



“Σχεδιασμός Χημικών Βιομηχανιών και Διεργασιών (ΕΤΥ 608)”



**Φυλλάδιο εργαστηριακών ασκήσεων με χρήση του
προγράμματος DWSIM – Open Source Process Simulator**

Διδάσκων: Καθ. Δημήτριος Ι. Φωτιάδης

Βοηθοί εργαστηρίου: Βασίλειος Πεζούλας, Γρηγόρης Γρηγοριάδης

Πίνακας Περιεχομένων

1° Εργαστήριο Σχεδιασμού Χημικών Βιομηχανιών και Διεργασιών	3
2° Εργαστήριο Σχεδιασμού Χημικών Βιομηχανιών και Διεργασιών	7
3° Εργαστήριο Σχεδιασμού Χημικών Βιομηχανιών και Διεργασιών	10
4° Εργαστήριο Σχεδιασμού Χημικών Βιομηχανιών και Διεργασιών	14
5° Εργαστήριο Σχεδιασμού Χημικών Βιομηχανιών και Διεργασιών	18
6° Εργαστήριο Σχεδιασμού Χημικών Βιομηχανιών και Διεργασιών	23
7° Εργαστήριο Σχεδιασμού Χημικών Βιομηχανιών και Διεργασιών	26
8° Εργαστήριο Σχεδιασμού Χημικών Βιομηχανιών και Διεργασιών	32

1^ο Εργαστήριο Σχεδιασμού Χημικών Βιομηχανιών και Διεργασιών

Τίτλος: “Εισαγωγή σε βασικές έννοιες - Τυπικός διαχωρισμός υγρής και αέριας φάσης από αντιδραστήρια”

Θα προσομοιώσουμε μια απλή διαδικασία διαχωρισμού υγρού από ατμό χρησιμοποιώντας 3 μονάδες.

Ανοίγουμε το πρόγραμμα **DWSIM**.

1. Δημιουργούμε μια νέα προσομοίωση: **File -> New Steady-state Simulation**. Στην οθόνη μας εμφανίζεται το **Simulation Configuration Wizard**. Μέσω αυτού, ο χρήστης μπορεί να ορίσει:
 - Τα στοιχεία - αντιδραστήρια - της προσομοίωσης («**Compounds**»).
 - Το πακέτο που εμπεριέχει τις εξισώσεις υπολογισμού των θερμοδυναμικών ιδιοτήτων της μοντελοποίησης μας («**Property Package**») και τέλος.
 - Τις μονάδες μέτρησης του συστήματος («**System of Units**»).
2. Πηγαίνουμε στην καρτέλα «**Compounds**» και προσθέτουμε τα παρακάτω στοιχεία (αντιδραστήρια) για την προσομοίωσή μας:
 - Methane (ChemSep Database)
 - Ethane (ChemSep Database)
 - Propane (ChemSep Database)
 - Isobutene (ChemSep Database)
 - N-Hexane (ChemSep Database)
3. Πηγαίνουμε στην καρτέλα «**Property Package**» η οποία περιέχει όλες τις απαραίτητες μεθόδους και σχέσεις για να υπολογίσουμε την θερμοδυναμική ισορροπία και τις ιδιότητες του μίγματος κατά τη διάρκεια της διαδικασίας μοντελοποίησης. Θα επιλέξουμε την εξίσωση *Peng-Robinson (PR)* γιατί το σύστημα που θέλουμε να μοντελοποιήσουμε περιέχει μόνο υδρογονάνθρακες και πατάμε την επιλογή **Add**.

4. Πηγαίνουμε στην καρτέλα «**System of Units**» και επιλέγουμε το σύστημα μονάδων το σύστημα *CGS*.
5. Τέλος πατάμε **Finish** και μεταφερόμαστε στον χώρο εργασίας της προσομοίωσης.

