UniSim Design

- steady state modelling -

BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

Dr. Mizsey Péter, Dr. Benkő Tamás, Dr. Meszéna Zsolt

Átteknintés

- A metanol gyártó folyamat bemutatása.
- A folyamat modellezése – instruktor segítségével.

Metanol gyártás

- Egyszerűsített folyamat

$$3H_2 + CO_2 \underset{k_{-1}}{\overset{k_1}{\rightleftarrows}} CH_3OH + H_2O$$

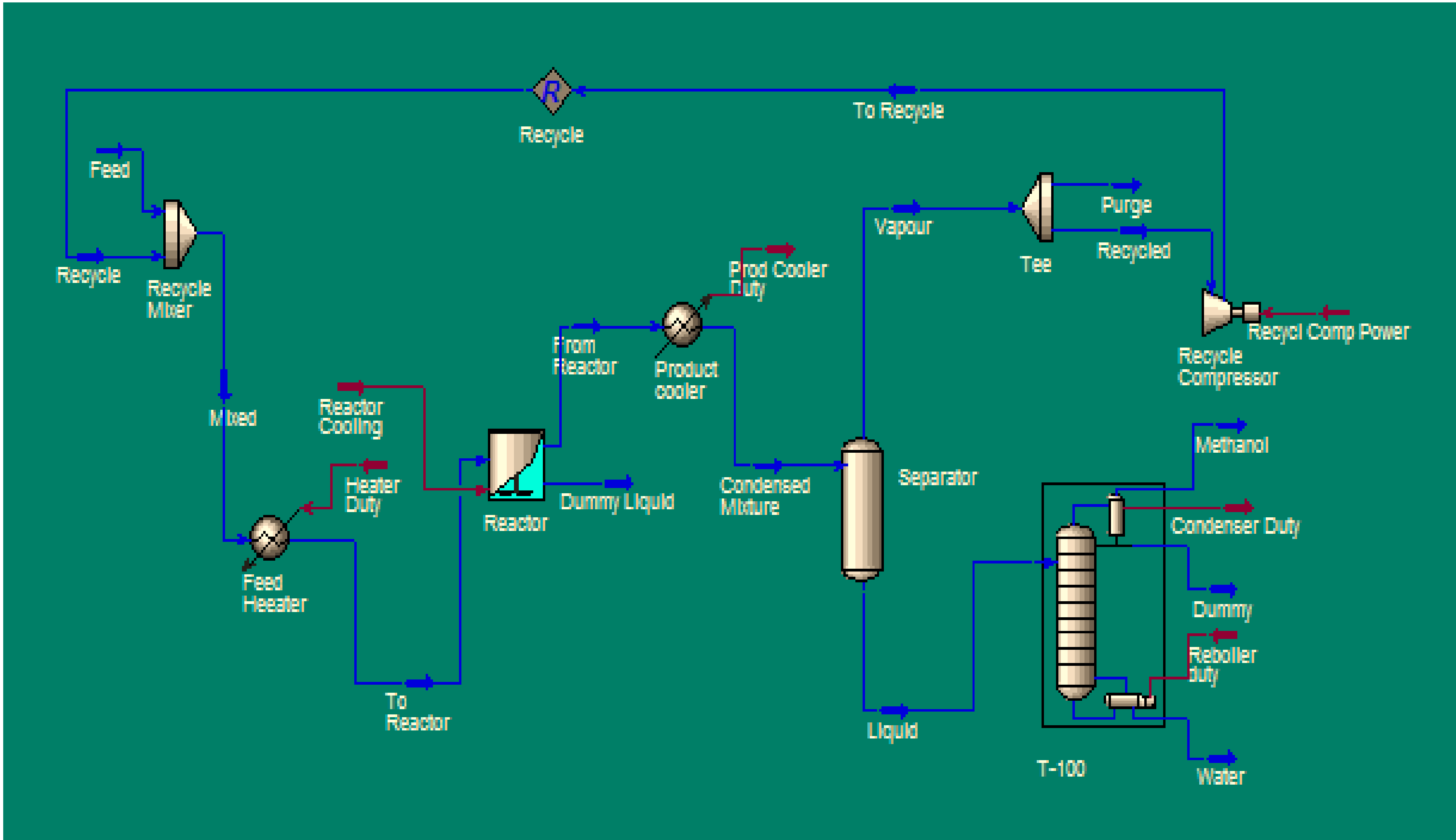
$$r_i = k_i \cdot c_1^a \cdot c_2^b$$

