

Folyamattan gyakorlat

Alapok

2017/18. 1. félév

BME-KKFT

Készítette: Stelén Gábor

Alapadatok

- Elérhetőségeim:
 - F II. épület alagsor, MD labor, 2035-ös mellék
 - stelen.gabor@mail.bme.hu
- Célkitűzés: Megismerkedni a folyamatszimulátorok alapjaival, majd konkrétan a ChemCad folyamatszimulátorral egyszerűbb rendszerek steady-state modellezésén keresztül
- Számonkérés:
 - Félév végén (11.28.-án); kiadott feladatsor önálló megoldása
 - Az elért eredmény 20%-ot számít a tantárgy végső jegyében.
- Tantárgy honlapja: http://kkft.bme.hu/folyamattan_msc

Mire jók a folyamatszimulátorok?

- Egyedi készülékek és egyszerűbb rendszerek modellezése
 - Üzemi problémák megoldása
 - Új javaslatok vizsgálata – „mi lenne ha” vizsgálatok
 - Milyen hatása van egy adott módosításnak
 - Készülékek működésének vizsgálata (pl. hőcserélők, reaktorok, desztilláló oszlopok)
- Bonyolultabb rendszerek modellezése
 - Teljes üzemi modellek
 - Hőintegráció
 - Dinamikus modellek
 - OTS (Operator Training Simulator)
- Ipari folyamatok számítása – akár több ezer egyenletből álló egyenletrendszer megoldása szükséges rövid idő alatt; erre való a folyamatszimulátor
- **Nem helyettesítheti a mérnököt!**

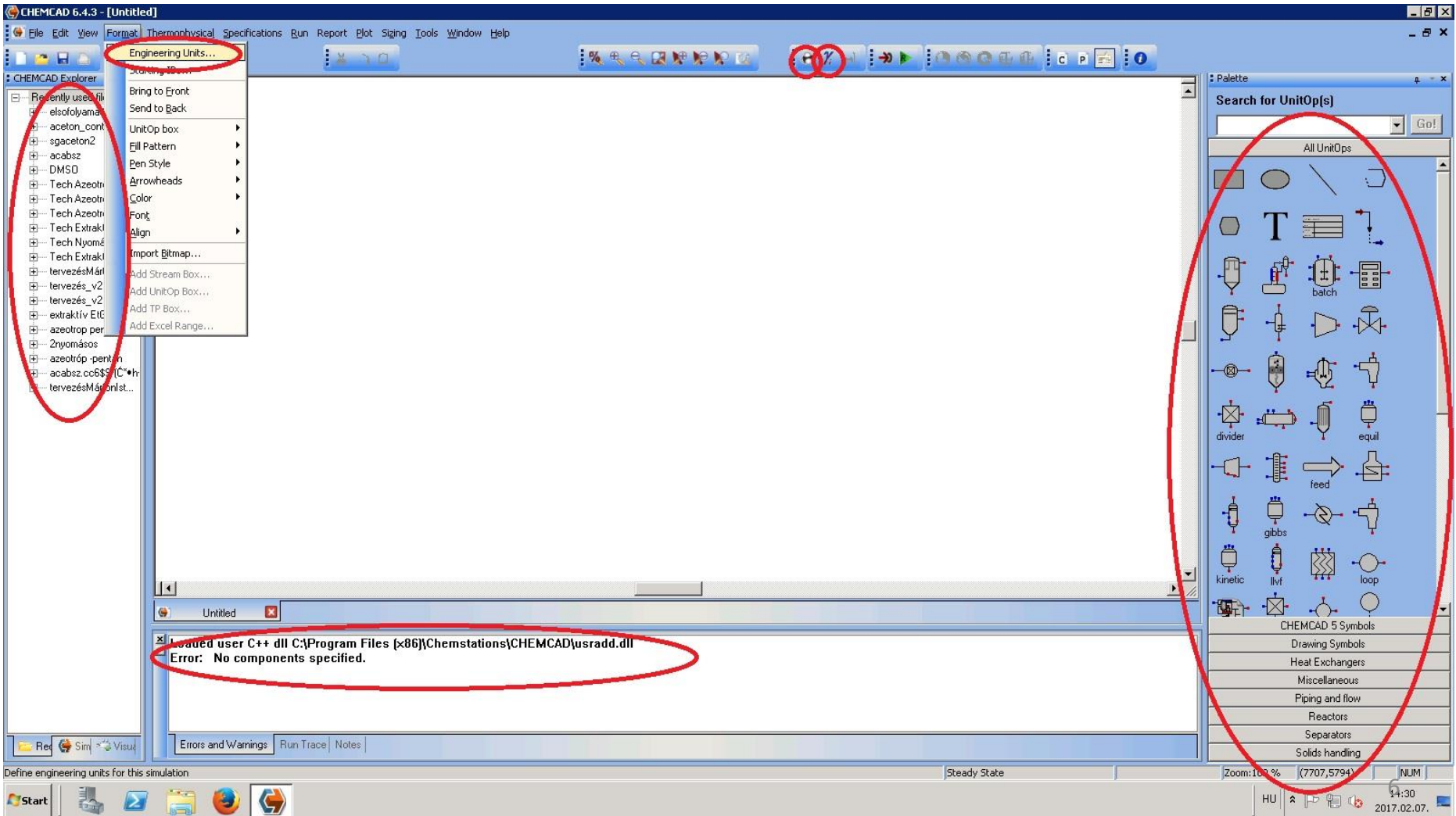
A szimulációk alapjai

- Steady-state (időben állandó)
 - Anyag- és energiamérlegek
 - Különböző esetek vizsgálata
 - Szűk keresztmetszetek vizsgálata
 - Nem mérhető paraméterek meghatározása
- Dinamikus (időben változó)
 - Szabályozó rendszerek modellezése
 - Paraméterek időbeli változásának vizsgálata
- Szimulációs lépések
 - Mértékegységrendszer kiválasztása (angolszász, SI, egyéni)
 - Komponensek kiválasztása
 - **TERMODINAMIKAI MODELL KIVÁLASZTÁSA**
 - Szimulációs modell felépítése (fokozatosan célszerű haladni)

Az első feladat

- Modellezzük propán gáz elégetésének folyamatát!
- $\text{C}_3\text{H}_8 + 5 \text{O}_2 = 3 \text{CO}_2 + 4 \text{H}_2\text{O}$
- Stream 1: levegő, 79% nitrogén, 21% oxigén, 100 °C, 20 bar, 1000 kmol/h.
- Stream 2: tüzelőanyag, 95% propán, 5% nitrogén, 100 °C, 20 bar, 25 kmol/h
- Az összekevert anyagáramokat 100 °C hőmérsékleten és 20 bar nyomáson kell a reaktorba vezetni. A szénhidrogén konverziója 90%. A reaktor adiabatikus módon működik. Milyen hőmérsékletű lesz a termék? Mekkora a számított reakcióhő?

A ChemCAD kezelőfelülete



Mértékegységrendszer kiválasztása

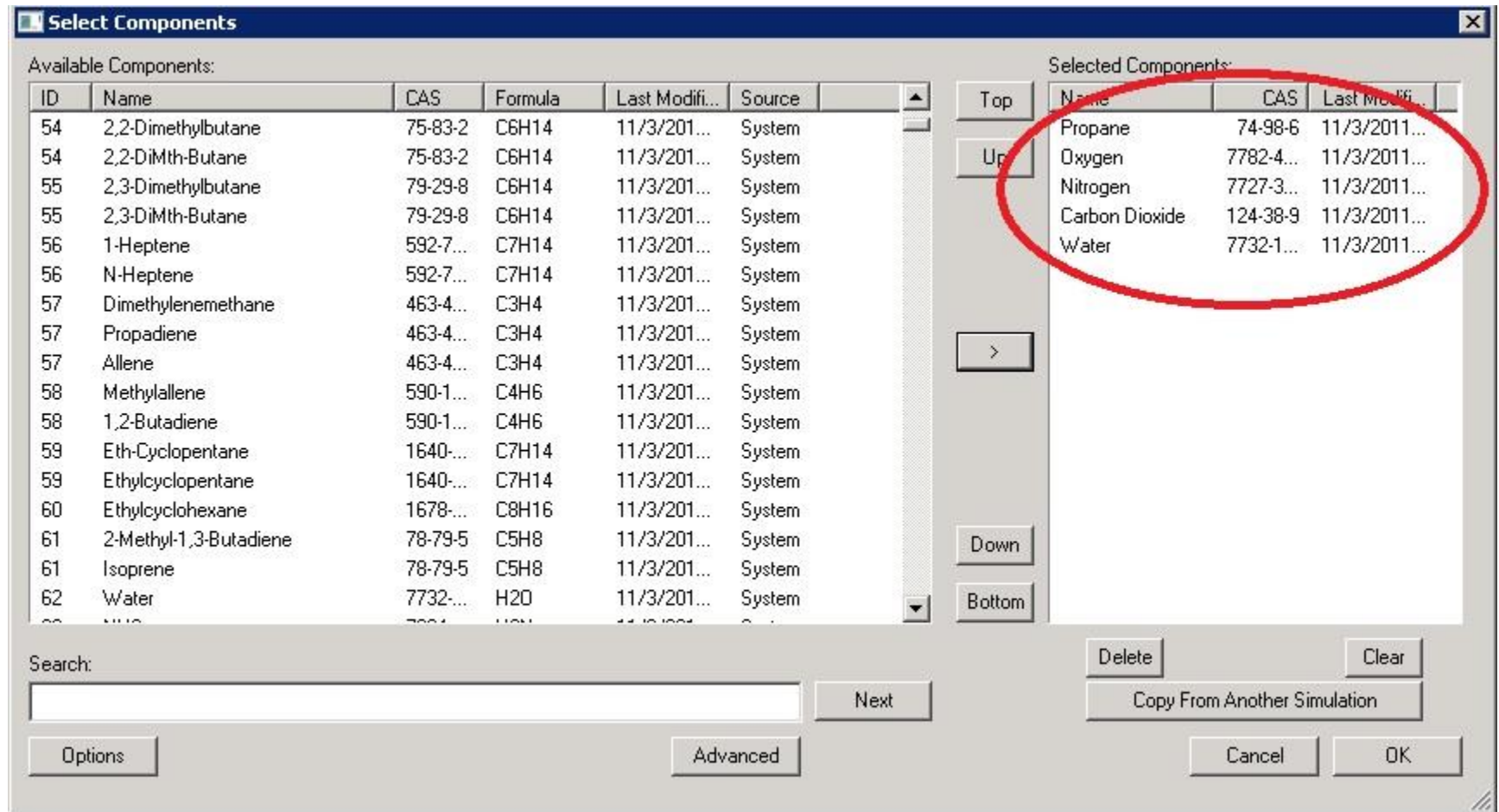
- Engineering Unit Selection -

Units selection Options and references

Time	h	Liq. Density / Conc.	kg/m3	Viscosity	N-s/m2
Mass/Mole	kg	Vapor Density	kg/m3	Surf. Tension	N/m
Temperature	C	Thickness	m	Solubility Par.	(J/m3)**0.5
Pressure	bar	Diameter	m	Dipole Moment	C.m
Enthalpy	MJ	Length	m	Cake Resistance	m/kg
Work	MJ	Velocity	m/sec	Packing DP	mm water/m
Liquid Volume	m3	Area	m2	Currency	\$
Liquid Vol. Rate	m3/h	Heat Capacity	kJ/kg-K	Currency factor	1
Crude Flow Rate	m3/h	Specific Heat	kJ/kg		
Vapor Volume	m3	Heat Trans. Coeff.	W/m2-K	ALT SI	Save Profile
Vapor Vol. Rate	m3/h	Therm. Conduct.	W/m-K		Load Profile

