheid van het gas	kg/m ³
rol	= dichtheid van de vloeistof	kg/m ³
fiml	= massastroom vloeistof	kg/s
fimg	= massastroom gas	kg/s
vsl	= volumestroom vloeistof per pijp	m ³ /s
n	= aantal pijpen	
vsg	= volumestroom gas per pijp	m ³ /s
vg	= gassnelheid	m/s
reg	= Reynoldsgetal voor het gas	
fg	= frictiefactor voor het gas	
dpdl	= drukval over de pijp	N/m ³
dl	= hydraulische diameter	m
rel	= Reynoldsgetal voor de vloeistof	
fl	= frictiefactor voor de vloeistof	
tau	= schuifspanning van wand op de vloeistof	N/m ²
mn	= nieuwberekende filmdikte	m
vln	= nieuwberekende vloeistofsnelheid	m/s

CPS-PROGRAMMA TER BEREKENING VAN DE STRIPPER.

```

5.      ON ATTENTION GO TO reken;
10.     PUT LIST('Berekening van de filmdikte in de stripper');
20.     PUT LIST('diameter pijp, dichtheid gas, dichtheid vloeistof?');
30.     GET LIST(d,rog,rol);
34.     PUT LIST('Massastromen van de vloeistof en het gas?');
36.     GET LIST(fiml,fimg);
40.     reken: PUT LIST('ondergrens, stapgrootte en bovengrens van de filmdikte?');
50.     GET LIST(m1,stepm,m2);
60.     PUT LIST('ondergrens, stapgrootte en bovengrens van de vloeistofsnelheid?');
70.     GET LIST(vl1,stepv,vl2);
75.     PUT LIST('');
80.     PUT LIST('diameter  filmdikte  vloeistofsnelheid  nieuwe filmdikte  nieuwe vloeistofsnelheid');
90.     PUT LIST('  m          m          m/s          m          m/s  ');
100.    DO m=m1 BY stepm TO m2;
110.    DO vl=vl1 BY stepv TO vl2;
120.    vs1=3.14*d*m*vl;
130.    n=fiml/(rol*vs1);
140.    vsg=fimg/(rog*n);
150.    vg=vsg/(3.14*(d/2-m)**2);
160.    reg=rog*vg*(d-2*m)/.00003;
170.    IF reg>50000 THEN fg=.0055-.05556*.1E-08*reg; ELSE fg=.010445-.99*.0000001*reg;
180.    dpd1=fg*rog*vg*vg*2/(d-2*m);
190.    d1=4*m;
200.    rel=rol*vl*d1/.0005;
210.    IF rel>50000 THEN fl=.0055-.05556*.1E-08*rel; ELSE fl=.010445-.99*.0000001*rel;
220.    tau=fl*.5*rol*vl*vl;
230.    mn=(tau-(rog*9.81-dpd1)*d/4)/((rol-rog)*9.81);
240.    vln=vs1/(3.14*d*mn);
250.    PUT IMAGE(d,m,vl,mn,vln,n,dpd1)(lab);
260.    lab:  IMAGE;
-----
270.    END ;
280.    END ;
285.    PUT LIST('');
290.    PUT LIST(' Nieuwe berekening? tik in: voor ja een 1, voor nee een 0');
300.    GET LIST(antwr);
310.    IF antwr=1 THEN GO TO reken;
320.    PUT LIST('U kunt gaan');

```

-95-

BIJLAGE V

De fasenregel en het ontwerp.

Daar bij de gehele ureumfabricage gas-vloeistofevenwichten een rol spelen, is kennis van de fasenregel belangrijk. Deze regel luidt :

$$f = n - r + 2 - \varphi$$

f aantal vrijheidsgraden.

n aantal componenten.

φ aantal extra betrekkingen.

Het aantal vrijheidsgraden is het aantal intensiteitsvariabelen dat onafhankelijk van elkaar gekozen kan worden. Als deze grootheden gekozen zijn, ligt het systeem vast. n kan gevonden worden door het aantal aan het systeem deelnemende stoffen te bepalen en vervolgens het aantal ingestelde evenwichten tussen deze stoffen er van af te trekken. In ons systeem zijn er 5 stoffen : ureum, H₂O, NH₃, carbamaat en CO₂. In de reaktor zijn er twee ingestelde evenwichten :



Dit betekent voor het aantal componenten $n=3$, dus een ternair systeem. In de stripper en de ontleders is de verblijftijd zo kort dat het tweede evenwicht zich niet kan instellen. Het aantal componenten is dan 4, dus een quaternair systeem. Het aantal vrijheden is dus resp. 3 en 4, want het aantal fasen is in beide gevallen 2.