$$k_i = A \cdot \exp\left(-\frac{E}{RT}\right)$$

$$A = 1.04 \cdot 10^{22} \quad E = 1.7 \cdot 10^5 \, kJ/kmol$$

$$A' = 2.6 \cdot 10^{28} \quad E' = 2.2 \cdot 10^5 \, kJ/kmol$$

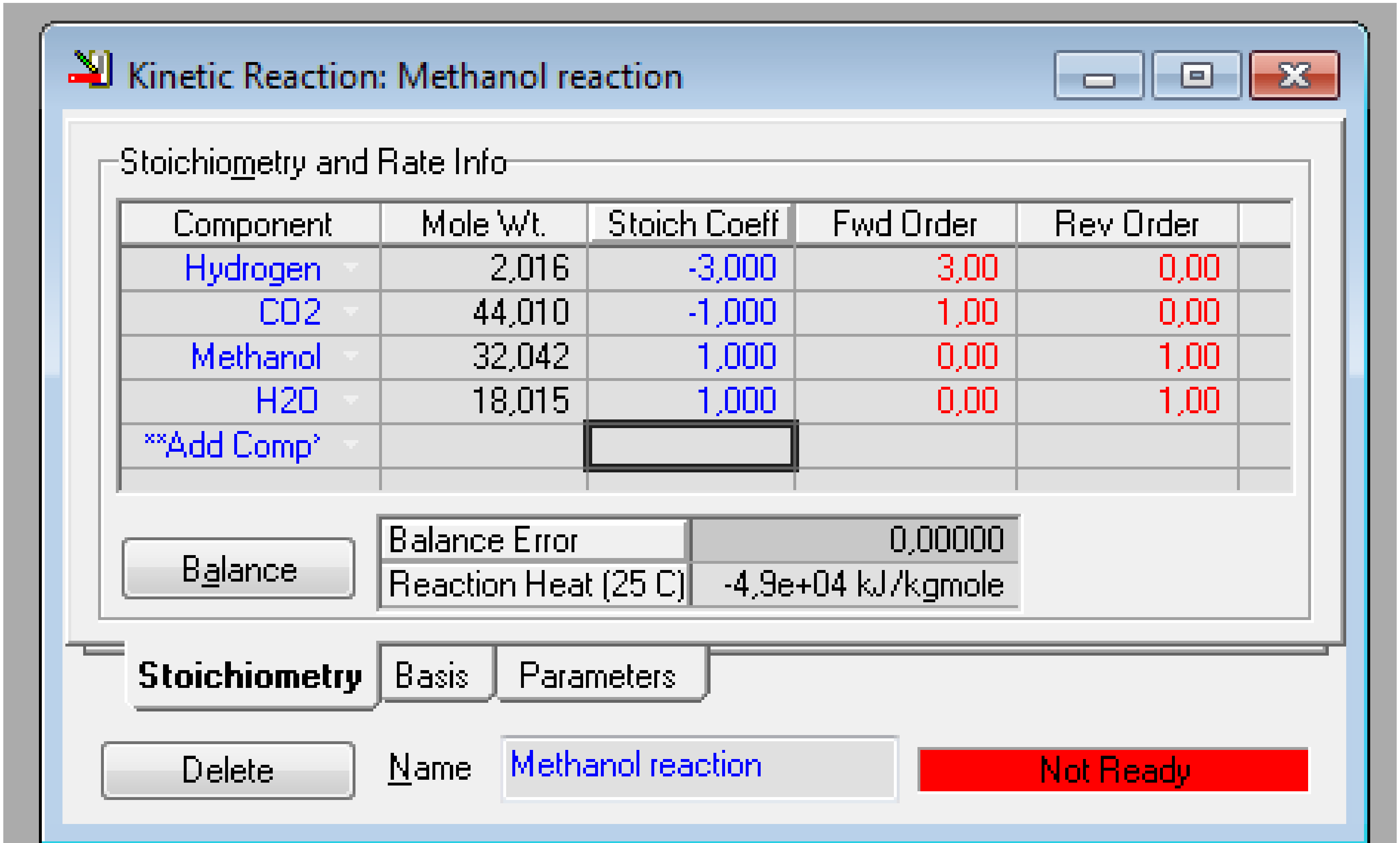
Folyamatábra



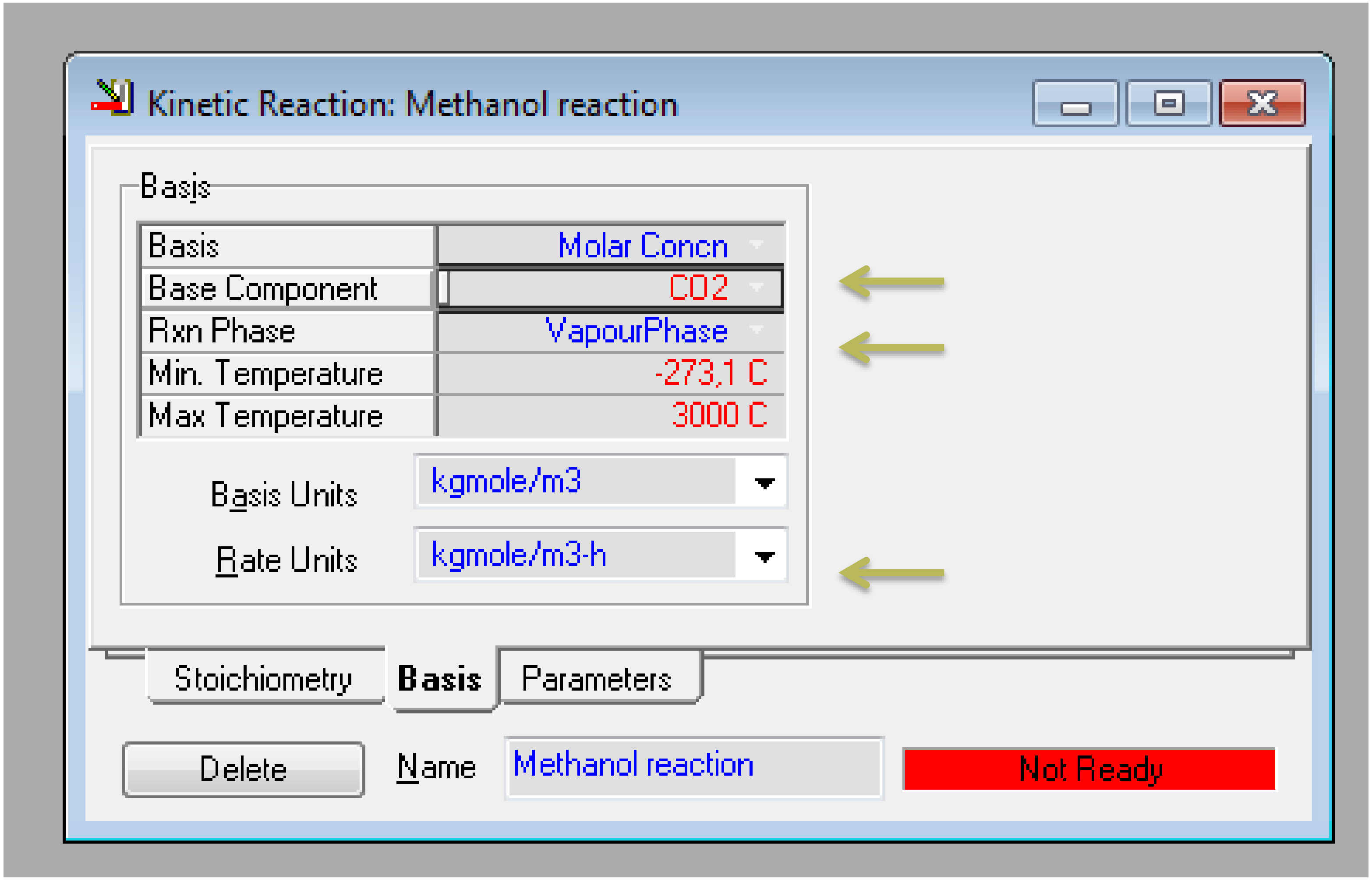
Units, Thermodynamics

- SI mértékegységrendszer
- Komponensek: MeOH, víz, CO2, H2
- Modell: UNIQUAC
- Reakció-kinetikai adatok bevitele
  - Simul. Basis manager: Reactions tab
  - Új reakció: Add Rxn (Kinetic)