Προσθέτουμε μια ροή υλικού (material stream) από την καρτέλα «**Streams**» στο κάτω μέρος της οθόνης. Το Material stream αντιπροσωπεύει τις εισροές και τις εκροές της διαδικασίας προσομοίωσης. Για να προσθέσουμε μια ροή (ή αλλιώς ένα ρεύμα) στον χώρο εργασίας επιλέγουμε το σύμβολο Material stream και το σέρνουμε στο κέντρο.

6. Κάνουμε κλικ στο Material stream (MSTR-000) και επιλέγουμε στην καρτέλα «**Input Data**» - > «**Compound Amounts**» για να εισάγουμε τις εξής αναλογίες για τα αντιδραστήρια της προσομοίωσης:
 - Methane = 0.2
 - Ethane = 0.2
 - Propane = 0.2
 - Isobutene = 0.2
 - N-Hexane = 0.2

Προσοχή: Το άθροισμα των αναλογιών πρέπει να ισούται με 1 (ισοζύγιο).

Μόλις εισάγουμε τα στοιχεία, πατάμε **Accept changes**.

7. Έπειτα πηγαίνουμε στην καρτέλα «**Input Data**» -> «**Stream Conditions**» και εισάγουμε τις ακόλουθες τιμές:
 - Temperature = 36°C
 - Pressure = 2 atm
 - Mass flow rate = 10000 g/s

Το DWSIM θα υπολογίσει τη διανομή των ενώσεων και τις ιδιότητες του μίγματος.

8. Θα χρησιμοποιήσουμε έναν σωλήνα εκκένωσης (**Separator Vessel**) για να διαχωρίσουμε τον ατμό από το υγρό στην είσοδο. Για να προσθέσουμε έναν **Separator Vessel** στον χώρο εργασίας επιλέγουμε το αντίστοιχο σύμβολο από την καρτέλα «**Separators/Tanks**» στο κάτω μέρος της οθόνης και το σέρνουμε στο κέντρο. Επιστρέφουμε στο **Separator Vessel** και εισάγουμε τα εξής στοιχεία (αριστερά στο «**Connections**»):

- Inlet Stream 1 = MSTR-000
- Vapor Stream = Vapor
- Light Liquid Stream = Liquid

Εκτελούμε το διάγραμμα ροής πατώντας την επιλογή “**Solve Flowsheet**”-F5 και βλέπουμε ότι από τα 10000 g/s μίγματος έχουμε 8598.47 g/s mass flow ατμού (Vapor stream) και 1401.53 g/s mass flow υγρού (Liquid stream).

9. Στο σημείο αυτό θα προσθέσουμε μια φυγοκεντρική αντλία (**Centrifugal Pump**) από την καρτέλα «**Pressure changers**» για να αυξήσουμε την πίεση του υγρού στην έξοδο στις 10 atm (το συνδέω με το Liquid) με τις εξής παραμέτρους:

- Pressure increase = 10 atm
- Inlet Stream = Liquid
- Outlet Stream = Liquid_2

Η αντλία ωστόσο χρειάζεται ενέργεια για να αποθηκεύσει το ποσό ενέργειας που κατανάλωσε για να αυξήσουμε την πίεση του υγρού στον ρεύμα υγρού. Η ενέργεια αυτή είναι η θερμότητα. Για να προσθέσουμε μια ροή ενέργειας επιλέγουμε το **Energy stream** και το σέρνουμε στο κέντρο. Μετονομάζουμε την ροή ενέργειας σε **Pump_power** και την ενώνουμε με την αντλία επιλέγοντας την και θέτοντας:

- Energy Stream = Pump_power

10. Τέλος, θα προσθέσουμε έναν συμπυκνωτή (**Compressor**) από την καρτέλα «**Pressure changers**» για να αυξήσουμε την πίεση του ατμού στο ρεύμα ατμού από τις 2 atm στις 25 atm (το συνδέω με το Vapor) με τις εξής παραμέτρους:

- Outlet Pressure = 25 atm
- Inlet Stream = Vapor
- Outlet Stream = Vapor_2

Όπως και πριν εισάγουμε μια ροή ενέργειας με όνομα **Comp_power** και θέτουμε:

- Energy Stream = Comp_power

Το αποτέλεσμα είναι ο ατμός να θερμανθεί εξαιτίας της αύξησης της πίεσης.