English **Common SI** Formal SI Metric LoadDefault SaveDefault Cancel OK

Komponensek kiválasztása



Termodinamikai modellek

- Ideális eset – ha lenne egy olyan egyenlet, amely leírná az összes komponens és elegy fázisegyensúlyi viszonyait minden körülmények között
- Valóság – „részleges” modellek, melyek adott komponensekre és elegyekre érvényesek
- Az optimális modell kiválasztása a vegyészmérnök feladata!
- Ebben a folyamatszimulátorok segítséget nyújtanak
- Főbb modelltípusok: állapotegyenletek, aktivitási koefficiens modellek, gőznyomás modellek, elektrolit modellek

Termodinamikai modellek

- Főbb típusok – állapotegyenletek
 - Ideális gáz – Raoult és Henry törvények
 - Van der Waals – reális gázokra
 - Redlich-Kwong (RK) – szénhidrogének modellezésére; kritikus nyomás közelében és folyadékok esetén nem használható
 - **Soave-Redlich-Kwong (SRK)** – az RK modell hiányosságait kiküszöböli
 - Benedict-Webb-Rubin (BWR) – alkalmas szénhidrogének gőz-és folyadékfázisainak, valamint könnyű szénhidrogének, szén-dioxid és víz keverékének számítására
 - Lee-Kesler-Plocker (LKP) – a BWR egyenlet továbbfejlesztése (több anyagra alkalmazható)
 - Chao-Seader (CS) – könnyű szénhidrogénekből és hidrogénből álló rendszerek számítására (max 530 K-ig)
 - Grayson-Stread (GS) – a CS kibővített változata, hidrogénben gazdag keverékek, valamint nagy nyomású és hőmérsékletű rendszerek számítására (200 bar és 4700 K)
 - **Peng-Robinson (PR)** – a SRK egyenleten alapul, kiküszöböli a SRK instabilitását a kritikus pont közelében
 - Brown K10 (B K10) – alacsony nyomású rendszerek esetén alkalmazható

Termodinamikai modellek

- Főbb típusok – aktivitási koefficiens modellek
 - Margules – empirikus sorfejtés
 - Van Laar – a van der Waals állapotegyenletből származtatható; durva közelítés
 - Wilson – erősen nem ideális rendszerekre; nem alkalmazható folyadék-folyadék megoszlás számítására
 - Non-random two liquid (NRTL) – erősen nem ideális rendszerekre; kiküszöböli a Wilson-modell hiányosságait; alkalmas folyadék-folyadék megoszlás számítására
 - Universal quasi-chemical (UNIQUAC): erősen nem ideális rendszerekre; az NRTL-hez hasonlóan alkalmas folyadék-folyadék megoszlás számítására
 - UNIQUAC Functional-group activity coefficient (UNIFAC) – csoportjárulék módszer; durva tájékoztató közelítést nyújt; azeotrópok esetén félrevezető lehet; akkor érdemes alkalmazni, amikor nem áll rendelkezésre mérési adat egy adott elegyről
- Közös jellemző: a biner elegyekhez illesztett két paraméter jól használható terner és még több komponensű elegyek tulajdonságainak számításához.

Termodinamikai modellek

- Thermodynamics Wizard -

The selection of thermodynamic models is based on the component class data availability as well as the T/P operation range of the process. Use the suggestions of the expert system as a guide only.

Select components to ignore (e.g., non process utilities)

<None>	<None>
<None>	<None>
<None>	<None>

Please enter the temperature/pressure range of the process:

Temperature Min	1	C
Temperature Max	10000	C
Pressure Min	1.01325	bar
Pressure Max	100.3421	bar
BIP data threshold	0.5	

Help Cancel OK

Termodinamikai modellek

Thermodynamic Settings -

K-value Models | **Enthalpy Models** | Transport Properties

Global K-value Model: **SRK**

Ethane/Ethylene, Propane/Propylene:
☒ Regular SRK/PR BIPs
☐ Special SRK/PR BIPs

Vapor Phase Association:
No association

Vapor Fugacity/Poynting Correction:
☐ Correction using **SRK**
☒ No Correction

SRK/PR Alpha function:
☒ Standard SRK/PR
☐ Boston-Mathias extrapolation

☐ Special PSRK Gas/Physical Solvent Package

Global Phase Option:
☒ Vapor/Liquid/Solid
☐ Vapor/Liquid/Liquid/Solid

Water/Hydrocarbon Solubility:
☐ Miscible
☒ Immiscible

Wilson model salt: **<None>**

No. of BIP sets: **1**

Default BIP set: **1**

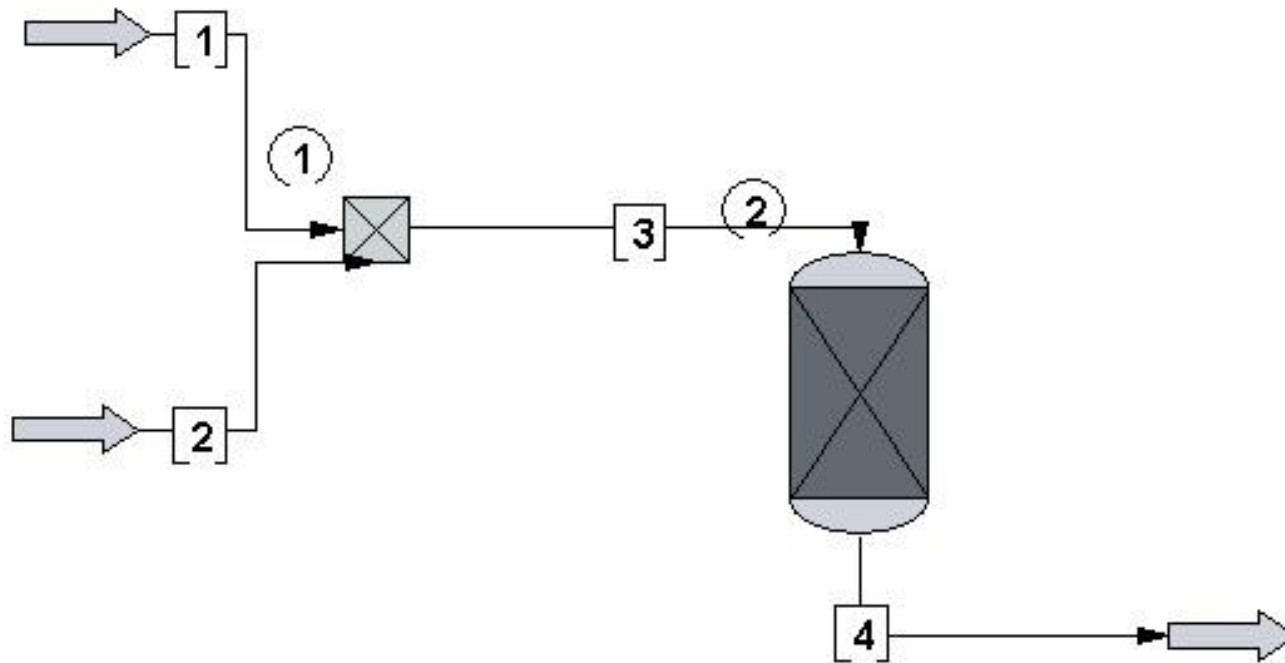
☐ Set Henry components
☐ Set local thermodynamics
☐ Clear all local thermodynamics
☒ Refresh input streams for local H models.

☐ Thermo Acceleration option

Options in gray are not applicable for this K-value option

Help Cancel OK

A folyamatábra



A bemenő áramok tulajdonságai

Edit Streams

Flash Cancel OK

Stream No.	1
Stream Name	levegő
Temp C	100
Pres bar	20
Vapor Fraction	0
Enthalpy MJ/h	0
Total flow	1000
Total flow unit	kmol/h
Comp unit	mole frac
Propane	0
Oxygen	0.21
Nitrogen	0.79
Carbon Dioxide	0
Water	0

Edit Streams

Flash Cancel OK

Stream No.	2
Stream Name	tüzelőanyag
Temp C	100
Pres bar	20
Vapor Fraction	1
Enthalpy MJ/h	-2377.496
Total flow	25
Total flow unit	kmol/h
Comp unit	mole frac
Propane	0.95
Oxygen	0
Nitrogen	0.05
Carbon Dioxide	0
Water	0

A reaktor

- Adiabatikus mód (lehet izoterm, valamint megadhatjuk a reaktor hőszükségletét)
- Kulcskomponens: propán
- Konverzió: törtben; TIZEDESPONT!
- Sztöchiometria: reaktánsok együtthatója negatív, termékeké pozitív előjelű
- Ha minden be van állítva: szimuláció futtatása 
- A termékáramra kattintva látható a termék összetétele, hőmérséklete, stb.