Dit betekent dat het reaktorevenwicht vast ligt als 3 variabelen gekozen worden. Hiervoor nemen we allereerst p en T. Stellen we als eis dat er azeotrope verdamping moet plaatsvinden, dan geeft dit een extra betrekking ($\varphi = 1$), namelijk gassamenstelling=vloeistofsamenstelling. Bij één

temperatuur en één druk is er dus één azeotropisch punt.

Voor de evenwichten in stripper en ontleders moeten 4 variabelen gekozen worden. Na keuze van p en T blijven er nog 2 over. Hiervoor kunnen dan 2 samenstellingen gekozen worden. Bij de berekening van Wicar wordt geen druk bepaald, maar liggen de concentraties NH_3 , CO_2 en ureum vast.

BIJLAGE VI

Condensatie van het gasmengsel

Condensatie van de gassen in de kompressor mag niet voorkomen.

De redenen hiervoor zijn al eerder uiteengezet. Bij de berekening van de kompressor en de carbamaatontleders is niet ingegaan op eventuele condensatie. Het is noodzakelijk om te controleren of de verschillende gasmengsels een zodanige druk en temperatuur hebben, dat geen condensatie optreedt.

Noemen we de gasstroom die T16 verlaat G16, de gasstroom die T13 verlaat G13 enz., dan kunnen we het volgende overzicht noteren:

Gasstroom	P(atm)	T(°C)	Kompressie in	tot P(atm)	T(°C)
G16	5	70	C15	22	243
G13	22	132	C12	57	240
G10	57	174	C9	99	235
G 7	99	193	C6	144	230

Samenstelling:

	L = NH ₃ /CO ₂	% H ₂ O
G16	.01	3.3
G13	.06	6.3
G10	.16	7.5
G7	.23	6.3

Voor het vinden van de condensatiepunten van genoemde gasmengsels doen we het volgende:

Condensatie van de mengsels G16 en G13 beschouwenen als H₂O-CO₂-condensatie, bekend in lit. 27.

Condensatie van de mengsels G10 en G7 is bekend uit metingen op het laboratorium voor chemische technologie (bijgaande grafiek...).

We vinden dan:

	condensatie bij			
	P(atm)	T(°C)	P(atm)	T(°C)
G16	5	<70	22	<110
G13	22	<110	57	ca. 110
G10	57	155	99	170
G7	99	173	144	180

Het blijkt dat de temperaturen van de gasstromen G7, G10, G13 en G16 steeds zo hoog zijn, dat geen condensatie optreedt.