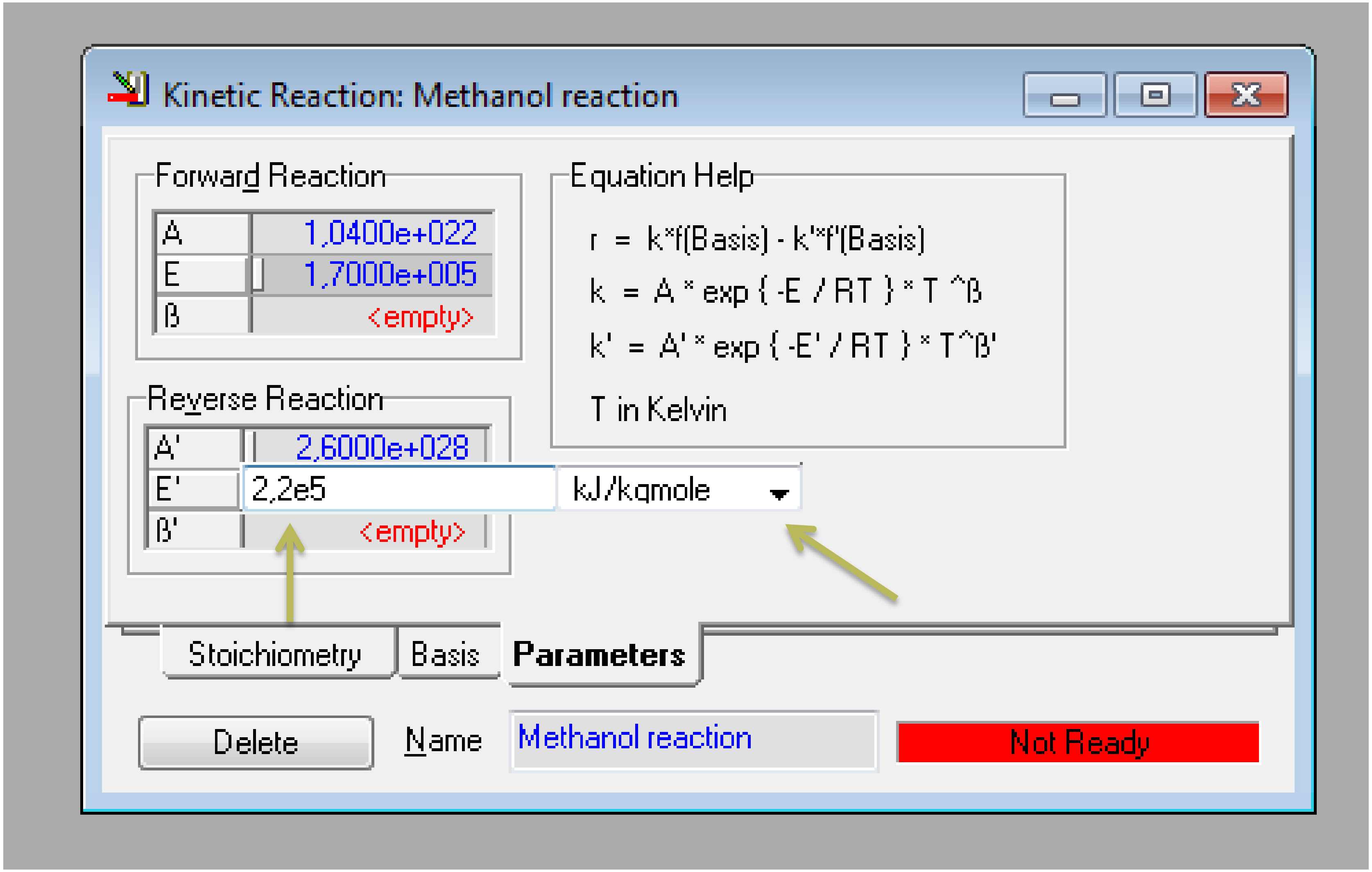
Reaction kinetics



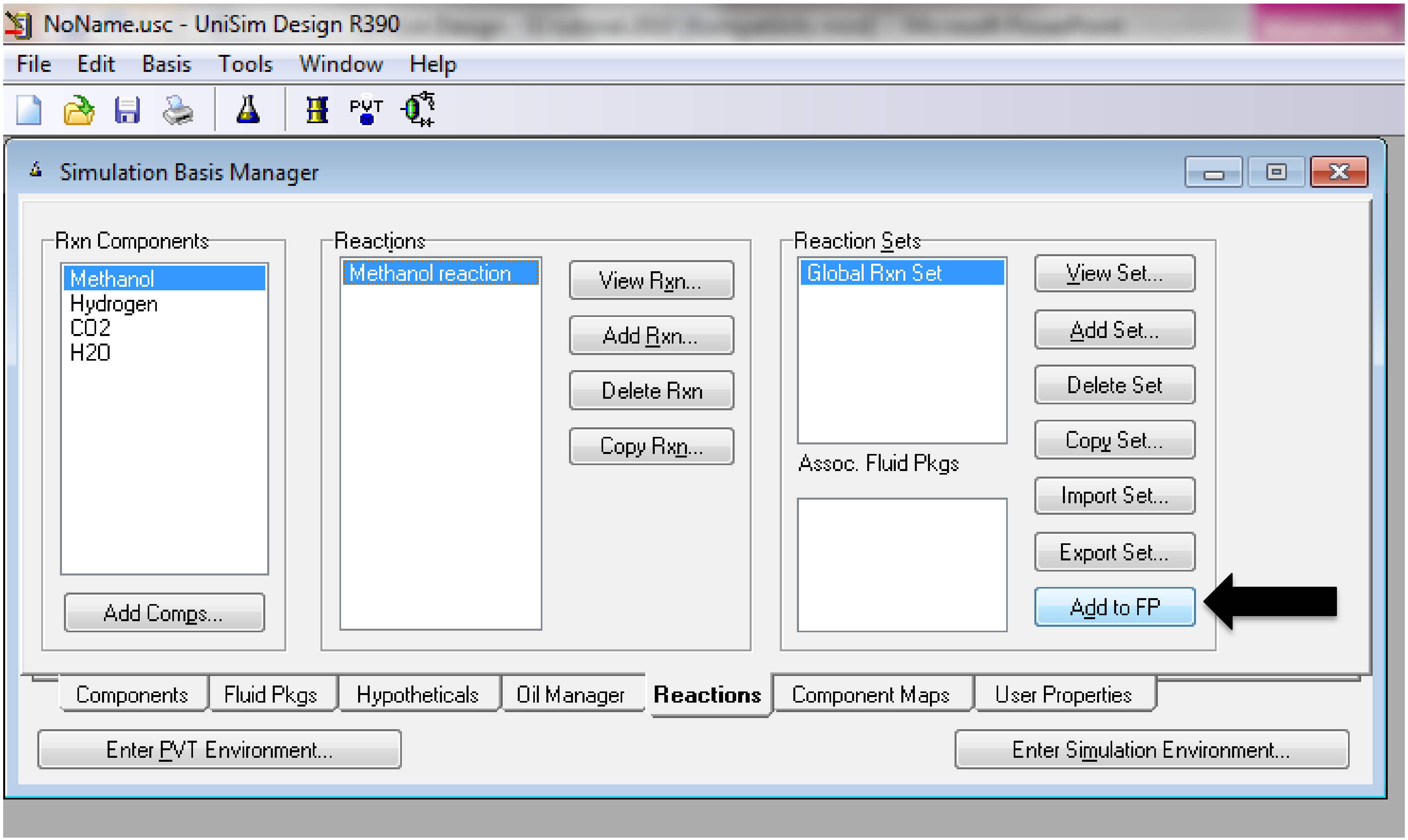
Reaction kinetics



Reaction kinetics



Reaction kinetics

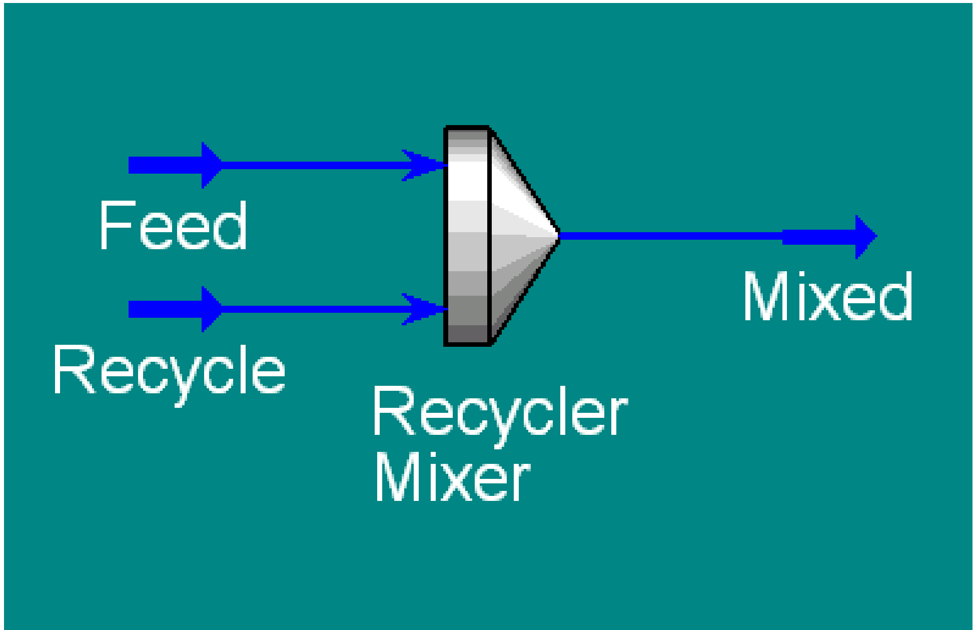


Feed

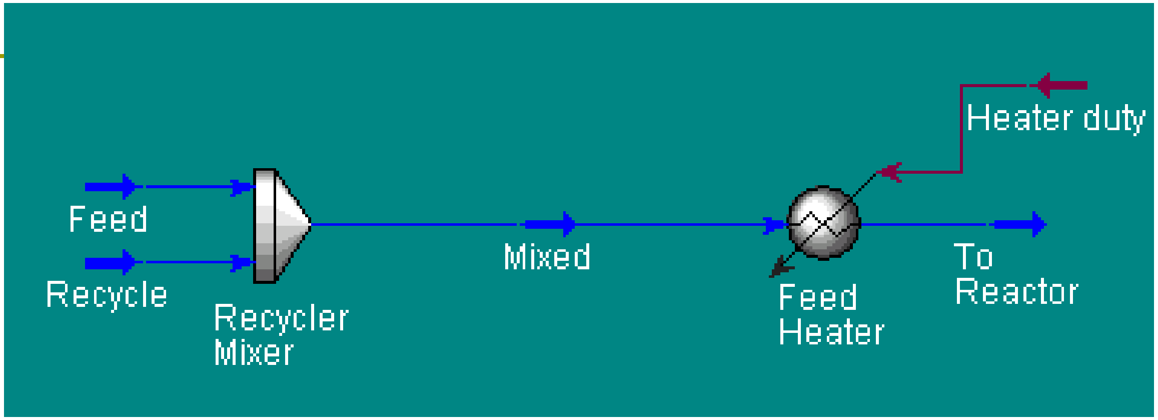
- Conditionss
  - Stream name: Feed
  - Temperature: 40°C
  - Pressure: 4000 kPa
  - Mass flow: 1000 kg/h
- Composition
  - CO_2 = 0.25 n/n
  - H_2 = 0.75