- Stoichiometric Reactor (REAC) -

General Specifications | More Components

ID: 2

Specify Thermal Mode:

☒ 1. Adiabatic
☐ 2. Isothermal [] C
☐ 3. Heat Duty [] MJ/h

Key Component: 1 Propane

Frac. Conversion: 0.9

Heat of Reaction: [] kJ/kmol
Reactor Pressure: [] bar
Calc H of Reac.: [] kJ/kmol

Ideal gas state

Stoichiometric Coefficients: 0. Mole base

Propane	-1	Carbon Dioxide	3
Oxygen	-5	Water	4
Nitrogen	[]		

Help Cancel OK

Sensitivity study

- Egy paraméter változtatásának hatása egy másik paraméterre sensitivity study segítségével vizsgálható
- Run menü/Sensitivity Study/New Analysis
- Meghatározandó:
 - A reaktor kimeneti hőmérséklete a szénhidrogén konverziójának függvényében 60-80%-os tartományban
 - 50%-os konverzió esetén a reaktor kimeneti hőmérséklete a levegő betáplálási anyagáramának függvényében 1000-2000 kmol/h tartományban
- Szükség van független és függő változóra
- Független változó az, amelyiket mi (vagy a program) változtat meg
- Ahhoz, hogy a program tudjon számolni, be kell állítani a tartományt, valamint a lépések számát
- Változók beállítása után: Run/Sensitivity Study/adott vizsgálat/Run All
- Eredmények: Run/Sensitivity Study/adott vizsgálat/Plot Results (táblázatosan és grafikusán is)

Független változó

- Edit Sensitivity Study -

Adjusting | Recording (1 of 4) | Recording (2 of 4) | Recording (3 of 4) | Recording (4 of 4)

Independent Variable 1

☒ Equipment ID Variable
☐ Stream Comp
Variable name Variable Units
Vary this variable from to in equal steps

Independent Variable 2 (optional)

☒ Equipment ID
☐ Stream Comp
Variable name Variable Units
Vary this variable from to in equal steps

Help Cancel OK

Függő változó

Edit Sensitivity Study -

Adjusting | **Recording (1 of 4)** | Recording (2 of 4) | Recording (3 of 4) | Recording (4 of 4)

Dependent Variable 1

Type
☐ Equipment
☒ Stream

ID

Variable

Comp

Variable name

Variable units

Dependent Variable 2

Type
☒ Equipment
☐ Stream

ID

Variable

Comp

Variable name

Variable Units

Dependent Variable 3

Type
☒ Equipment
☐ Stream

ID

Variable

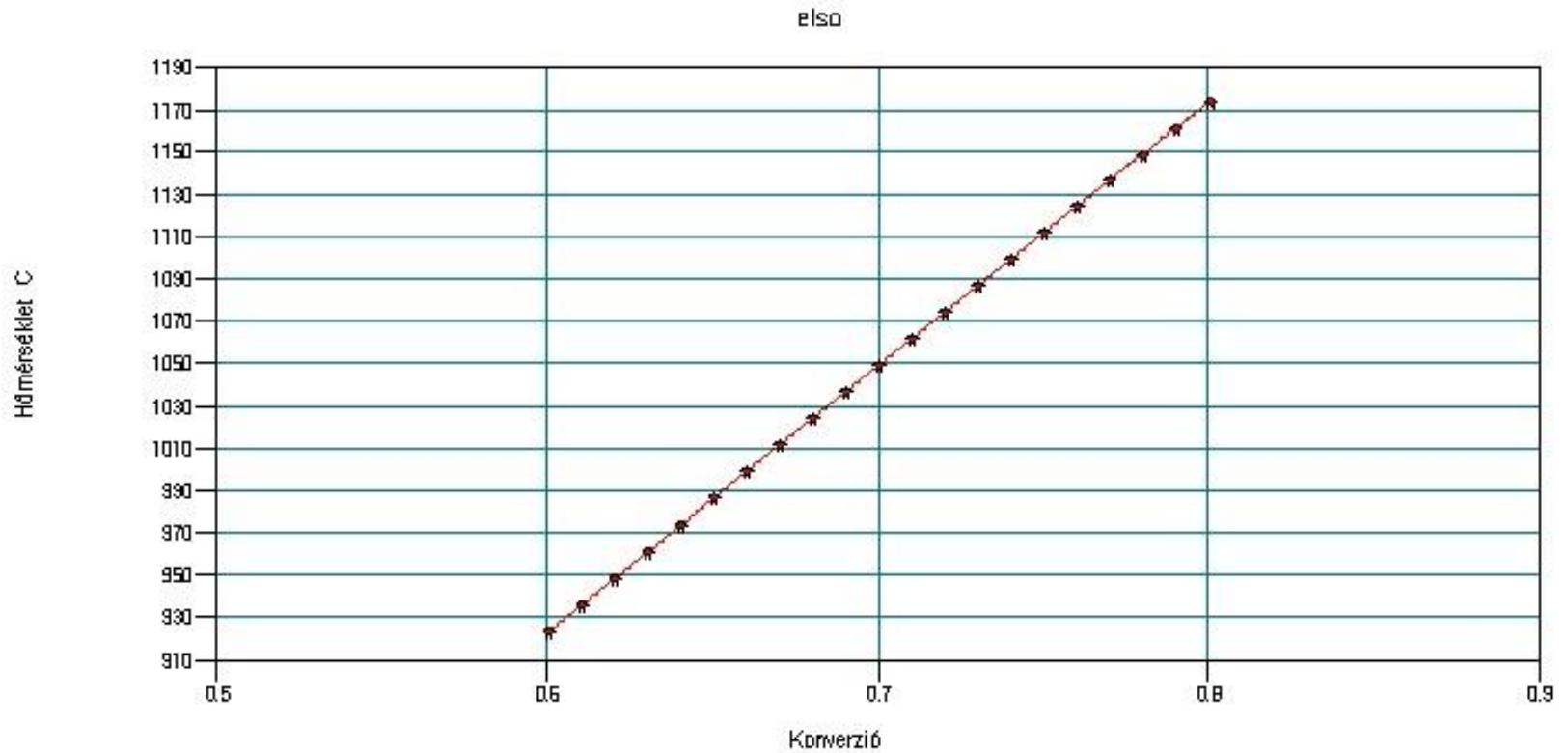
Comp

Variable name

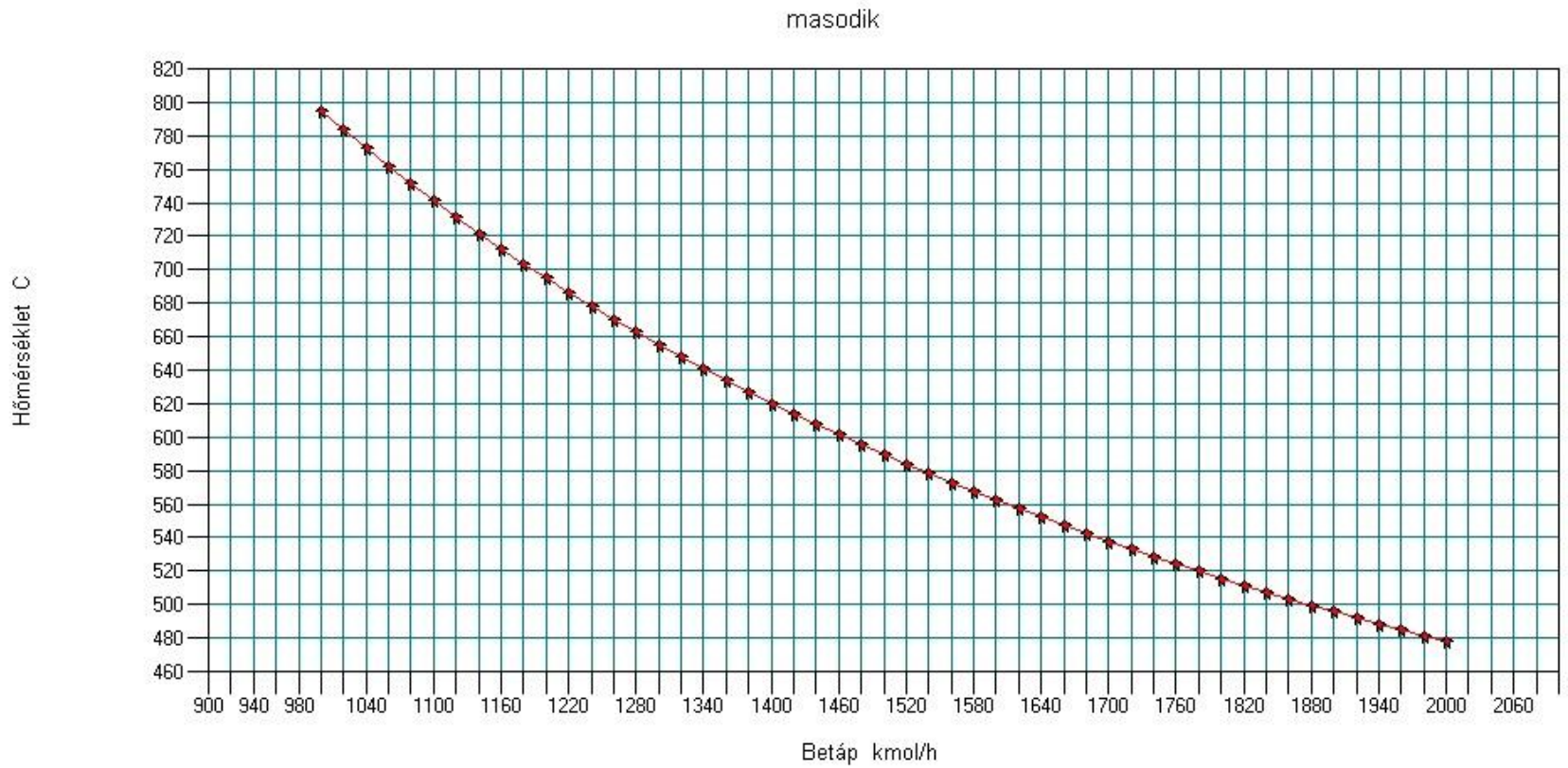
Variable Units

Help Cancel OK

Az eredmény – 1. vizsgálat

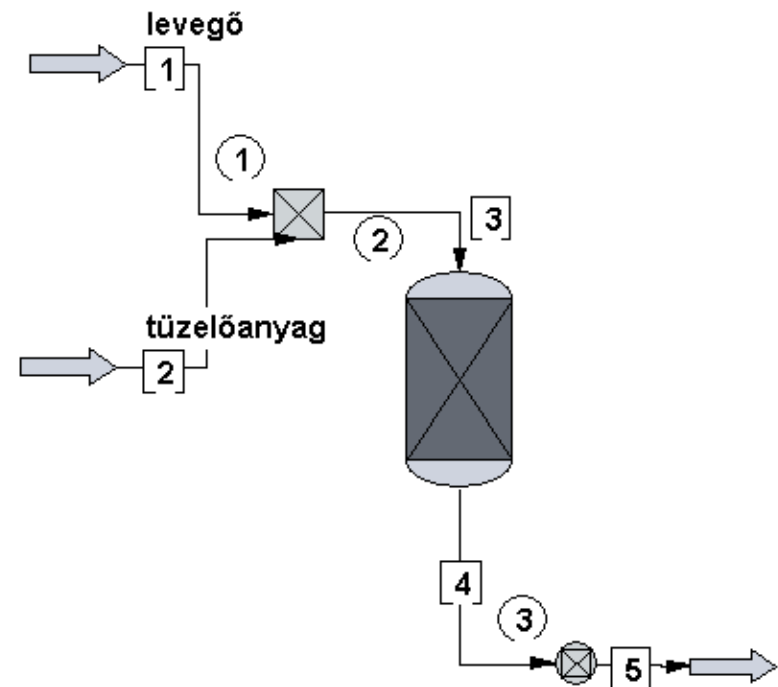


Az eredmény – 2. vizsgálat



A kontroller

- Jelölése a palettán: 
- Absztrakt műveleti egység
- Nem reprezentál fizikai eszközt
- Anyagáram- vagy eszközváltozókat lehet vele beállítani
- Két mód:
 - Feed forward: a kiszámított adatokat továbbítja egy adott eszköznek
 - Feed backward: egy változót állít be úgy, hogy egy adott feltétel teljesüljön
- Visszacsatolt módban célszerű azután az áram/műveleti egység után elhelyezni, melyre a megadott feltétel vonatkozik
- Állítsuk be a levegő áramát úgy, hogy legyen a kimenő hőmérséklet 1500 Celsius fok! (90%-os konverzió)