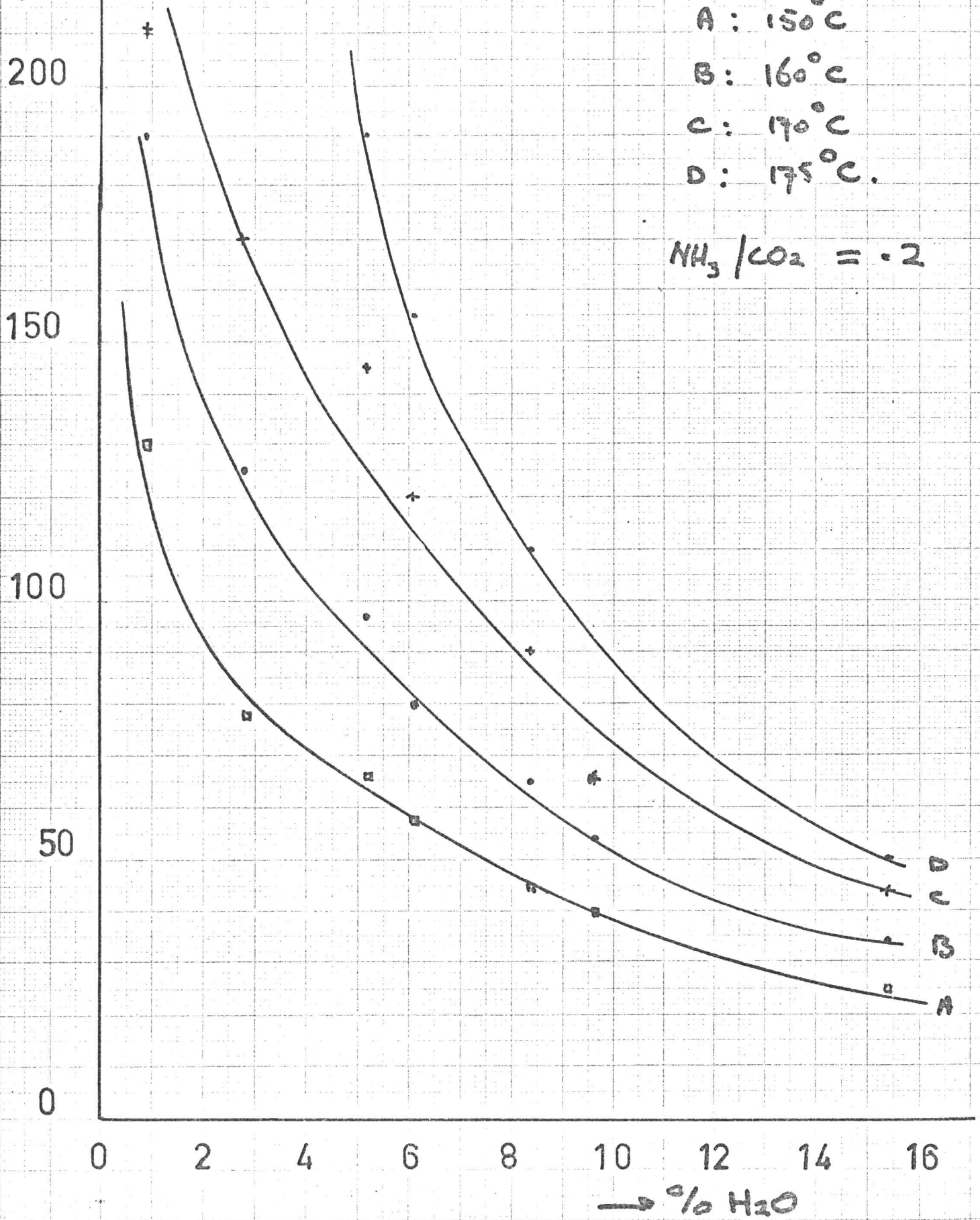
CONDENSATIEDRUK VAN NH_3 - CO_2 - H_2O -mengsels
 ALS FONCTIE VAN HET WATERPERCENTAGE
 LOPENDE PARAMETER: DE TEMPERATUUR.

P (atm.)
 ↑

-100-

- A : 150°C
- B : 160°C
- C : 170°C
- D : 175°C.

$\text{NH}_3 / \text{CO}_2 = 2$



Lijst van symbolen

A	oppervlakte	m^2
D	diameter	m
F	doorsnede	m^2
H	enthalpie	kcal/kmol
	hoogte	m
K	evenwichtsconstante	
L	lengte	m
	NH_3/CO_2 -verhouding	
P	druk	atm.
	partiaaldruk	atm.
Q	toe- of af te voeren warmte	J/s
Q_{mol}	molenstroom	kmol/s
R	gasconstante	J/kg °C
S	entropie	J/kg °C
	omtrek	m
T	temperatuur	°C, K
V	volume	m^3
W	H_2O/CO_2 -verhouding	
X	conversie in %	
f)		
x)	molfracties	
y)		
z		
c_v	soortelijke warmte bij constant volume	J/kg °C
c_p	soortelijke warmte bij constante druk	J/kg °C
d	diameter	m, mm
f	frictiefactor	
m	factor bepalend voor de diameter van een pijpenplaat	
m	filmdikte	mm

n	aantal trappen	
p	druk	atm, kg/cm ²
t	temperatuur	°C
	wanddikte	mm
	tijd	s
v	snelheid	m/s
dp/dl	drukval	N/m ³
st	steek	mm

α	warmteoverdrachtscoëfficiënt	W/m ² °C
K	verhouding c_p/c_v	
ρ	dichtheid	kg/m ³
η	rendement	
	viscositeit	Ns/m ²
τ	verblijftijd	s
	toelaatbare spanning	kg/cm ²
ϕ_m	massastroom	kg/s
ϕ_v	volumestroom	m ³ /s
ϕ_{mol}	molenstroom	mol/s