Παρατηρήστε τα αποτελέσματα στην έξοδο Liquid_2, Vapor_2.

2^ο Εργαστήριο Σχεδιασμού Χημικών Βιομηχανιών και Διεργασιών

Τίτλος: “Μοριακή μίξη και διαχωρισμός της αιθανόλης από το νερό”

Θα προσομοιώσουμε μια διαδικασία μοριακής μίξης και διαχωρισμού νερού-αιθανόλης.

Ανοίγουμε το πρόγραμμα **DWSIM**.

Ορισμός αρχικών συνθηκών προσομοίωσης και ρευμάτων ροής νερού και αιθανόλης

1. Δημιουργούμε μια νέα προσομοίωση: **File -> New Steady-State Simulation** και ορίζουμε τα εξής:
 - **Database Compounds:**
 - Water (H₂O),
 - Ethanol (C₂H₅OH)
 - **Property package:** Peng Robinson (PR)
 - **Units system:** CGS system
2. Εισάγουμε «**material stream**» και μετονομάζουμε την μονάδα σε «**Water_inlet**». Πηγαίνουμε στην καρτέλα «**Input Data**» αριστερά στον πίνακα με τις πληροφορίες του ρεύματος ροής του νερού και εισάγουμε στην υπό-καρτέλα «**Compound amounts**» τα ισοζύγια:
 - Water = 1
 - Ethanol = 0
3. Επιστρέφουμε στην υπό-καρτέλα «**Stream Conditions**» και ορίζουμε τις εξής συνθήκες:
 - Temperature = 25
 - Pressure = 1 atm
 - Molar flow rate = 50 mol/s

4. Εισάγουμε ένα «**Material stream**» και έπειτα μετονομάζουμε την μονάδα σε «**Ethanol_inlet**». Πηγαίνουμε στην καρτέλα «**Input Data**» αριστερά στον πίνακα με τις πληροφορίες του ρεύματος ροής της αιθανόλης και εισάγουμε στα «**Compound amounts**» τα ισοζύγια:

- Water = 0
- Ethanol = 1

Επιστρέφουμε στην υπό-καρτέλα «**Stream Conditions**» και ορίζουμε τις εξής συνθήκες:

- Temperature = 25
- Pressure = 1 atm
- Molar flow rate = 50 mol/s

Εισάγουμε έναν «**Mixer**» από την καρτέλα «**Mixers/Splitters**» και θέτουμε:

- Inlet Stream 1 = Water_inlet
- Inlet Stream 2 = Ethanol_inlet
- Generate (outlet) = Mix_outlet

5. Σε αυτό το βήμα θα εισάγουμε έναν πίνακα ιδιοτήτων. Πηγαίνουμε στην επιλογή «**Insert**» στην γραμμή εργασιών του DWSIM και επιλέγουμε «**Master Property Table**». Έπειτα πηγαίνουμε στα «**Objects**» και επιλέγουμε να εμφανίσουμε τις ροές:

- Water_inlet,
- Ethanol_inlet,
- Mix_outlet,

με τα εξής «**Properties**» για κάθε ροή:

- Temperature, Pressure, Mass Flow, Molar Flow, Volumetric Flow.

6. Στην συνέχεια, πηγαίνουμε στην καρτέλα «**Spreadsheet**» του βασικού χώρου εργασίας για να διεξάγουμε υπολογισμούς. Πηγαίνουμε στο κελί C5 «**Import flowsheet object property**»

και εμφανίζουμε την παράμετρο «**Mass Flow**» από την ροή «**Water_inlet**». Ονομάζουμε την τιμή w-mass (0.90075 Kg/s). Επαναλαμβάνουμε την ίδια διαδικασία για το «**Ethanol_inlet**» στο κελί C6 και ονομάζουμε την τιμή e-mass (2.303422 Kg/s). Υπολογίζουμε το άθροισμα στο κελί C7 (3.204186 Kg/s). Βεβαιωνόμαστε ότι το άθροισμα των δύο mass flows ισούται με το mass flow που αναγράφεται στην έξοδο του «**Mix_outlet**» (3204.19 g/s ή 3.2041 Kg/s). Το επιβεβαιώνουμε και από τον «**Master Property Table**». Το ίδιο παρατηρείστε και για το «**Mass Flow**» (100 mol/s).