A controller

Controller (CONT) -

General Settings | Calculated Results | Feedback Options

Controller Mode: **Feed-backward** ID: 3

Adjust this variable

Stream ID number **1** Variable **5 Total mole rate**
Component <None>

Minimum value
Maximum value

Unit of adjusted variable:
0 Internal unit

Until this

☒ Stream ID number **4** Variable **1 Temperature**
☐ Equipment Scale
Arithmetic Operator 0 No operator

Component <None>

Is equal to this target

Constant **1500** Units **12 Temperature**
☒ Stream ID number
☐ Equipment Scale Variable
Component

Help Cancel OK

Gyakorlás

- Modellezd di terc-butil-peroxid bomlása acetonra és etánra:
- $(\text{CH}_3)_3\text{COOC}(\text{CH}_3)_3 \longrightarrow 2 (\text{CH}_3)_2\text{CO} + \text{C}_2\text{H}_6$
- Alkalmazott egyensúlyi és entalpia modell: SRK.
- Reakciókörülmények: 155 °C, 0,65 atm. A betáplálás: 100 kmol/h DTBP, 110 °C, 1 atm.
- A reaktor izoterm módon működik, a DTBP konverziója 85 %. Határozd meg a reakcióhőt és a képződött komponensek móláramát!
- Hogy változik a reaktort elhagyó áramban az aceton móltörtje a konverzió függvényében, 50-90 %-os konverzió tartományban?
- Határozd meg controller segítségével azt a betáplálási móláramot, amelyiknél a képződő etán mennyisége 1000 kg/h!

Gyakorlás

- Modellezd a 3-metil-1-pentén elégetésének folyamatát!
- Alkalmazott egyensúlyi és entalpia modell: SRK
- Bemenő anyagáramok:
 - Levegő: 79% nitrogén, 21% oxigén, 120 °C, 2 bar, 900 kmol/h
 - Tüzelőanyag: 45% 3-metil-1-pentén, 55% nitrogén, 120 °C, 2 bar, 50 kmol/h
- A reaktor adiabatikus módon működik, a konverzió 75%. Határozd meg a reakcióhőt és a képződött komponensek móláramát!
- Vizsgáld meg a tüzelőanyag mennyiségének a hatását a kimeneti hőmérsékletre! (100 és 200 kmol/h tartományban)
- Állítsd be a levegő áramát úgy, hogy legyen a kimenő hőmérséklet 1700 Celsius fok! (80%-os konverzió mellett!)

Hőcserélők

- $Q = k \cdot A \cdot \Delta T$ (a szoftver U-val jelöli a hőátbocsátási tényezőt)
- Ideális hőátadás
- Egy vagy két bemenetű hőcserélő
- Egy bemenet: egyszerű melegítőként/hűtőként funkcionál
- Design mód: egy specifikáció
- Számított eredmények:
 - Hőigény (pozitív vagy negatív)
 - Logaritmikus hőmérséklet különbség
 - Korrekciós faktor (függ a csövek számától)
 - Segédáram mennyisége
- Rating mód: meg kell adni a hőátbocsátási tényezőt és a hőátadó felületet is
- Ezenkívül szükség van a hűtő/fűtőközeg be-és kimenő hőmérsékletére
- A ΔT -t számolja a program
- Design és rating mód egyszerre: közeg fűtőértékét is meg kell adni – számol a program ΔT -t, kimenő hőmérsékletet, segédáram mennyiséget, valamint össz hőmennyiséget.
- SS/TS Passes: többjáratú hőcserélő



Hőcserélők

- Simple Heat Exchanger (HTXR) -

Specifications Utility Rating Cost Estimations ID: 3

Pressure drop: bar

For design mode, enter only ONE of the following:

Temperature of stream		C
Vapor fraction of stream		
Subcooling for stream		C
Superheat for stream		C
Heat Duty		MJ/h
Delta T		C

Backcalc Mode (for Autocalc):
 No back calculation

Calculated Heat Duty		MJ/h
LMTD (End points)		C
LMTD Corr Factor		
Utility Flow rate (see Rating Case)		kg/h

Help Cancel OK

- Simple Heat Exchanger (HTXR) -

Specifications Utility Rating Cost Estimations ID: 3

For rating case, enter the following (Design spec will be ignored):

T2 in		C
T2 Out		C
Overall U		W/m2-K
Area/shell		m2
Shells in Series		
No. of SS Passes		
No. of TS Passes		

To calculate utility flow, specify: ☐ Include holdup in dynamic calculation

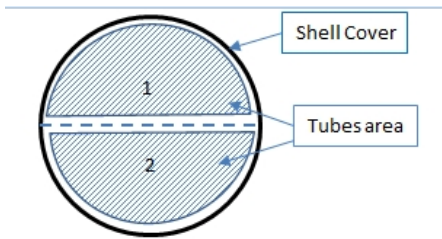
Utility Heat Value kJ/kg Holdup m3

Rating mode recommended only for cases where there is no evaporation or condensing.

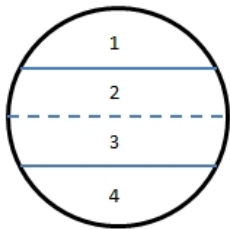
For more comprehensive heat exchanger design and rating, please use our CC-THERM program.

Help Cancel OK

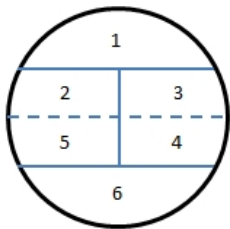
Többjáratú hőcserélő



Two tube passes



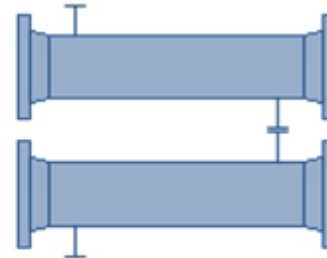
Four tube passes



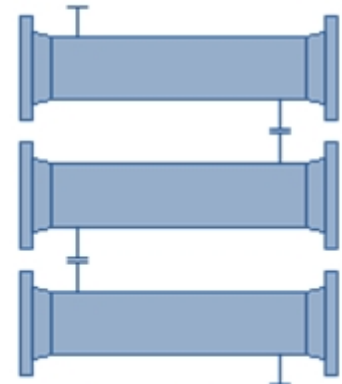
Six tube passes



One Shell Pass



Two Shell Passes



Three Shell Passes

Shell passes

Hőcserélők

- Két bemenet: komplexebb modellezést tesz lehetővé
 - Design mód: Megadható egy kimenő áram hőállapota, a hőigény, vagy a hőmérséklet különbség; amennyiben megadjuk a hőátbocsátási tényező vagy a hőátadó felület értékét, a másik paraméter szintén számolható
 - Rating mód: $k \cdot A$ értéke adott; a kimenő áramok tulajdonságait számolja a program
 - Utility mód (Utility option): Mindkét kimenő áram hőállapota ismert; meghatározható a segédáram mennyisége, vagy a belépő áram mennyisége
- Alkalmazott összefüggés: $Q = k \cdot A \cdot dT$
- Ideális hőátadást feltételez
- Rigorózusabb számítások: CC-THERM modul
- Misc settings:
 - Hőcserélő típusa (alapértelmezett: ellenáramú)
 - Többjártú hőcserélő
 - Számolt adatok



Hőcserélők

Heat Exchanger (HTXR) - ID: 2

Specifications Misc. Settings Cost Estimations

Simulation mode: 0 Enter specifications (CHEMCAD simulation) Pressure drop: (default = 0)

Utility option: 0 Utility Option Off

Stream 3 bar

Stream 5 bar

Enter one specification only:

Temperature stream 4		C	Delta temperature specifications:		C
Temperature stream 6		C	Minimum delta temperature		C
Vapor fraction stream 4			Hot outlet - cold inlet		C
Vapor fraction stream 6			Hot inlet - cold outlet		C
Subcooling stream 4		C	Stream 4 - stream 6		C
Subcooling stream 6		C	Stream 4 - stream 3		C
Superheat stream 4		C	Stream 6 - stream 5		C
Superheat stream 6		C			
Heat duty (specified)		MJ/h			

Heat transfer coefficient and area specification:
Specifying both U and A counts as a single thermal specification.

Heat transfer coefficient (U) w/m²-K

Area (per shell) m²

Help Cancel OK

Heat Exchanger (HTXR) - ID: 2

Specifications Misc. Settings Cost Estimations

Type: 0 Countercurrent Shells in Series

No. of Zones No. of SS Passes

Max. Percent of Pressure Drop Percent No. of TS Passes

For evaporator utility side operating temp: Include holdup in dynamic calculation

Utility operating T C Stream 3-4 holdup m³

Stream 5-6 holdup m³

Backcalc mode (for Autocalc): 0 No back calculation

Calculated Results:

Calc Ht Duty		MJ/h	Pinch Flag	
LMTD (End points)		C	Wt. LMTD	
LMTD Corr Factor			Area (Zone analysis)	
Calc U		W/m ² -K	Pressure stream 4	
Calc Area (per Shell)		m ²	Pressure stream 6	
Tube fouling		m ² -K/W		
Shell fouling		m ² -K/W		

For more comprehensive heat exchanger design and rating, please contact us regarding our CC-THERM program.