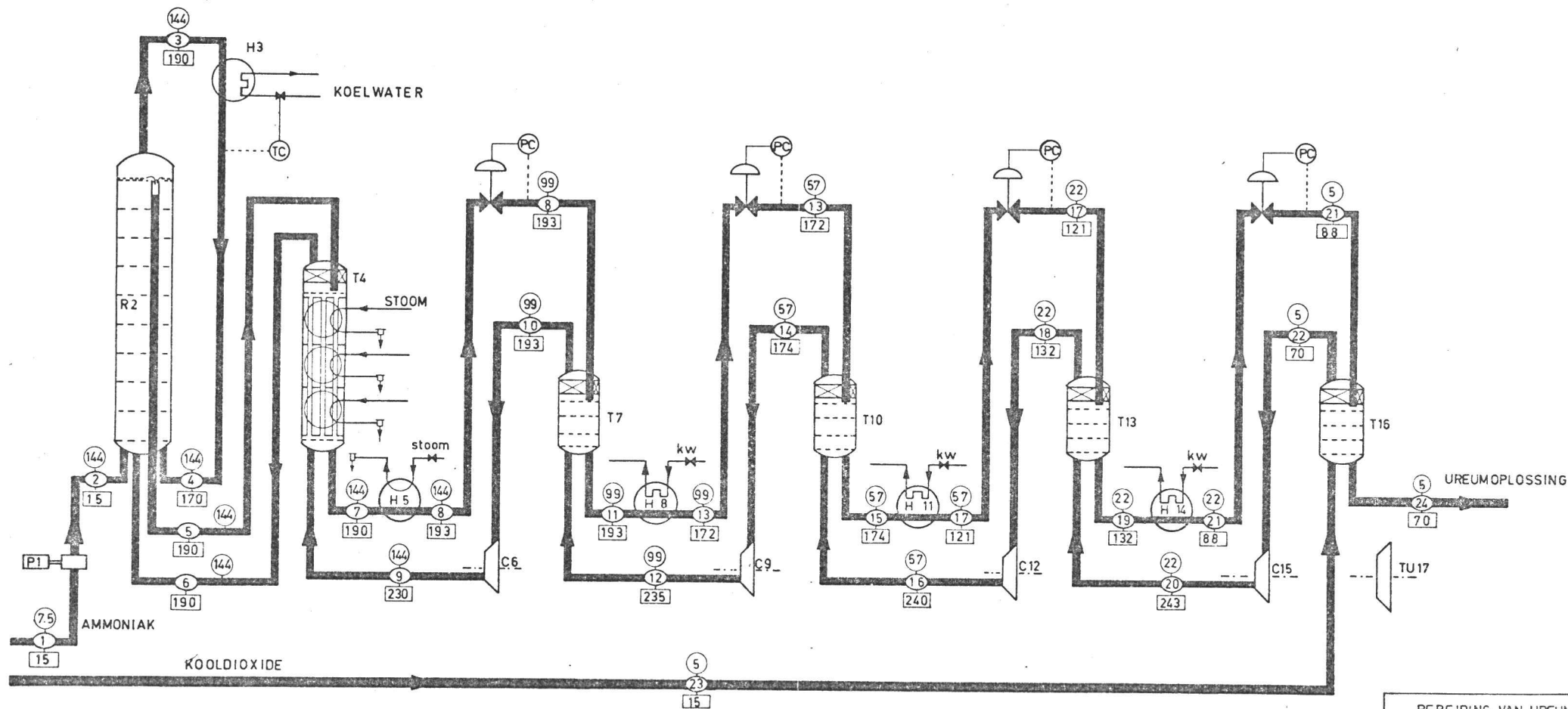
indices:

G,g	van de gasfase
L,l	van de vloeistoffase
S,s	van de vaste fase
i	inwendig
u	uitwendig
n	netto
k	koeloppervlak
pol	polytroop
pp	pijpenplaat