Recycle Mixer

- In: „Feed”, „Recycle”
- Out: „Mixed”
  - „Recycle”: T&p mint Feed, Molar flow: 200 kmol/h
  - CO2:0.1 n/n, H2:0.9 n/n



Feed Heater



- Name: „Feed Heater”
- Inlet: „Mixed”
- Energy: „Heater duty”
- Outlet: „To Reactor”
  - Parameters - Pressure drop: 50 kPa
  - Worksheet - Output temp.: 200 °C

Reactor

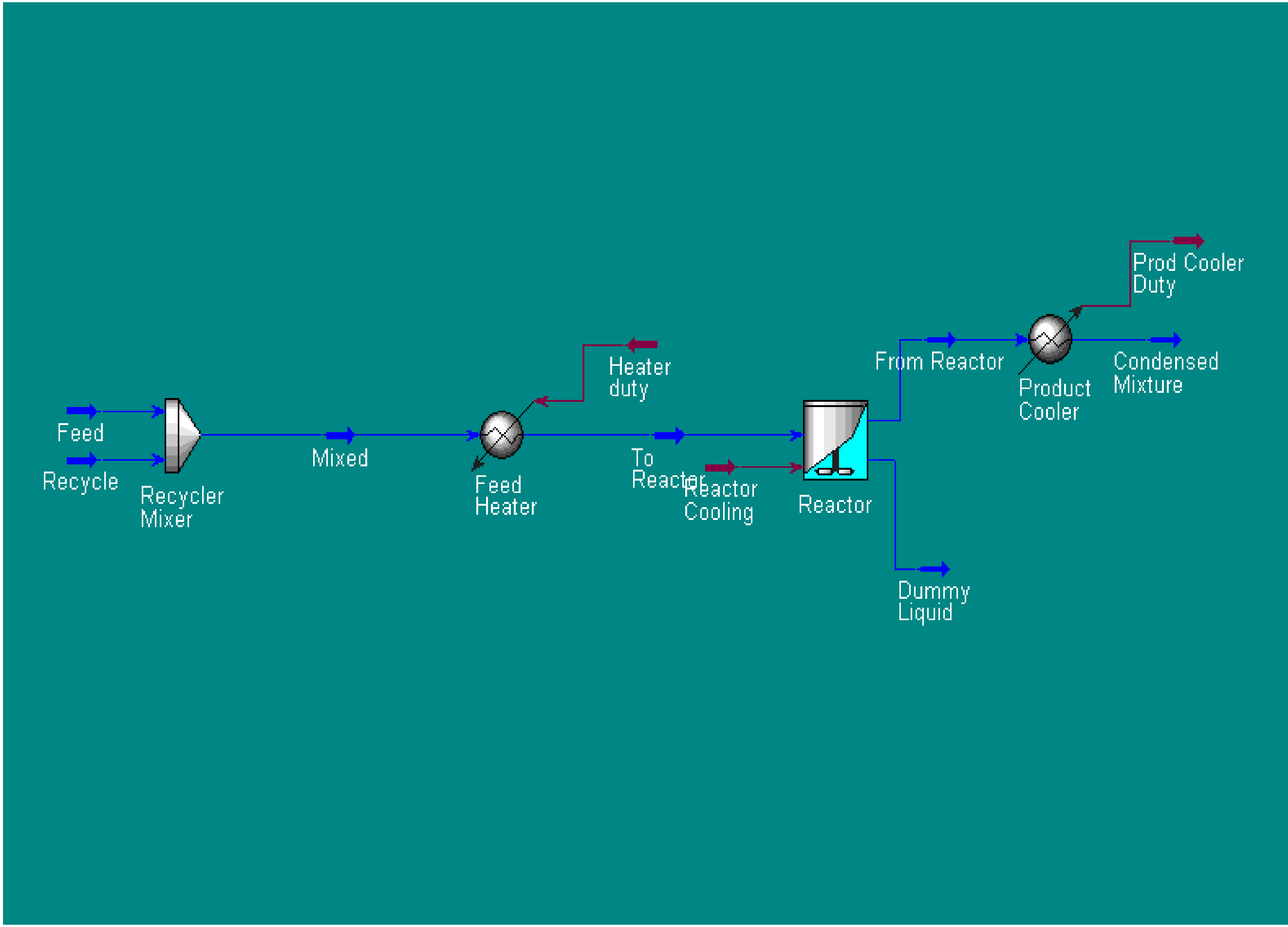
- CSTR modell
- Inlets: To Reactor
- Vapour Outlet: From Reactor
  - T= 200°C
- Liquid outlets: Dummy Liquid
- Energy: Reactor Cooling

- Nyomásesés: 100 kPa
- Geom. adatok:
  - átmérő: 10 m
  - magasság: 10 m
- Reakció kiválasztása

Product cooler

- Termékáram H_2 és CO_2 tartalmának recirkulációja = metanol leválasztása a gőzfázisból ← hűtés 40°C-ra

- In: From Reactor
- Out: Condensed Mixture
- Energy: Prod Cooler Duty
- Nyomásesés: 50 kPa

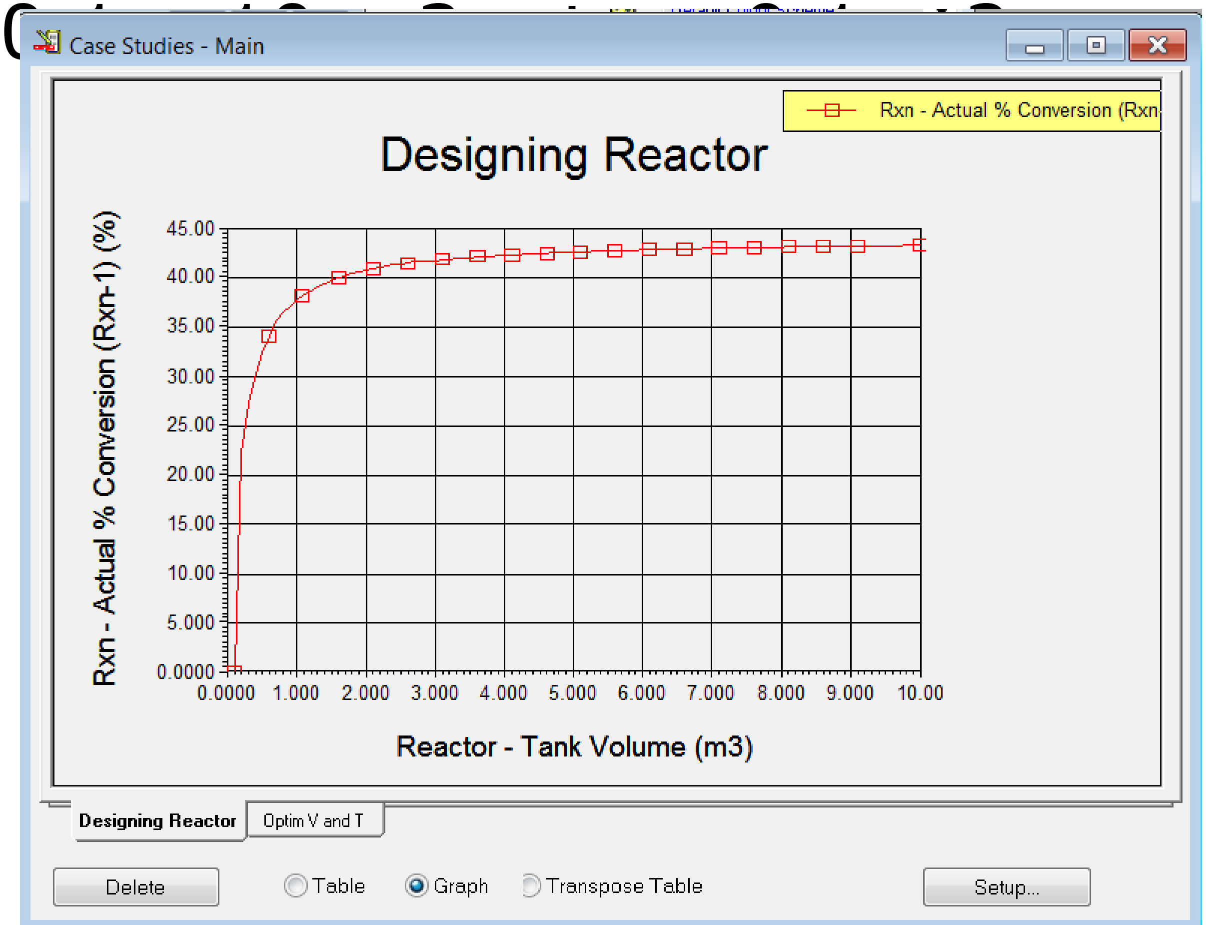

Prod Cooler
Duty
Heater
duty
From Reactor
Condensed
Mixture
Product
Cooler
Feed
Recycle
Recycler
Mixer
Mixed
Feed
Heater
To
Reactor
Reactor
Cooling
Reactor
Dummy
Liquid

