

6^ο Εργαστήριο Σχεδιασμού Χημικών Βιομηχανιών και Διεργασιών

Σε αυτό το εργαστήριο θα προσομοιώσουμε μια μονάδα εκχυλιστικής απόσταξης (extractive distillation) για το διαχωρισμό ακεταλδεΐδης (acetaldehyde) και τολουολίου (toluene) με τη χρήση ενός διαλύτη νερού. Θα χρησιμοποιήσουμε δύο αποστακτικές στήλες, όπου το κατώτερο κλάσμα (προϊόν) της πρώτης αποστακτικής στήλης είναι το τολουόλιο ενώ η άλλη αποστακτική στήλη χρησιμοποιείται για ανάκτηση τροφοδοσίας, όπου η ακεταλδεΐδη διαχωρίζεται ως ανώτερο κλάσμα (προϊόν). Το μείγμα από το κάτω μέρος της δεύτερης στήλης ανακυκλώνεται με ροή τροφοδοσίας. Η εκχυλιστική απόσταξη είναι μια κοινώς χρησιμοποιούμενη μέθοδος για το διαχωρισμό του αζεοτροπικού μίγματος (azeotropic mixture). Σε αυτήν τη μέθοδο, ένα τρίτο συστατικό προστίθεται στο σύστημα ως διαλύτης για να μεταβληθεί η σχετική πτητικότητα του συστατικού προς διαχωρισμό. Με την παρουσία του κατάλληλου διαλύτη, μπορεί να ενισχυθεί η σχετική πτητικότητα των αρχικών δύο συστατικών. Το διάγραμμα ροής αποτελείται από δύο αποστακτικές στήλες και έναν διαλύτη. Μεταξύ των διαφόρων διαθέσιμων διαλυτών όπως DMSO, DMF εδώ θα χρησιμοποιήσουμε το νερό καθώς είναι φθινό και διαθέσιμο. Η αποστακτική στήλη-I είναι η εξαγωγική στήλη και η αποστακτική στήλη-II προορίζεται για ανάκτηση της ακεταλδεΐδης. Το μείγμα ακεταλδεΐδης-τολουολίου μαζί με διαλύτη τροφοδοτείται στην αποστακτική στήλη-I, όπου το κατώτερο προϊόν της στήλης-I είναι το επιθυμητό προϊόν, δηλαδή 99 wt. % τολουόλιο. Το ανώτερο κλάσμα τροφοδοτείται στην αποστακτική Στήλη-II για περαιτέρω διαχωρισμό όπου η ακεταλδεΐδη διαχωρίζεται από το μείγμα και στη συνέχεια λαμβάνεται από την κορυφή της στήλης με 95 wt. % καθαρότητα. Αυτό το μείγμα ανακυκλώνεται και πάλι στην αποστακτική στήλη-I μετά από ψύξη και προσθήκη κατάλληλης ροής για να ληφθεί υπόψη η απώλεια στα αποστάγματα της στήλης-I και της στήλης-II. Ο ρυθμός ροής της νέας τροφοδοσίας διατηρείται στα 61.5613 kmol / h που περιέχει 0.7 wt. % ακεταλδεΐδης και τολουολίου σε θερμοκρασία 298.15 K. Η πίεση και στις δύο αποστακτικές στήλες διατηρείται στα 1.01325 bar.

1. Δημιουργούμε μια νέα προσομοίωση: **File -> New Steady-state simulation.**
2. Από την καρτέλα «**Compounds**» προσθέτουμε τα εξής στοιχεία-αντιδραστήρια:
 - Acetaldehyde
 - Toluene
 - Water
3. Από την καρτέλα «**Property Packages**» επιλέγουμε την εξίσωση επίλυσης «**Raoult's Law**».
4. Από την καρτέλα «**System of Units**» επιλέγουμε την μονάδα μέτρησης «**C5**» όπου:
 - Temperature = °C
 - Mass flow rate = kg/h
 - Pressure = bar

- Molar flow rate = kmol/h
- Volumetric flow rate = m³/h

5. Εισάγουμε ένα «**Material Stream**» και θέτουμε τα εξής «**Stream Conditions**»:

- Object = FEED RECOVERY
- Pressure = 1.01325 bar (1 atm)
- Temperature = 25 °C
- Mass Flow = 3600 kg/h (Molar Flow = 61.5613 kmol/h)

με τα εξής «**Compound Amounts**»:

- Acetaldehyde = 0.7
- Toluene = 0.3
- Water = 0

6. Εισάγουμε ένα δεύτερο «**Material Stream**» και θέτουμε τα εξής «**Stream Conditions**»:

- Object = WATER
- Pressure = 1.01325 bar (1 atm)
- Temperature = 25 °C
- Mass Flow = 3600 kg/h (Molar Flow = 108.961 kmol/h)

με τα εξής «**Compound Amounts**»:

- Acetaldehyde = 0.15
- Toluene = 0.15
- Water = 0.7

7. Από την καρτέλα «**CAPE-OPEN**» εισάγουμε «**CAPE-OPEN Unit Operation**» με παραμέτρους:

- Object = D-1
- Operation = Extractive Distillation
- Number of stages = 20
- Feed stages = 5, 7
- Condenser = Total (Liquid product)
- Reboiler = Partial (Liquid product)
- Condenser pressure = 101325 N/m²