Literatuurlijst

1. J.D. Logemann, Proc. of Seminar. on Fertilizer Prod. and Techn. Fert. Ass. of India, New Delhi, Dez. 14-16 (1969)
2. I. Mavrovic, Encyclopedia of Chemical Technology, 2nd ed., 21 (1970) 37
3. European Chemical News 20 (1971) 501
4. P.J.C. Kaasenbrood, Symposium Bruxelles, 5th session, September 11th (1968) 1-8
5. R. Powell, Urea Process Technology (1968)55
6. J.Goedegebuur,Th.Walthie, Ureumfabricage volgens het Wagoeprocess, TH-verslag (1970)
7. L.H. Cook U.S. Patent 3.301.897, January 31 (1967)
8. A.V.Slack e.a., Chem.Technol. January (1971) 32
9. V.I.Kucheryavyi e.a.,The Soviet Chemical Industry 11 (1969) 44, vertaald uit het Russisch
10. V.I.Kucheryavyi e.a.,Khim, prom. 45 (1969) 354/7 (vertaald door DSM)
11. S. Wicar, Brit. Chem. Eng. 8 (1963) 817
12. E. Otsuka, Kogyo Kagaku Zasshi 63 (1960) 494-502 vertaald uit het Japans
13. A.R.Schoondorp vierdejaarsverslag bij ir.S.M.Lemkowitz (1970)
14. P. Davies in F.Din, Thermodynamic Functions of Gases, Properties of Ammonia 1 (1956) 89
15. D.M.Newitt c.s. in F.Din Thermodynamic Functions of Gases, Properties of Carbondioxide 1 (1956) 123

16. G.D.Effremova, Khim. Prom. 10 (1962) 742
17. V.D.I.-Wasserdampftabellen 7. Auflage
1968
18. O.Hougen and K.Watson, Chemical Process Principles, 2nd ed.,
2 (1964) XXVI
19. J.Jones and G.Hawkins, Engineering Thermodynamics (1960) 399
20. V.D.I.-Wärmeatlas, Deutschen Ingenieur-
verlag GmbH Düsseldorf (1954) Pa 7
21. P.M. Lombaers, Collegedictaat Chemische Werktuigen
(1965) 61
22. J. Perry, Chemical Engineers' Handbook 4th ed.
(1963)
23. M. Fréjacques, Chim. Ind. Paris 60 (1948) 28
24. W.J. Beek, Fysische Transportverschijnselen 1 (1968)
25. E.P. Egan c.s. J. Chem. Eng. Data. 11 2 (1966) 192/4
26. C. Hoogendijk, Afstudeerverslag TH Delft, september 1970
27. S. Takenouchi, American Journal of Science 262 (1964)
p. 1055-1074.
28. L. H. Cook, Symp. Brussel, Gr. Vl. Sc. 15-690 (1967)