Help Cancel OK

Hőcserélők

- Költségszámítás: Cost estimations fül
- Alapbeállítások: elrendezés, anyag, nyomás
- Factor – szorzótényezők
- Számított eredmények

The screenshot shows the 'Heat Exchanger (HTXR)' software window with the 'Cost Estimations' tab selected. The window has three tabs: 'Specifications', 'Misc. Settings', and 'Cost Estimations'. The 'Cost Estimations' tab contains the following elements:

- Run the costing report after running the unit:** A checkbox that is currently unchecked.
- Cost model:** A dropdown menu set to 'Shell and tube'.
- Exchanger type:** A dropdown menu set to 'Fixed head'.
- Evaporator type:** A dropdown menu set to 'Forced circulation'.
- Design pressure:** A text input field followed by 'bar'.
- Install factor:** A text input field.
- Material factor:** A text input field.
- Pressure factor:** A text input field.
- Type factor:** A text input field.
- Material selection for this model:** A dropdown menu set to 'Carbon steel'.
- Calculated Results:** A section with five rows, each with a label and a text input field followed by a dollar sign (\$):
 - Basic cost
 - Total purchase cost
 - Total installed cost
 - Utility Cost
 - Purchase Cost Override

At the bottom of the window, there are three buttons: 'Help', 'Cancel', and 'OK'.

Feladatok

- „A” feladat: 25°C hőmérsékletű 100 kmol/h áramlási sebességű 50 mol% etanolt és 50 mol% n-propanolt tartalmazó elegyet melegítsünk fel a buborékpontjára. Léghőmérséklettel számolhatunk. Mekkora a hőcserélő hőteljesítménye?
- „B” feladat: Hőcserélőben a 100 kmol/h anyagáramú 20 °C hőmérsékletű vizet 60 °C-ra szeretnénk felmelegíteni. A segédáram víz, 200 kmol/h anyagáramú, 80 °C belépési hőmérsékletű. (Léghőmérséklettel számolhatunk.)
 - Hány fokra hűl le a segédáram?
 - Mekkora a logaritmusos közepes hőmérsékletkülönbség (LMTD)?
 - Mekkora a hőcserélő hőteljesítménye?
 - Mekkora a hőcserélő felülete, ha a hőátadási tényező 500 W/m²K?

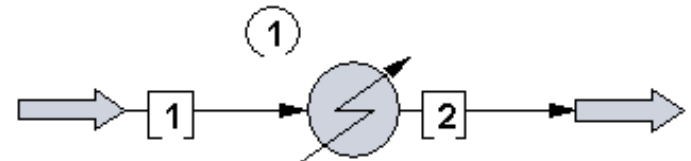
Feladatok

- „C” feladat: Hőcserélőben 100 kmol/h anyagáramú 20 °C hőmérsékletű 10 mol% hexán, 20 mol% heptán, 70 mol% oktán összetételű elegyet szeretnénk felmelegíteni. A segédáram víz, 200 kmol/h anyagáramú, 90 °C belépési hőmérsékletű. A hőcserélő hőátadási tényezője 1000 W/m²K, felülete 5 m². (Légköri nyomással számolhatunk.)
 - Hány fokra melegszik fel az elegy?
 - Hány fokra hűl le a segédáram?
 - Mekkora a logaritmusos közepes hőmérsékletkülönbség (LMTD)?
 - Mekkora a hőcserélő hőteljesítménye?
- „D” feladat: Hőcserélőben 100 kmol/h anyagáramú 20 °C hőmérsékletű 10 mol% hexán, 20 mol% heptán, 70 mol% oktán összetételű elegyet 60 °C-ra szeretnénk felmelegíteni. A segédáram víz, 90 °C belépési, 40 °C kilépési hőmérsékletű. (Légköri nyomással számolhatunk.) Mekkora legyen a segédáram anyagárama?

Támpontok a feladatokhoz

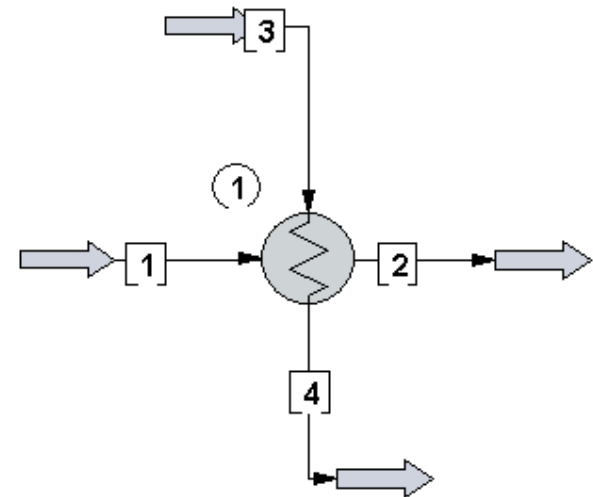
- Ne feledjétek az alap szimulációs lépéseket! (Mértékegységrendszer, komponensek, termodinamikai modell, folyamatábra)
- „A” feladat: egy bemenetű hőcserélő
- Vapor fraction: nem lehet nulla!

Temperature of stream 2	
Vapor fraction of stream 2	0.00000001
Subcooling for stream 2	



- „B” feladat: két bemenetű hőcserélő
- Design case

Simulation mode:	0 Enter specifications (CHEMCAD simulation)
Utility option:	0 Utility Option Off



Támpontok a feladatokhoz

- „C” feladat: Rating case

Heat transfer coefficient (U)	1000	W/m ² ·K
Area (per shell)	5	m ²

Simulation mode:	0 Enter specifications (CHEMCAD simulation)
Utility option:	0 Utility Option Off

- „D” feladat: Utility case
- A segédáramnak adjunk meg egy kezdeti értéket

Utility option:	1 Calculate flow of stream 3
-----------------	---

Temperature stream 2	60	C
Temperature stream 4	40	C

Gyakorló feladat

- Hőcserélőben 100 kmol/h anyagáramú 20 °C hőmérsékletű 10 mol% hexán, 90 mol% heptán összetételű elegyet 80 °C -ra szeretnénk felmelegíteni. A segédáram víz, 300 kmol/h anyagáramú, 95 °C belépési hőmérsékletű. (Nyomás: 1 atm.)
 - Hány fokra hűl le a segédáram?
 - Mekkora a logaritmikus közepes hőmérsékletkülönbség (LMTD)?
 - Mekkora a hőcserélő hőteljesítménye?
 - Mekkora a hőcserélő hőátadási tényezője, ha a felülete 10 m²?
 - Ha ekkora felület mellett a hőcserélő hőátadási tényezője csak 2000 W/m²K lenne, hány fokra melegedne fel az elegy?
 - Mennyi legyen a segédáram mennyisége, ha azt szeretnénk, hogy 50 °C-ra hűljön le? A melegítendő elegy be-és kilépő hőmérséklete változatlan.

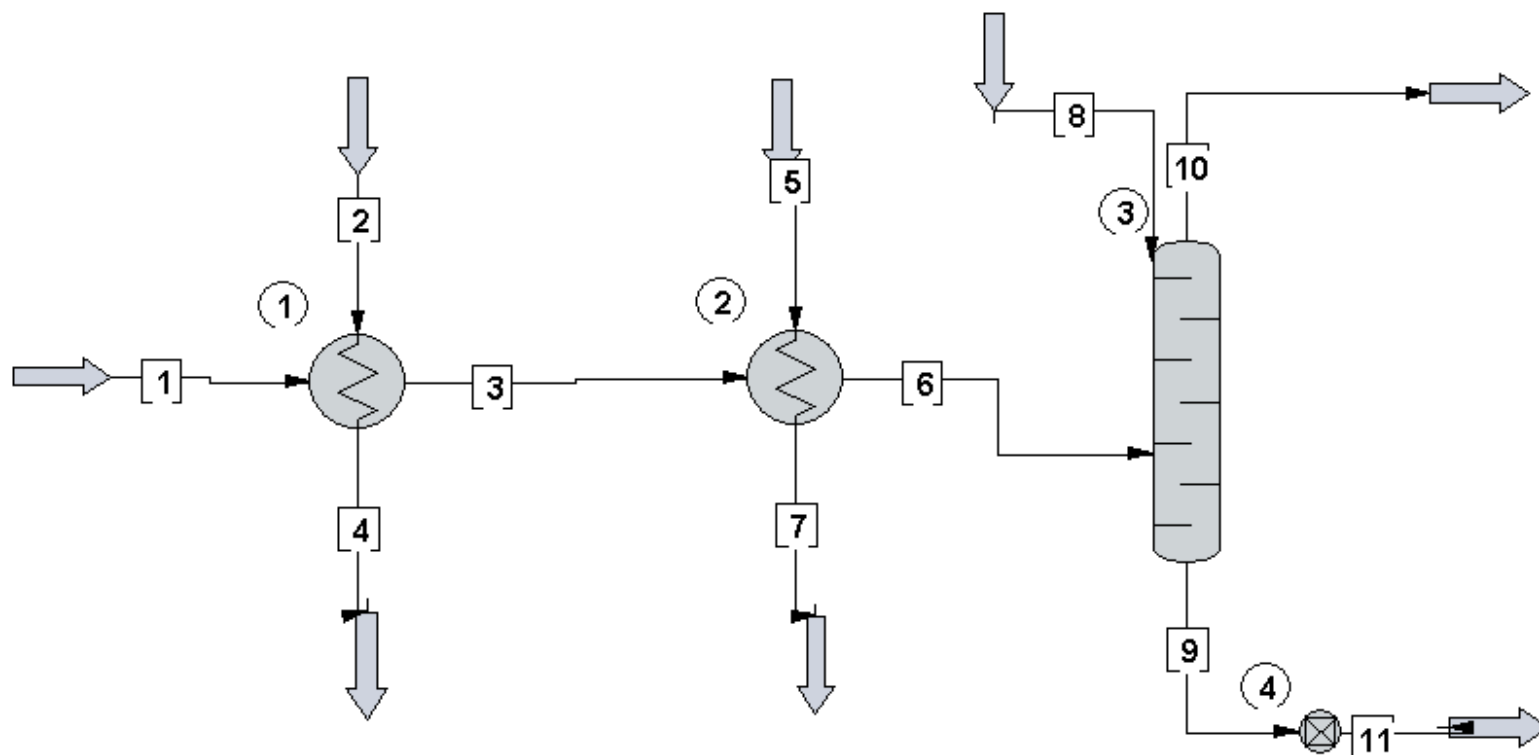
Összetettebb feladat

- Egy reaktor formaldehidet állít elő metanolból. A reaktorból kijövő termék 19,9 mol% formaldehidet, 8,34 % metanolt, 30,3 % nitrogént, 0,860 % oxigént, 5,0 % hidrogént és 35,6 % vízgőzt tartalmaz. Ez az elegy lesz folyamatábránk bemenő anyagárama. Hőmérséklete 600 °C, nyomása 1 bar, mennyisége 100 kmol/h. Az alkalmazott egyensúlyi modell: Wilson; entalpia modell: Latent heat.
- A gázelegyet egy hőcserélőbe vezetjük, ahol hasznosítjuk a lehűtésekor keletkező hőt vízgőz termelésére. Az elegy 145 °C-ra hűl le, miközben a 3,1 bar nyomású buborékponti vízből szintén 3,1 bar nyomású gőz keletkezik.
- A gázt tovább hűtjük 90 °C-ra egy hőcserélőben, ahol a hűtő segédáram 1 bar nyomású, 30 °C-os víz, melynek kimeneti hőmérséklete 45° C legyen.