Reaktorméretezés

- Korábban indokolatlanul nagy reaktort terveztünk. ($V = 10\ m^3$)
- Tool/Databook
- Insert variables:
  - Reactor/Tank Volume
  - Reactor/Rxn-Actual % conversion
- Case Studies – Add : „Designing reactor”
  - Ind: Tank Volume
  - Dep: Conversion

Reaktorméretezés

- View..
- Tank volume (
- Start.
- Results..
  - V=~3 m3

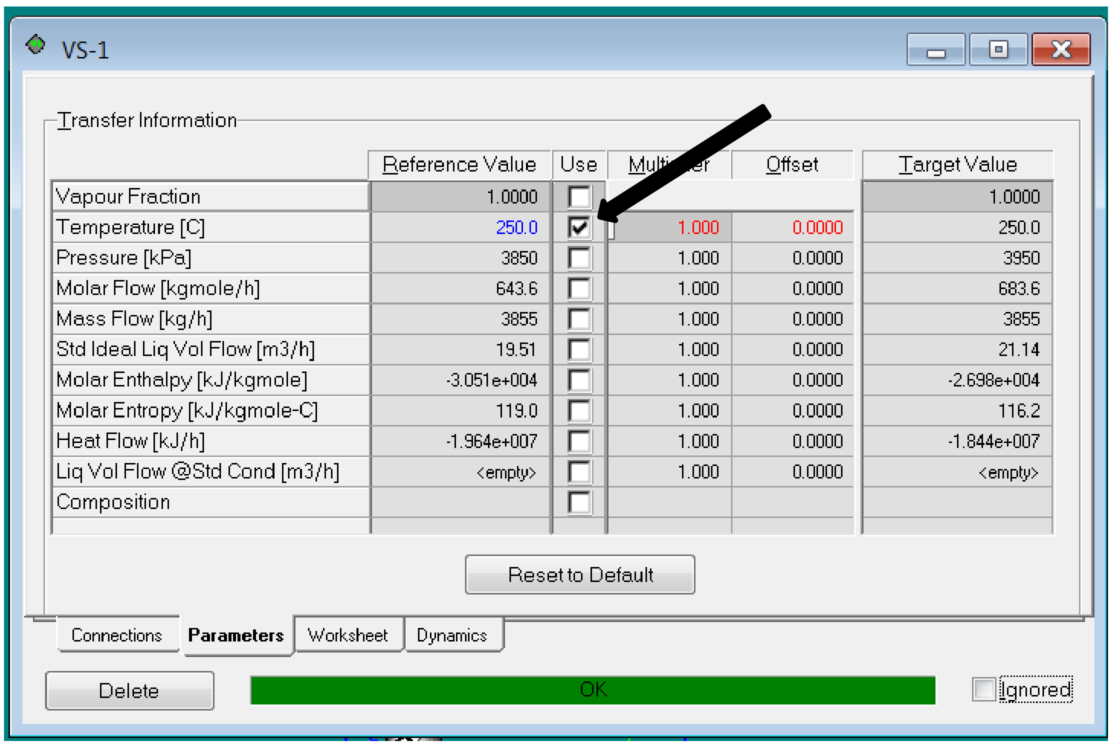


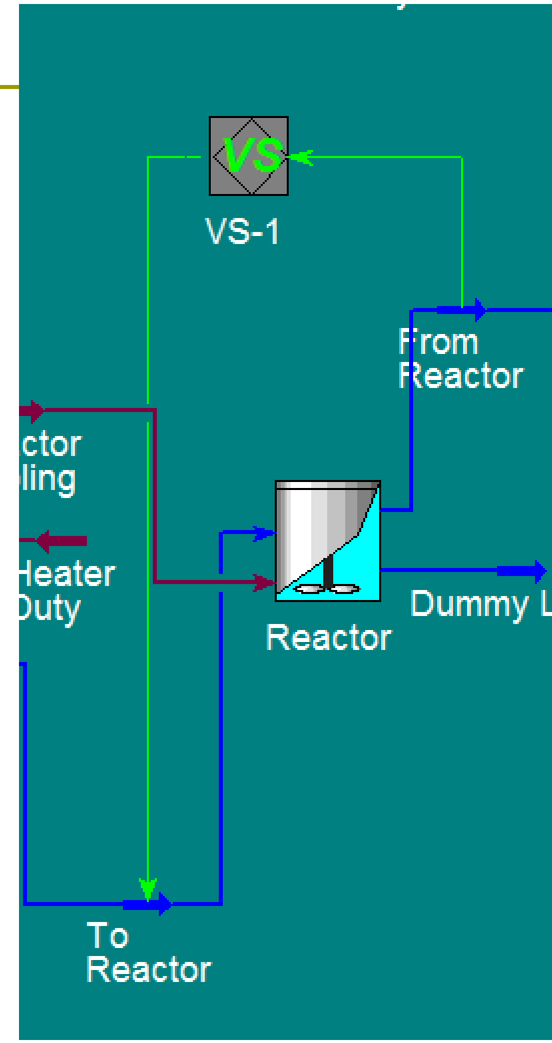
Optimális hőmérséklet + térfogat

- A kétváltozós optimum keresés problémás feladat
  - A lépések sorrendje nem mindegy (solver leállítása is szükséges)
- Első lépés: mentés! ☺
- A reaktor belépő és kilépő áramának összekapcsolása: *Virtual stream*

Virtual stream

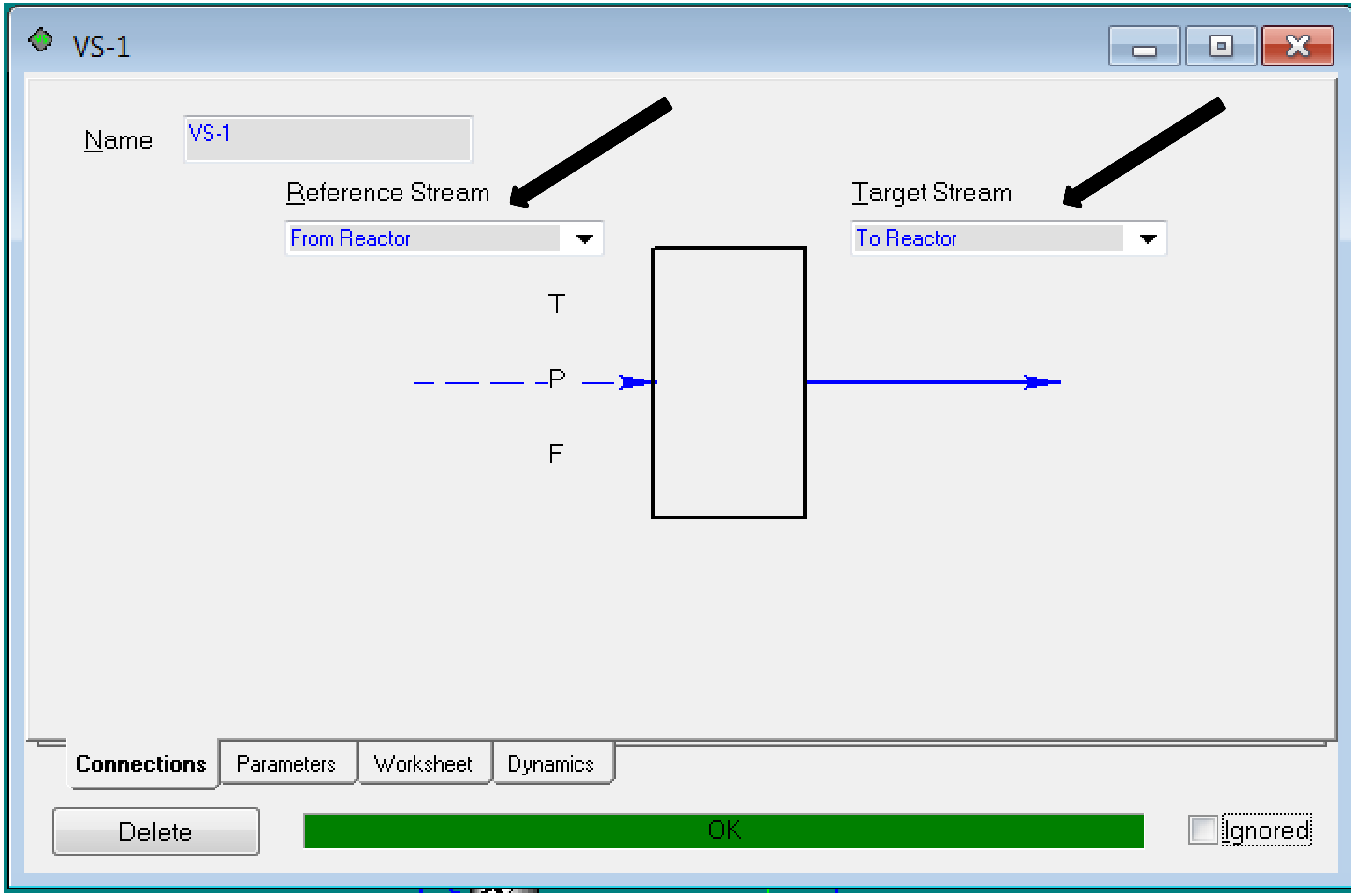
- Először: Parmeters tab!