- Column pressure = Constant pressure
- K-value = DECHEMA
- Activity coeff = NRTL
- Vapour pressure = Antoine
- Enthalpy = ideal
- Top pressure = 101352 N/m²
- Top specification = Reflux ratio (4.000)
- Condenser duty name = Qcondenser
- Bottom specification = Mole fraction of a component (0.99), Toluene
- Reboiler duty name = Qreboiler
- Feed 1 = WATER
- Feed 2 = FEED
- TopProduct = TOP
- BottomProduct = TOLUENE

8. Εισάγουμε έναν δεύτερο «**Distillation Column**» με παραμέτρους:

- Object = D-2
- Operation = Extractive Distillation
- Number of stages = 10
- Feed stages = 5
- Condenser = Total (Liquid product)
- Reboiler = Partial (Liquid product)
- Condenser pressure = 101325 N/m²
- Column pressure = Constant pressure
- Top pressure = 101352 N/m²
- Top specification = Mole fraction of a component (0.95), Acetaldehyde
- Condenser duty name = Qcondenser
- Bottom specification = Boilup ratio (0.99)
- Reboiler duty name = Qreboiler
- Feed 1 = TOP
- TopProduct = ACETALDEHYDE
- BottomProduct = BOTTOM

9. Από την καρτέλα «**Exchangers**» εισάγουμε έναν «**Cooler**» με παραμέτρους:

- Inlet stream = BOTTOM

- Outlet Stream = RECYCLE FEED
- Energy stream = ESTR-014
- Calculation type = Outlet Temperature
- Pressure drop = 0
- Efficiency = 100%
- Outlet Temperature = 25 °C

10. Από την καρτέλα «**Logical Ops**» εισάγουμε ένα «**Recycle Block**» με παραμέτρους:

- Inlet Stream = RECYCLE FEED
- Outlet Stream = RECYCLE FEED
- Maximum iterations = 50
- Mass flow = 36 kg/h
- Temperature = 0.1 °C
- Pressure = 1e-06 bar

11. Από την καρτέλα «**Mixers/Splitters**» εισάγουμε έναν «**Mixer**» με παραμέτρους:

- Inlet Stream 1 = FEED RECOVERY
- Inlet Stream 2 = RECYCLE FEED
- Outlet Stream = FEED

12. Πηγαίνουμε στην στήλη «**D-1**» και αλλάζουμε το Feed 2 σε «**FEED**».

13. Εισάγουμε «**Master Property Table**» με τις ροές ρεύματος:

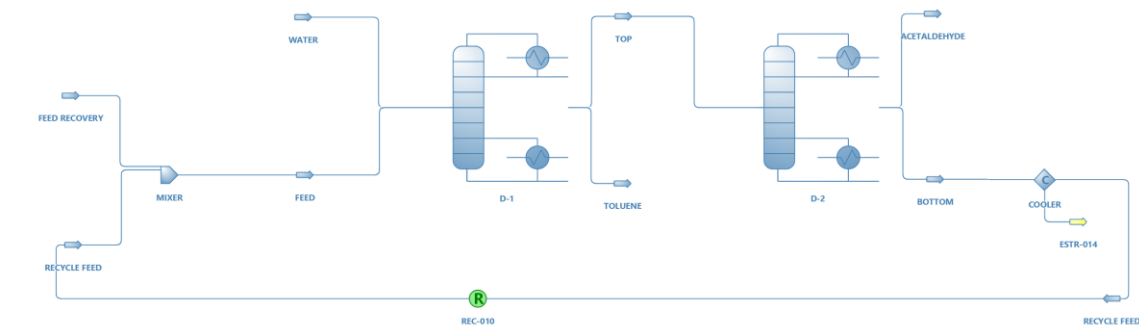
- WATER
- TOP
- TOLUENE
- RECYCLE FEED
- FEED RECOVERY
- FEED
- BOTTOM
- ACETALDEHYDE

και με τις εξής παραμέτρους:

- Temperature

- Pressure
- Molar flow
- Molar flow (Mixture) / Acetaldehyde
- Molar fraction (Mixture) / Toluene

Τι παρατηρείτε;



Master Property Table									
Object	WATER	TOP	TOLUENE	RECYCLE FEED	FEED RECOVERY	FEED	BOTTOM	ACETALDEHYDE	
Temperature	25	99,6928	110,243	25	25	25,0001	101,249	22,4439	C
Pressure	1,01325	1,01325	1,01325	1,01325	1,01325	1,01325	1,01325	1,01325	bar
Molar Flow	108,961	9042,66	20,9401	8980,1	61,5613	8954,64	8980,1	62,5653	kmol/h
Molar Fraction (Mixture) / Acetaldehyde	0,15	0,00657375	9,37742E-19	7,97027E-07	0,7	0,00481315	7,97027E-07	0,95	
Molar Fraction (Mixture) / Toluene	0,15	0,160146	0,99	0,161241	0,3	0,16221	0,161241	0,00289473	

Σχήμα 1. Το διάγραμμα ροής της 6ης εργαστηριακής άσκησης.

Αναφορές

[1] Unit Operations of Chemical Engineering by Warren L. McCabe, Julian C. Smith, Peter Harriott, 7 Edition, McGraw Hill Education.