P 1 AMMONIAKPOMP
 R 2 REACTOR
 H 3 CONDENSOR

T 4 STRIPPER
 H 5 WARMTEWISSELAAR
 C 6 COMPRESSOR

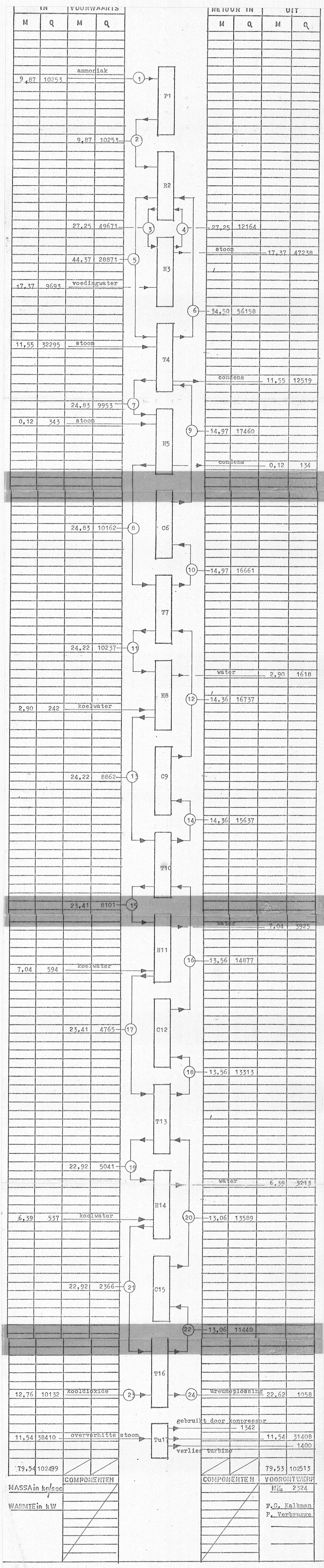
T 7 CARBAMAATONTLEDER
 H 8 WARMTEWISSELAAR
 C 9 COMPRESSOR

T 10 CARBAMAATONTLEDER
 H 11 WARMTEWISSELAAR
 C 12 COMPRESSOR

T 13 CARBAMAATONTLEDER
 H 14 WARMTEWISSELAAR
 C 15 COMPRESSOR

T 16 CARBAMAATONTLEDER
 TU 17 TURBINE

BEREIDING VAN UREUM
 GEOMB. STRIP- EN H.G.R.-PROCES
 F.G. KALKMAN
 P. VERBRUGGE
 JANUARI '72 nr. 2324



IN		VOORWAARTS	
M	Q	M	Q
			ammorfiak
9,87	10253		
		9,87	10253
		27,25	49671
		44,37	28871
17,37	9693		voedingwater
			stoom
11,55	32295		
		24,83	9953
0,12	343		stoom
		24,83	10162
		24,22	10237
2,90	242		koelwater
		24,22	8862
		23,41	8101
7,04	594		koelwater
		23,41	4765
		22,92	5041
6,39	537		koelwater
		22,92	2366
12,76	10132		kooldioxide
11,54	38410		oververhitte stoom
79,54	102499		

RETOUR IN		UIT	
M	Q	M	Q
		27,25	12164
			stoom
		17,37	47238
		34,50	56158
		11,55	12519
		14,97	17460
		0,12	134
		14,97	16661
		2,90	1618
		14,36	16737
		14,36	15637
		7,04	3925
		13,56	14877
		13,56	13313
		6,39	3213
		13,06	13589
		13,06	11440
		22,62	1058
		11,54	31408
			1400
		79,53	102513

MASSA in kg/sec
 WARMTE in kW
 COMPONENTEN

COMPONENTEN
 VOORONTWERF
 N^o 2324
 F.G. Kalkman
 P. Verbrugge

APPARAATSTROOM	13		14		15		16		17		18	
↓ COMPONENTEN	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q
NH3	0,58	?	0,80	2098	0,20	?	0,29	?	0,20	?	0,29	736
CO2			13,06	12126			12,89	?			12,89	11545
H2O	5,68	?	0,50	1413	5,55	?	0,38	?	5,55	?	0,38	1032
Amm. Carb.	0,62	?			0,31	?			0,31	?		
Ureum	17,34	?			17,34	?			17,34	?		
Totaal	24,22	8862	14,36	15637	23,41	8101	13,56	14877	23,41	4765	13,56	13313
→ apparaatstroom	19	19	20	20	21			22	23	23	24	24
↓ componenten												
NH3	0,07	?	0,07	?	0,07	?	0,07	163			0,02	?
CO2			12,80	?			12,80	10805	12,76	10132		
H2O	5,35	?	0,18	?	5,35	?	0,18	472			5,18	?
Amm. Carb.	0,16	?			0,16	?					0,08	?
Ureum	17,34	?			17,34	?					17,34	?
TOTAAL	22,92	5041	13,05	13589	22,92	2366	13,05	11440	12,76	10132	22,62	1058

M in kg/s Q in kW

APPARAATSTROOM	1		2.		3.		4E		5		6	
↓ COMPONENTEN	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q
NH3	9,87	10253	9,87	10253	13,70	34038	4,56	10162	7,60	17961	12,92	32596
CO2					11,84	10885					19,67	18249
H2O					1,71	4748	1,71	1237	7,11	5777	1,91	5313
Amm. Carb.							20,98	765	12,32	?		
Ureum									17,34	?		
Totaal	9,87	10253	9,87	10253	27,25	49671	27,25	12164	44,37	28871	34,50	56158
→ apparaatstroom	7.	7	8	8.	9.	9	10	10	11	11	12	12
↓ componenten												
NH3	0,76	1810	0,76	?	1,19	3448	1,19	?	0,58	?	0,80	?
CO2					13,33	12708	13,33	?			13,06	?
H2O	5,63	4578	5,63	?	0,45	1304	0,45	?	5,68	?	0,50	?
Amm. Carb.	1,09	?	1,09	?					0,62	?		
Ureum	17,34	?	17,34	?					17,34	?		
TOTAAL	24,83	9953	24,83	10162	14,97	17460	14,97	16661	24,22	10237	14,36	16737

M in kg/s

Q in kW