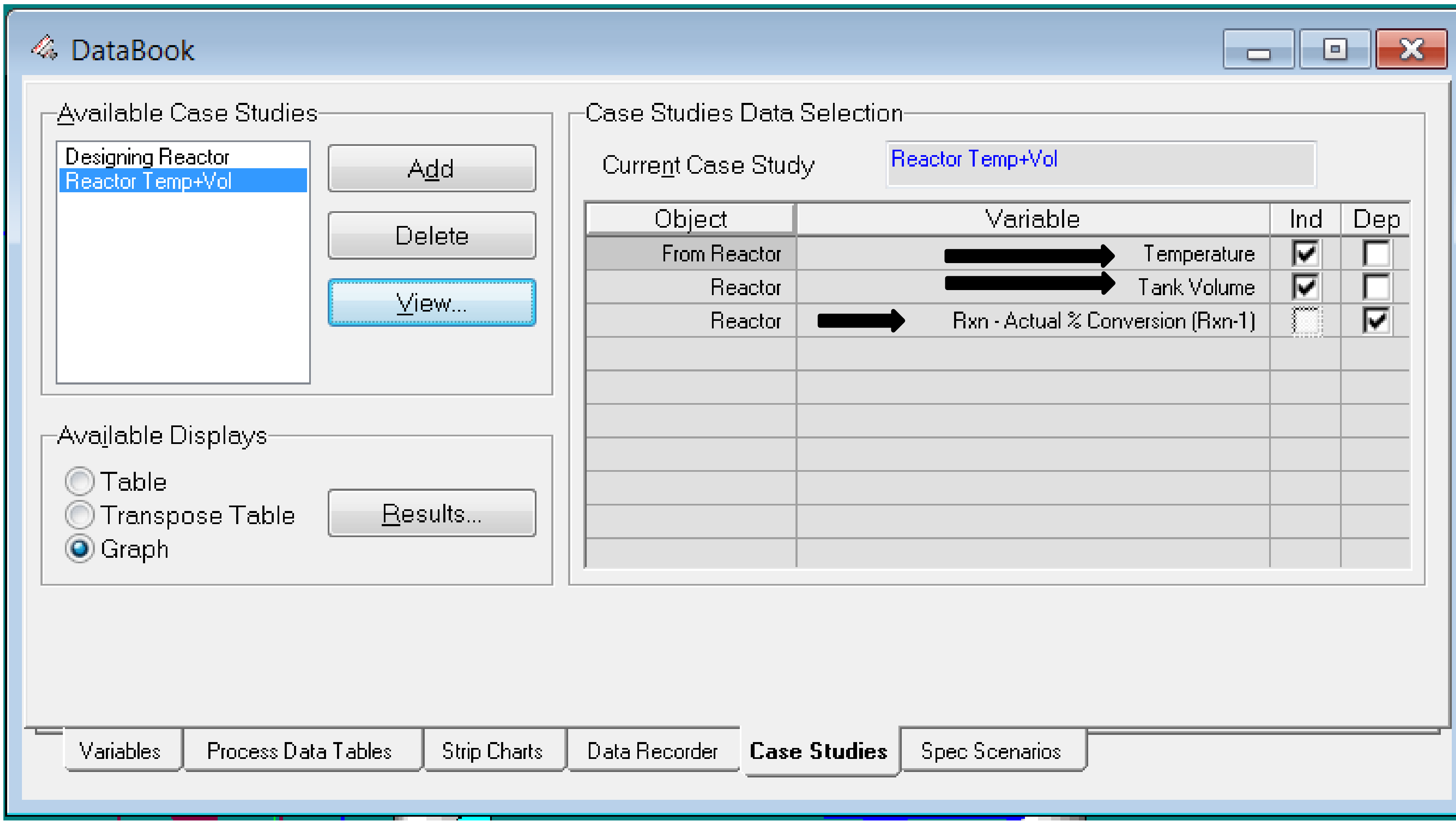


Virtual stream

- Második lépésben: áramok megjelölése

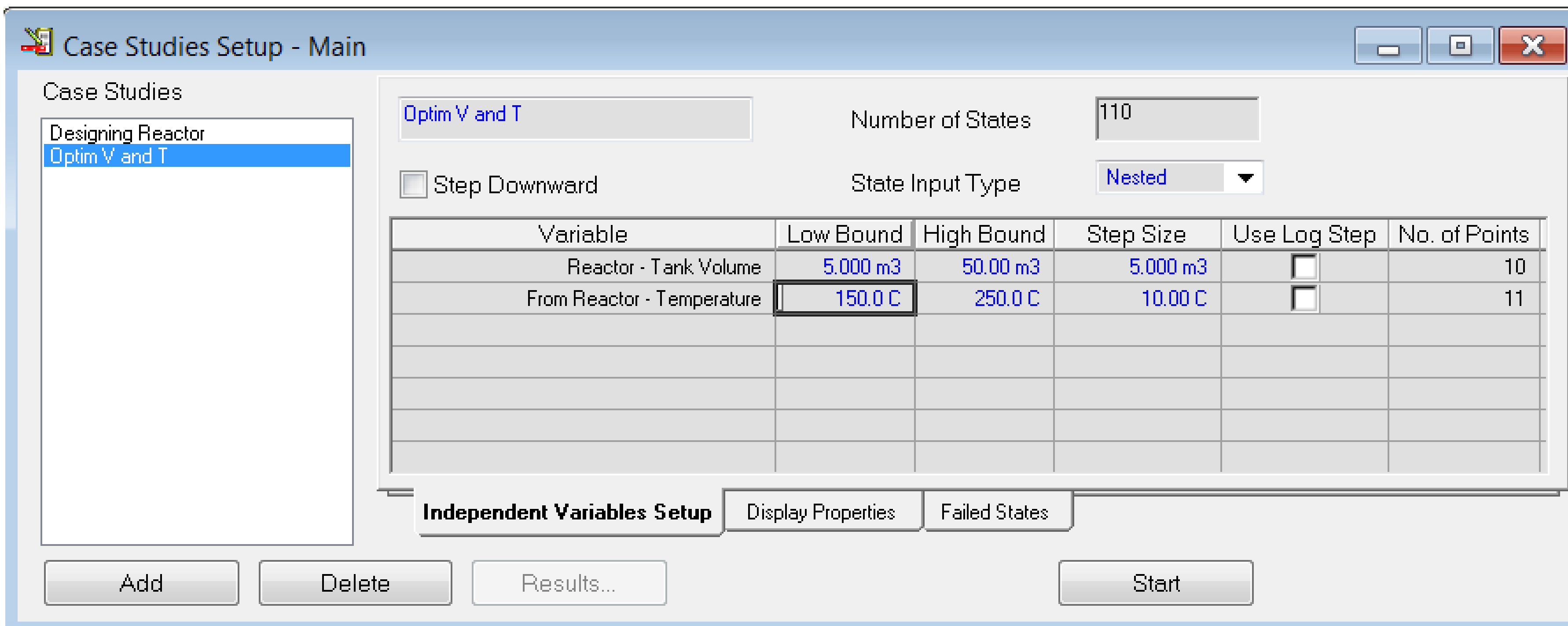


Case study 2

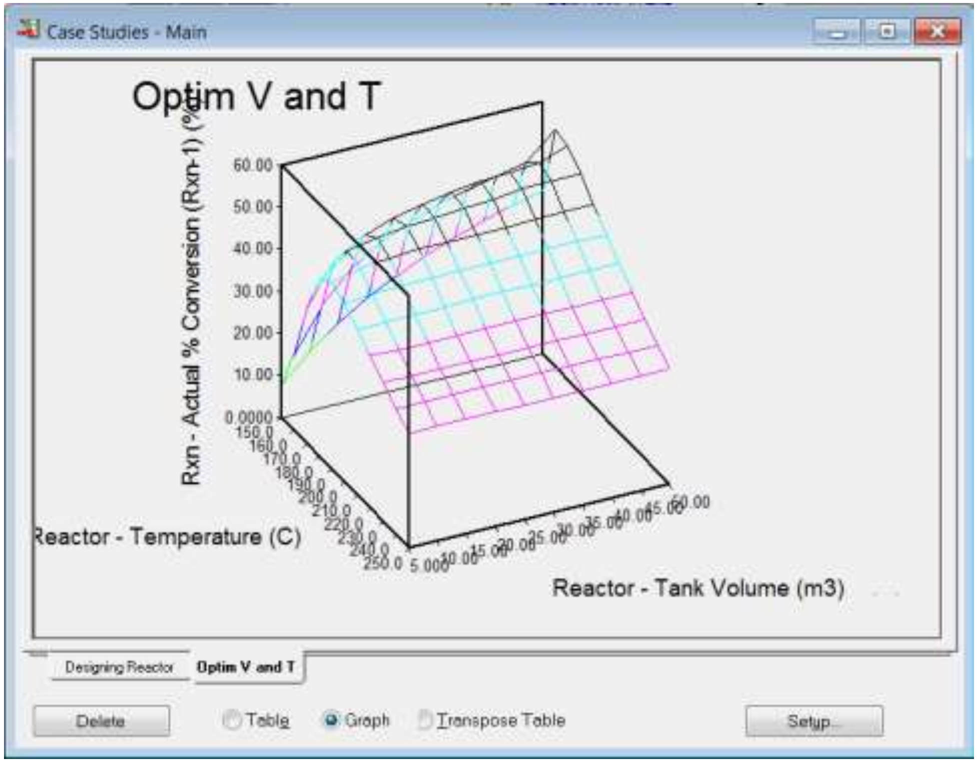

DataBook
Available Case Studies
Designing Reactor
Reactor Temp+Vol
Add
Delete
View...
Available Displays
Table
Transpose Table
Graph
Results...
Case Studies Data Selection
Current Case Study
Reactor Temp+Vol
Object
Variable
Ind
Dep
From Reactor
Temperature
Reactor
Tank Volume
Reactor
Rxn - Actual % Conversion (Rxn-1)