Összetettebb feladat

- A lehűtött gázt egy abszorpciós oszlop aljába vezetjük, ahol a metanol és a formaldehid nagy része vízben abszorbeálódik. A 30 °C-os, 1 bar nyomású vizet a kolonna tetején tápláljuk be. A kolonna alján távozó folyadék 80 °C-os legyen
- A kolonnának a következő paramétereit állítsuk be:
 - tányérok száma (No. of stages): 20;
 - a víz betáplálási helye (Feed tray for stream 8): 1 (a kolonna teteje)
 - az elegy betáplálási helye (Feed tray for stream 6): 20 (a kolonna alja)
- Készítsd el úgy a modellt, hogy teljesüljenek a fenti feltételek, valamint a szimulációt lefuttatva határozd meg a következő adatokat:
 - mennyi gőz képződik az első hőcserélőben (kg/hr),
 - mennyi hűtővizet kell bevezetni a második hőcserélőbe (kg/hr),
 - mi az összetétele a kolonna gőz, illetve folyadék termékének (mol/h)?

A folyamatábra



Segédlet

- Hőcserélők: egyik esetben sem ismert a segédáram mennyisége – Calculate flow of stream ...
- Kolonna: nincs se kondenzátora, se forralója – SCDS #17
- Kontroller: ÁLLÍTSD addig az abszorbens mennyiségét, AMEDDIG az abszorbeált anyag hőmérséklete EGYENLŐ lesz 80 °C-al.

Gőz-folyadék egyensúly

- Folyadékelegyek szétválasztása – rektifikálás
- Szükségesek a gőz-folyadék egyensúlyi adatok
- Ideális elegyek – Raoult-törvény érvényes
- Az Antoine-konstansokból kiindulva számolhatók az egyensúlyi adatpárok
- Nem ideális elegyek – koncentráció helyett aktivitás
- Aktivitási koefficiens (γ): ideálistól való eltérés
- Különböző aktivitási koefficiens modellek – különböző együtthatók

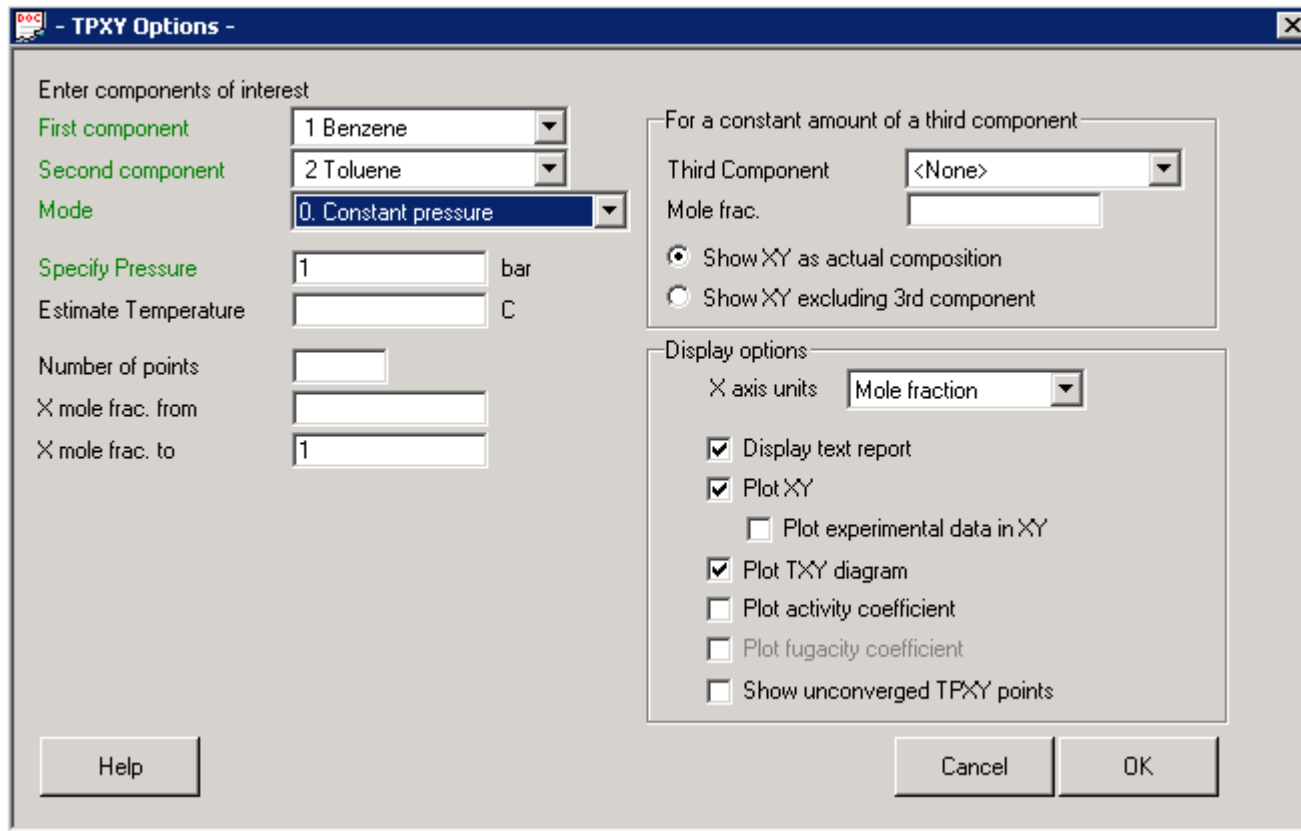
Modell	Kölcsönhatási paraméterek
Wilson	A_{ij}, A_{ji}
NRTL	B_{ij}, B_{ji} ; α : nem-idealitást jellemző konstans; 0,2 és 0,3 közötti érték
UNIQUAC	$\Delta U_{ij}, \Delta U_{ji}$

Gőz-folyadék egyensúly

- UNIFAC modell: csoport járulék módszer
- A UNIQUAC modellből kiindulva fejlesztették ki
- A molekulákat különböző csoportokból „építi fel”- csoportokra jellemző, mért paraméterek
- R és Q csoportjellemzők – R: térfogattal kapcsolatos; Q: felülettel kapcsolatos paraméter
- Az egymáshoz közel elhelyezkedő csoportok hatással vannak egymásra – csoport kölcsönhatási értékpárok
- Fredenslund: Group-Contribution Estimation of Activity Coefficients in Nonideal Liquid Mixtures
- Ha egyáltalán nincs gőz-folyadék egyensúlyi adat egy elegyre, akkor ajánlott
- Ha „csak” a szoftver adatbázisában nincs adat – regresszálás javasolt
- Modellek közti különbségek vizsgálata – egyensúlyi és forrponti diagrammok; shortcut számítások

Egyensúlyi diagrammok

- Plot – TPXY...; illékonyabb komponens van elől; izoterm vagy izobár
- Adatok diagrammon és táblázatban



The image shows a software dialog box titled "TPXY Options". It is divided into several sections for configuring a plot. The "Enter components of interest" section on the left includes dropdowns for "First component" (1 Benzene), "Second component" (2 Toluene), and "Mode" (0. Constant pressure). Below these are input fields for "Specify Pressure" (1 bar) and "Estimate Temperature" (C). Further down are fields for "Number of points", "X mole frac. from", and "X mole frac. to" (1). The right side of the dialog has a section "For a constant amount of a third component" with a "Third Component" dropdown (set to <None>) and a "Mole frac." input field. Below this are two radio buttons: "Show XY as actual composition" (selected) and "Show XY excluding 3rd component". A "Display options" section contains a dropdown for "X axis units" (Mole fraction) and several checkboxes: "Display text report" (checked), "Plot XY" (checked), "Plot experimental data in XY" (unchecked), "Plot TXY diagram" (checked), "Plot activity coefficient" (unchecked), "Plot fugacity coefficient" (unchecked), and "Show unconverged TPXY points" (unchecked). At the bottom are "Help", "Cancel", and "OK" buttons.

TPXY Options

Enter components of interest

First component: 1 Benzene

Second component: 2 Toluene

Mode: 0. Constant pressure

Specify Pressure: 1 bar

Estimate Temperature: C

Number of points:

X mole frac. from:

X mole frac. to: 1

For a constant amount of a third component

Third Component: <None>

Mole frac.:

☒ Show XY as actual composition

☐ Show XY excluding 3rd component

Display options

X axis units: Mole fraction

☒ Display text report

☒ Plot XY

☐ Plot experimental data in XY

☒ Plot TXY diagram

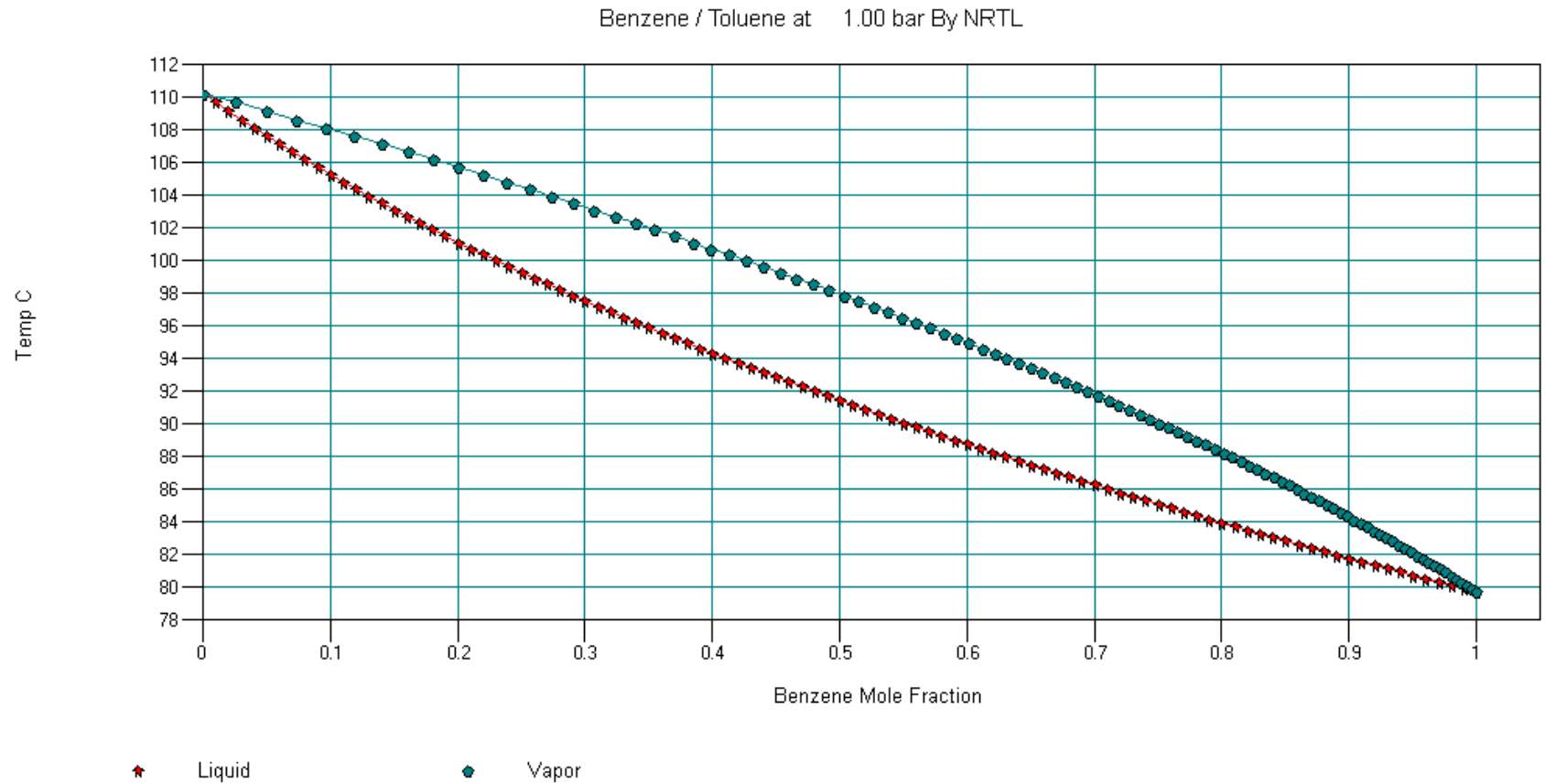
☐ Plot activity coefficient

☐ Plot fugacity coefficient

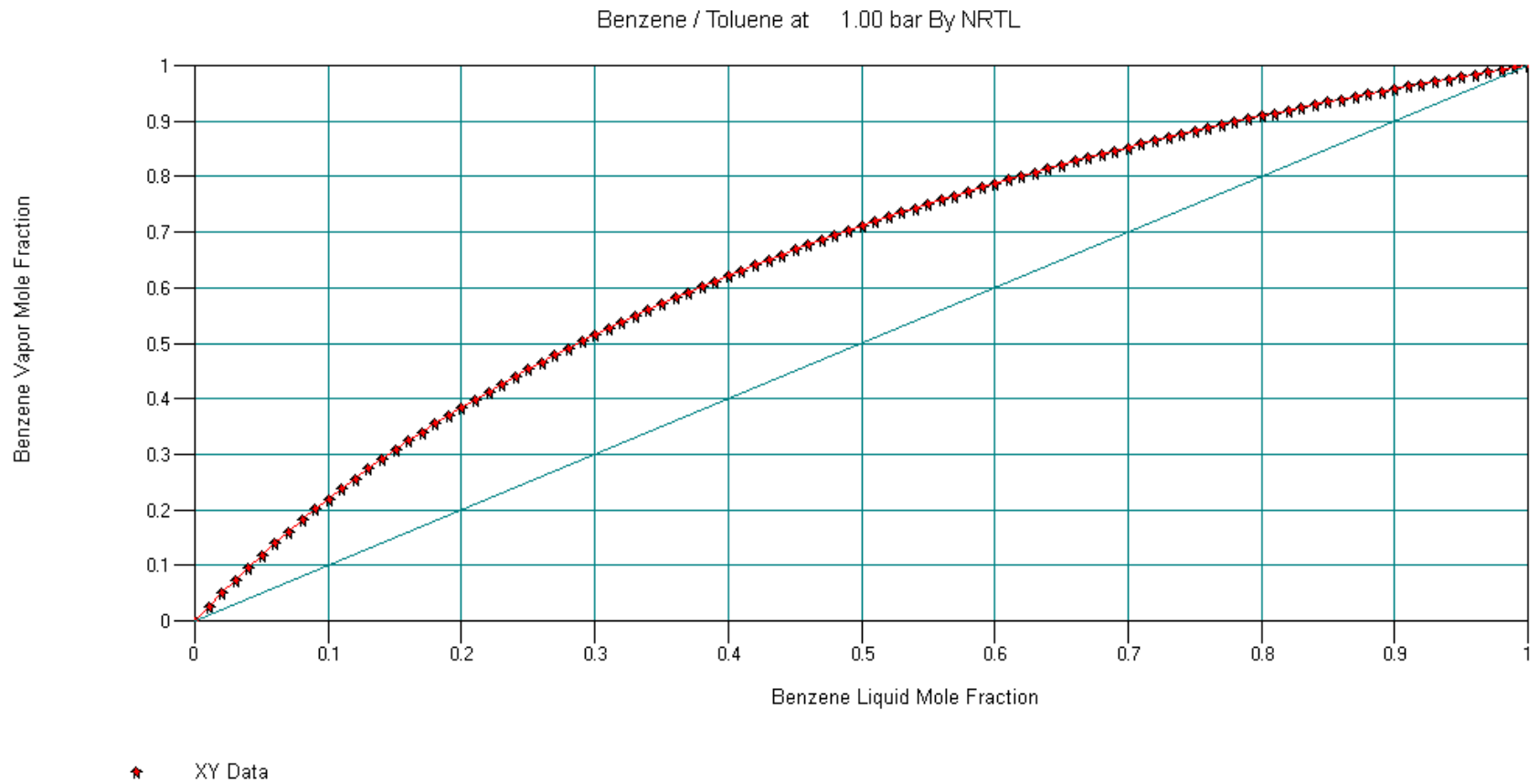
☐ Show unconverged TPXY points

Help Cancel OK

Forrpont-harmatpont görbe



Egyensúlyi görbe



Shortcut kolonna

- A Fenske, az Underwood és a Gillian egyenleteket használja fel
- Meghatározható: minimális tányérszám, minimális refluxarány, valós tányérszám, valós refluxarány

- Shortcut Column (SHOR) -

Select mode: ID: 1
2 Design: FUG with Fenske feed tray location

Select condenser type: 0 Total

Column pressure: bar

Column pressure drop: bar

Number of stages:

Reflux ratio:

R/Rmin:

Case Study

Number of points:

Lower bound R/Rmin:

Upper bound R/Rmin:

Key Component Specifications

Light key component: Heavy key component:

Light key split: Heavy key split:

Calculated Results

Condenser duty: MJ/h

Reboiler duty: MJ/h

Minimum stages: Reflux ratio, minimum:

Feed stage: Reflux ratio, calculated:

Help Cancel OK

Modellek összehasonlítása

- Feladat: benzol-toluol és ecetsav-víz elegyek szétválasztásának modellezése
Shortcut kolonna segítségével, a segédletben megadott betáplálási paraméterekkel
- A különböző modellekkel készült egyensúlyi és forrponti diagrammok összehasonlítása
- A különböző modellekkel végzett szimulációk során kapott eredmények összehasonlítása

Ha a szoftver adatbázisa nem tartalmaz mérési adatot

- Modellelegy: víz-gamma valerolakton (GVL)
- Alapértelmezett modell: UNIFAC
- Probléma: azeotrópot és folyadék-folyadék megoszlást mutat egy olyan elegyre, amelyikre egyik sem jellemző
- Megoldás:
 - Regresszálás
 - Kísérlettel meghatározott kölcsönhatási paraméterek használata
- Regresszálás előtt válasszuk ki azt a modellt, amelyiket alkalmazni szeretnénk
- Regresszálás: Thermophysical/Regress BIPs
- Kölcsönhatási paraméterek beírása: Thermophysical/Edit BIPs
- Gőz-folyadék egyensúlyi adatok:
 - Mérés útján
 - Interneten elérhető cikkek
 - D csarnok, bejárat melletti szekrény – szürke könyvek