Variables
Process Data Tables
Strip Charts
Data Recorder
Case Studies
Spec Scenarios

Case study 2

- Hőmérséklet: 150 – 250°C, lépésköz: 10°C
- Térfogat: 5 – 50 m3, lépésköz 5 m3



Case study 2 - eredmények

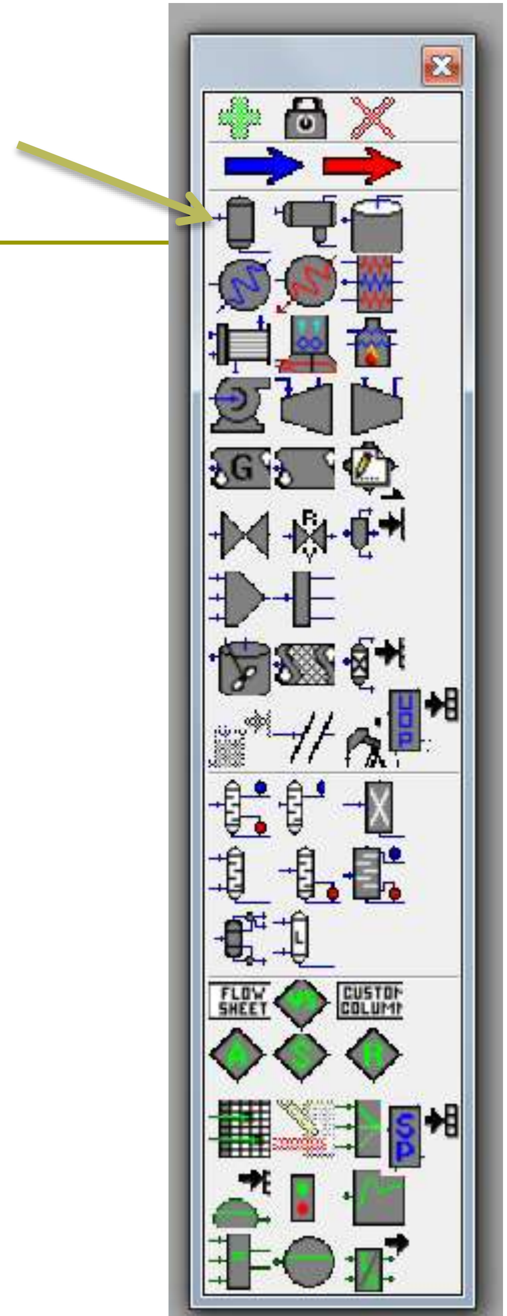


- Optimális hőmérséklet: ~190°C
- Optimális térfogat: ~5 m3

Separator

- A „condensed mixture” áram kétfázisú, a két fázist el kell választani: szeparátor

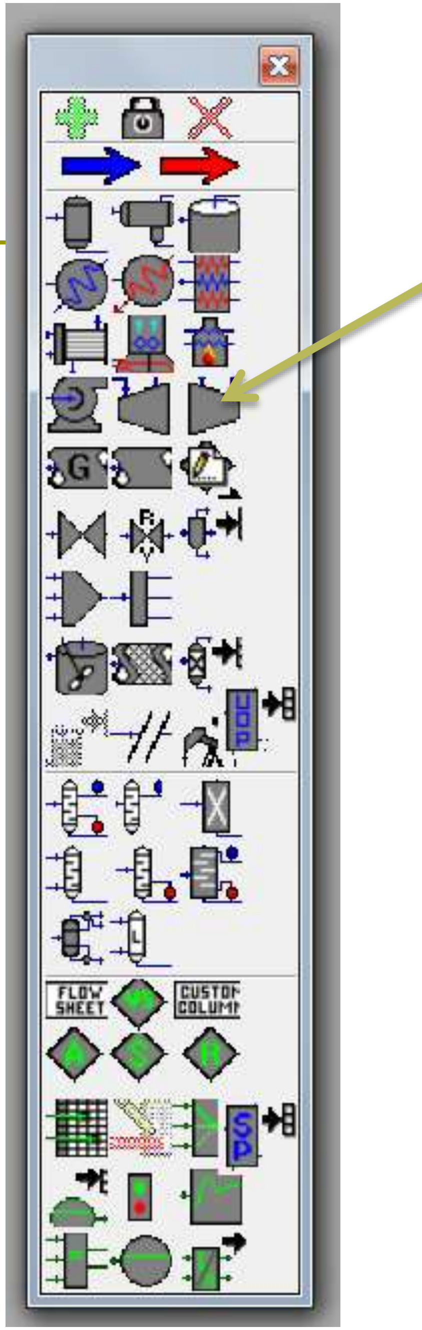
- In: Condensed Mixture
- Out: Vapour, Liquid



Recycle Compressor

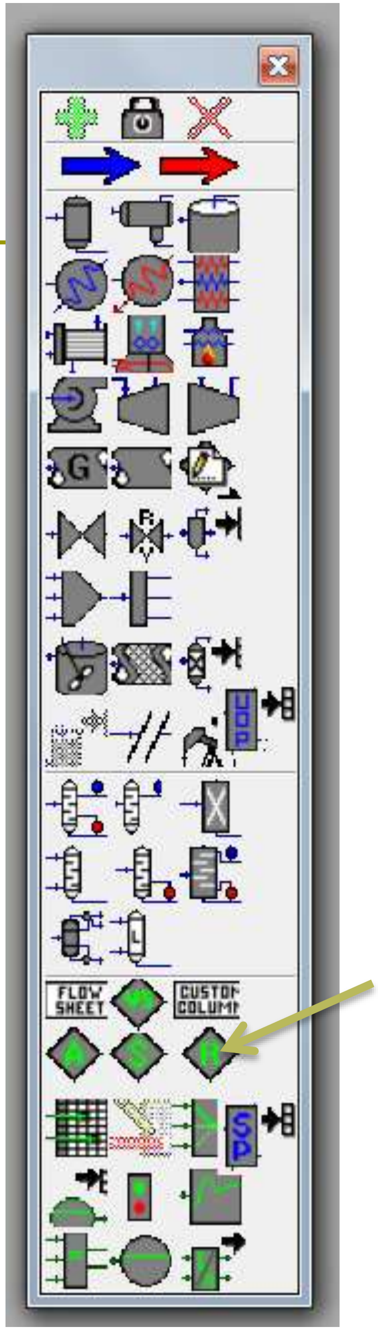
- A visszavezetendő áram nyomása alacsonyabb, mint a „Feed" áramé: komprimálás szükséges

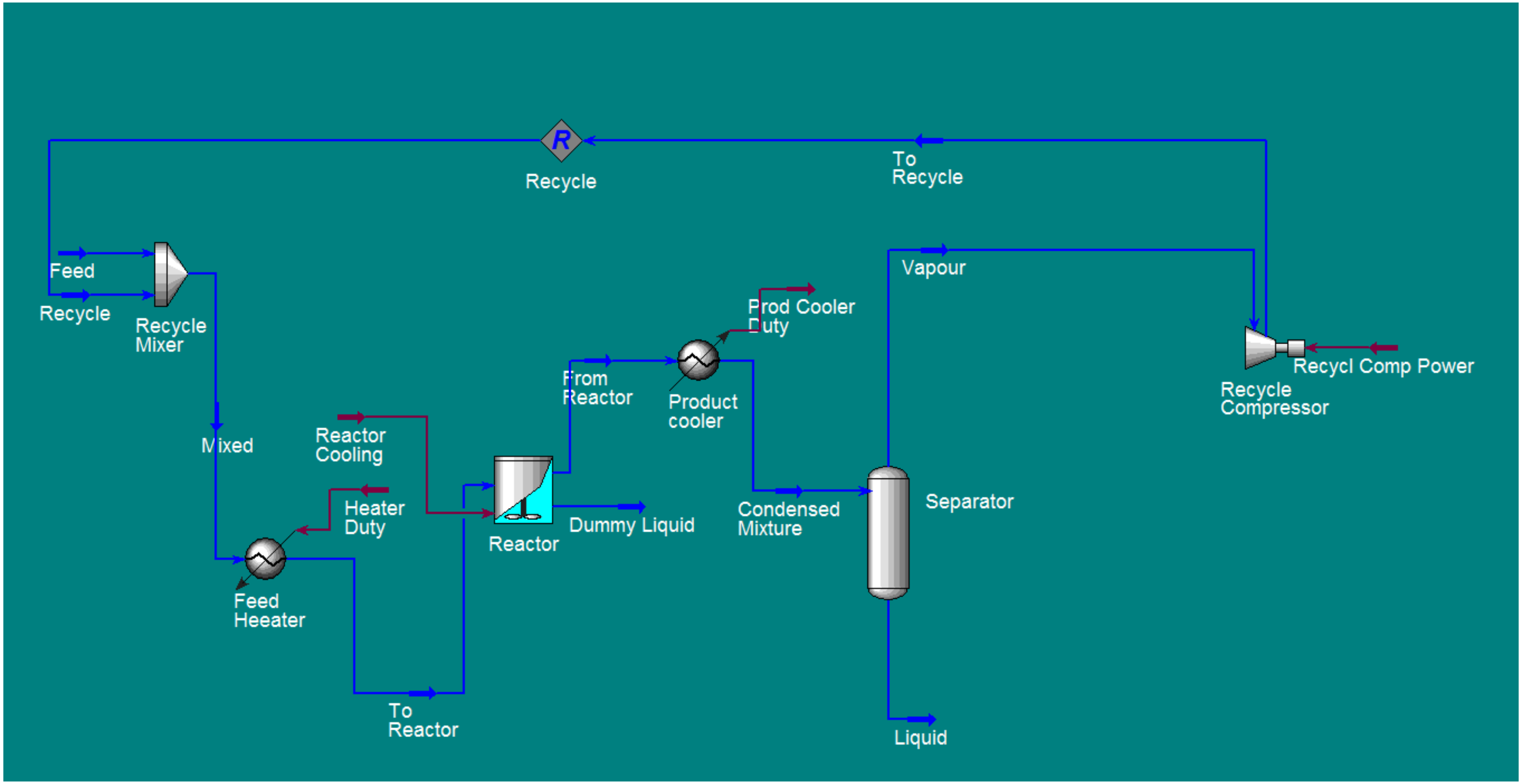
- In: Vapour
- Out: To Recycle (p=4000 kPa)
- Energy: Recycl Comp Power
- Adiabatic Efficiency: 75%



Recycle

- A recirkuláció bekötése – modellezés közben- gyakran okoz indstabilitást: mentés.
- In: To Recycle
- Out: Recycle




Recycle
To
Recycle
Feed
Recycle
Recycle
Mixer
Vapour
Prod Cooler
Duty
Recycl Comp Power
Recycle
Compressor
From
Reactor
Product
cooler
Mixed
Reactor
Cooling
Heater
Duty
Reactor
Dummy Liquid
Condensed
Mixture
Separator
Feed
Heeater
To
Reactor
Liquid

Főtermék tisztítása: desztilláció

- „Liquid" áram metanol mellet vizet is tartalmaz
- Tisztasági követelmények:
  - a kolonnába lépő MeOH 97% kerüljön a végtermékbe
  - a végtermék víztartalma max. 1 m/m%.

Főtermék tisztítása: desztilláció (2)

In:	Liquid
N:	10
Betáp. helye:	5
Kond. típusa:	parciális
Kond. Hőáram:	Condenser duty
Out:	Methanol, Dummy
Visszaforraló:	Reboiler duty
Out:	Water

Distillation – pressure profile

- Kondenzátor: 1000 kPa
- Visszaforraló: 1015 kPa

Distillation – specifications

- Vapour rate: 20 kmol/hr
- Liquid rate: 0 kmol/hr
- Reflux ratio: 3

Distillation – specifications

- Állítsuk be a terméktisztasági követelményeket:
  - Column Component Recovery, Methanol@COL1, Spec value 0.97, Methanol
  - Column Component Fraction, Methanol@COL1, Mass fraction, Spec value: 1e-2, H2O
  - Inaktiváljuk a következő specifikációkat:
    - Ovhd Vap Rate
    - Reflux Ratio
  - Run.

Distillation

- Tekintsük át az eredményeket.
  - Milyen töménységű a metanol áram?
  - Mi a halmazállapota?
  - Mennyi metanol megy el a fenékben?
    - kg/h-ban
    - a belépő metanolhoz képest (D/F arány)
- Hogyan lehetne töményebb metanolt kinyerni ebből az oszlopból?

- Köszönöm a figyelmet