Modellek összehasonlítása

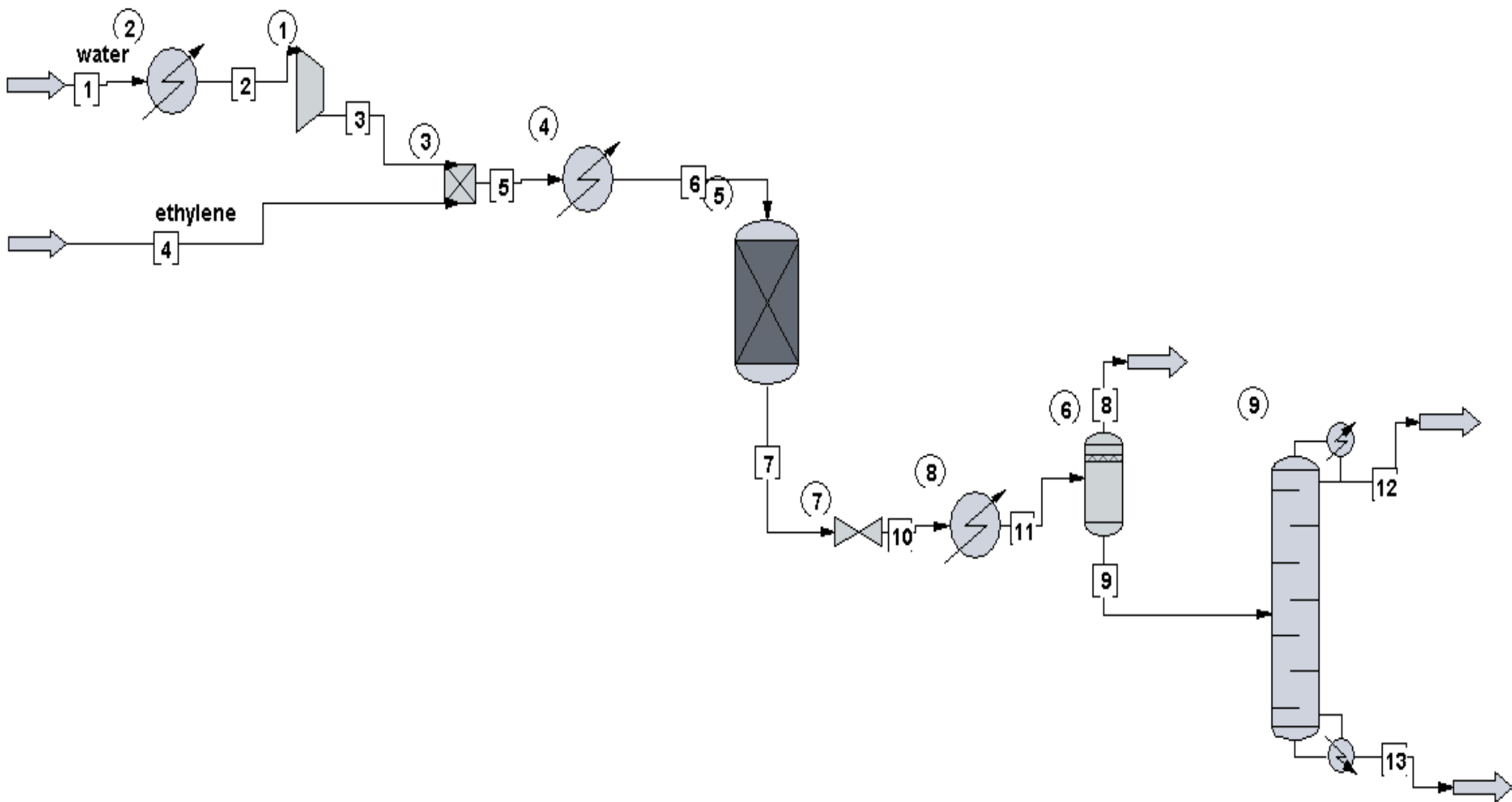
- Feladat: víz-GVL elegy szétválasztásának modellezése Shortcut kolonna segítségével, a segédletben megadott betáplálási paraméterekkel
- A különböző modellekkel készült egyensúlyi és forrponti diagrammok összehasonlítása
- A különböző modellekkel végzett szimulációk során kapott eredmények összehasonlítása
- Kölcsönhatási paraméterek a különböző modellekhez:

Modell	Kölcsönhatási paraméterek
Wilson	$A_{ij} = 1463,2$; $A_{ji} = 1225,0$
NRTL	$B_{ij} = 907,42$; $B_{ji} = -4,412$; $\alpha = 0,26684$
UNIQUAC	$\Delta U_{ij} = -223,49$; $\Delta u_{ji} = 712,91$

Összetett feladat

- Víz és etilén reakciója során etanol keletkezik; a feladat a reakció modellezése (gőzfázisban játszódik le 600 Celsius fok hőmérsékleten és 60 bar nyomáson)
- Termodinamikai modell: UNIQUAC, entalpia modell: Latent Heat
- Etilén: 20 C, 60 bar, 200 kmol/h
- Víz: 20 C. 1 bar. 100 kmol/h
- A konverzió legyen 80%
- A reaktorból kilépő áram etilént, etanolt és vizet tartalmaz
- Feladat: a kilépő áramok szétválasztása gáz és folyadékfázisra; 88 mol % tisztaságú etanol előállítása
- A rektifikáló oszlop 40 tányéros, parciális kondenzátorral működik, a betáplálás helye a 10. tányér

A folyamatábra



Első hőcserélő

- Simple Heat Exchanger (HTXR) -

Specifications Utility Rating Cost Estimations

Pressure drop: bar ID: 1

For design mode, enter only ONE of the following:

Temperature of stream 2		C
Vapor fraction of stream 2	1	
Subcooling for stream 2		C
Superheat for stream 2		C
Heat Duty		MJ/h
Delta T stream 2 - stream 1		C

Backcalc Mode (for Autocalc):

Calculated Heat Duty		MJ/h
LMTD (End points)		C
LMTD Corr Factor		
Utility Flow rate (see Rating Case)		kg/h

Help Cancel OK

Kompresszor

- Compressor (COMP)/ Expander (EXPN) -

Specifications Cost Estimations

Operating mode ☒ On ID: 2
 ☐ Off

Mode of operation:
0 Specify output pressure and efficiency

Compressor/Expander model type:
1 Adiabatic

Pressure out 60 bar
Pressure ratio
Efficiency 0.75
Actual Power MJ/h
Property option: Inlet conditions

Cp/Cv
Output pressure bar
Theoretical power MJ/h

Performance curve calc option
Fixed flow rate, calc Pout

Performance curve unit
0 Specify head in length unit

For multiple speed performance curves:
No. of speed lines
Actual RPM
Ideal Cp/Cv

Help Cancel OK

Reaktor előtti előmelegítő

- Simple Heat Exchanger (HTXR) -

Specifications Utility Rating Cost Estimations

Pressure drop: bar ID: 4

For design mode, enter only ONE of the following:

Temperature of stream 6	600	C
Vapor fraction of stream 6		
Subcooling for stream 6		C
Superheat for stream 6		C
Heat Duty		MJ/h
Delta T stream 6 - stream 5		C

Backcalc Mode (for Autocalc):

Calculated Heat Duty		MJ/h
LMTD (End points)		C
LMTD Corr Factor		
Utility Flow rate (see Rating Case)		kg/h

Help Cancel OK

Reaktor

- Stoichiometric Reactor (REAC) -

General Specifications More Components

ID: 5

Specify Thermal Mode:

☐ 1. Adiabatic

☒ 2. Isothermal 600 C

☐ 3. Heat Duty MJ/h

Key Component 1 Water

Frac. Conversion 0.8

Heat of Reaction kJ/kmol Ideal gas state

Reactor Pressure bar

Calc H of Reac. kJ/kmol

Stoichiometric Coefficients: 0. Mole base

Water	-1
Ethylene	-1
Ethanol	1

Help Cancel OK

Gáz-folyadék szétválasztás

- A reaktorból kijövő áram 60 bar nyomású, 600 C hőmérsékletű, tisztán gőzállapotú
- Tartalmaz etanolt, vizet és etilént
- Szétválaszthatóak nyomáscsökkentés, majd szobahőmérsékletre történő lehűtés után
- Nyomáscsökkentés: szeleppel
- Hűtés után gáz-folyadék vegyes fázis; az etanol és a víz nagy része lekondenzált
- Fázisszeparátorban (Flash) szétválasztható az etilén az etanol-víz elegytől
- A Flash műveleti egység egyensúlyi desztillálás modellezésére is alkalmas

Szelep

The image shows a software dialog box titled "- Valve (VALV) -". It contains a checkbox for "Close valve completely (turn valve off)", a green instruction "Enter one of the options:", and four input fields for "Outlet pressure", "Pressure drop", "Dew point temp", and "Bubble point temp". The "Outlet pressure" field contains the value "1". Each input field has a unit label to its right: "bar" for pressure and "C" for temperature. At the bottom are "Help", "Cancel", and "OK" buttons. The window title bar includes a standard Windows icon, the title text, and a close button.

Parameter	Value	Unit
Close valve completely (turn valve off)	☐	
Enter one of the options:		
Outlet pressure	1	bar
Pressure drop		bar
Dew point temp		C
Bubble point temp		C

Buttons: Help, Cancel, OK

Hútố

- Simple Heat Exchanger (HTXR) -

Specifications Utility Rating Cost Estimations

Pressure drop: bar ID: 8

For design mode, enter only ONE of the following:

Temperature of stream 11	20	C
Vapor fraction of stream 11		
Subcooling for stream 11		C
Superheat for stream 11		C
Heat Duty		MJ/h
Delta T stream 11 - stream 8		C

Backcalc Mode (for Autocalc):

Calculated Heat Duty		MJ/h
LMTD (End points)		C
LMTD Corr Factor		
Utility Flow rate (see Rating Case)		kg/h

Help Cancel OK

Fázisszeparátor

- Multipurpose Flash (FLAS) -

Specifications | Cost Estimation

ID: 7

Flash Mode

0 Use inlet T and P; calculate V/F and Heat

Calc. Heat duty MJ/h

Help Cancel OK

Folyadék szeparáció

- A folyadékáram kb. 80-20 mol% arányban etanol-víz (némi etilén is van benne)
- Tisztább etanol előállítása: rektifikálás – SCDS kolonna
- Rigorózus modell (fokozatról fokozatra kiszámolja az egyensúlyt)
- Kondenzátor típusok: teljes vagy részleges (utóbbit válasszuk az etilén jelenléte miatt)
- Kötelezően megadandó: tányérszám, betáplálás helye, kondenzátor és forraló specifikáció
- Leggyakoribb specifikációk: adott komponens törtje a fej/fenektermékben; visszanyerés; refluxarány; adott komponens mennyisége a fej/fenektermékben
- Convergence menü: a számolt adatokat lehet megtekinteni
- Költségelemzés – lehetőség van tányéros és töltetes oszlop beruházási költségének becslésére

SCDS kolonna

SCDS Distillation Column -

General Specifications Convergence Cost Estimation 1 Cost Estimation 2

General Model Parameters ID: 9

Condenser type 1 Partial

Subcooled delta T C

Top pressure bar

Cond press drop bar

Colm press drop bar

Reflux pump press. bar

Bottom pump press. bar

Simulation model Regular VLE model

☐ Check here for reactive distillation

Ambient Heat Transfer/HiDic

Heat transfer area/stage m2

Heat transfer coeff. (U) W/m2-K

Ambient temperature C or HiDic Colm ID

Optional three phase control:

☐ Use local three phase model

Three phase stage from

Three phase stage to

No. of stages 40

Feed stages:

Feed stage for stream 10 10

Help Cancel OK

SCDS kolonna

SCDS Distillation Column -

General Specifications Convergence Cost Estimation 1 Cost Estimation 2

Heat and Material Balance Specifications ID: 9

Condenser mode:	Specification	Component
6 Distillate component mole fraction	0.88	3 Ethanol
Select reboiler mode:	Specification	Component
6 Bottom component mole fraction	0.99	1 Water

Optional Tray Specification

Adjust the specification for 0. None

until the 0. Tray Tray

Variable 0 = None

Phase 0. Liquid

is equal to a specified value of

Help Cancel OK

Vizsgálatok

- Vizsgáljuk meg a refluxarány és a tányérszám hatását a terméktisztaságra, valamint a betáplálás helyének hatását a forraló hőigényére!
- Találjunk egy optimális kolonnabeállítást!
- A refluxarány értéktartománya: 1 és 10 között; a tányérszám tartománya: 20 és 60 között