7. Πηγαίνουμε στην καρτέλα «**Results -> Create Report**» και επιλέγουμε «**Material Streams**» και «**Mixers**» για να τα συμπεριλάβουμε στα τελικά αποτελέσματα της μελέτης. Επιλέγουμε να εμφανίσουμε μόνο «**Conditions, molar composition**» και «**Include mixture properties**». Τέλος πατάμε «**View**» και αποθηκεύουμε το «**Extended report**» σε .txt μορφή.
8. Εισάγουμε έναν «**Splitter**» από την παλέτα μας με τις ακόλουθες επιλογές:
 - Inlet Stream = Mix_outlet
 - Generate Outlet Stream 1 = Mash
 - Generate Outlet Stream 2 = Reject
 - Calculation type = Stream Mass Flow Specs
 - Stream 1 Flow Spec = 700 g/s (ενδεικτικά ή ότι θέλουμε)

Παρατηρείστε την ροή εξόδου «**Mash**».

3^ο Εργαστήριο Σχεδιασμού Χημικών Βιομηχανιών και Διεργασιών

Τίτλος: “Διαχωρισμός υγρής και αέριας φάσης, διαχωρισμός φάσεων και ενσωμάτωση μονάδας ανακύκλωσης”

1. Ανοίγουμε το πρόγραμμα **DWSIM** και από την επιλογή **File -> Open** εισάγουμε το αρχείο της πρώτης εργαστηριακής άσκησης (με κατάληξη .dwxmz).
2. Θα επιστρέψουμε ένα μέρος του αερίου στο σωλήνα. Για να χωρίσουμε το αέριο ρεύμα σε δύο θα τοποθετήσουμε την μονάδα «**Splitter**» με σκοπό το ένα από αυτά να επιστρέψει στην μονάδα διαχωρισμού.
 - Inlet Stream = Vapor_2
 - Outlet Stream 1 = Ret_Vapor
 - Outlet Stream 2 = Out_Vapor

Από την καρτέλα «**Calculation Parameters**» επιλέγουμε «**Stream Split Ratios**» και ορίζουμε τις εξής αναλογίες:

- Stream 1 flow spec (Ret_Vapor) = 0.05
- Stream 2 flow spec (Out_Vapor) = 0.95

Τι παρατηρείτε όσον αφορά τα molar flow rates?

3. Εισάγουμε την μονάδα «**Recycle**» από την καρτέλα «**Logical Ops**» και θέτουμε τα εξής:
 - Inlet Stream = Ret_Vapor
 - Outlet Stream = Ret_Vapor_Recycle
 - Mass flow = 10
 - Temperature = 0
 - Pressure = 9.86 E-07

Στην μονάδα «**Recycle**» κάνουμε δεξί κλικ και πατάμε “**Invert horizontally**” για διευκόλυνση οπτικοποίησης του διαγράμματος ροής.

4. Το ρεύμα εξόδου στο «**Recycle**» (**Ret_Vapor_Recycle**) χρειάζεται κάποιες αρχικές τιμές για να γίνουν οι υπολογισμοί από το DWSIM. Πρέπει να βάλουμε τιμές έτσι ώστε να ορίσουμε το τελικό προϊόν εξόδου της ανακύκλωσης, σε αποτελέσματα που επιθυμούμε να έχουμε. Πατάμε πάνω στο «**Ret_Vapor_Recycle**» στο «**Compound Amounts**» και θέτουμε το τελικό ισοζύγιο να εμπεριέχει μόνο methane και ethane:

- Methane = 0.5
- Ethane = 0.5
- Temperature = 170 °C

5. Αφού αποσυνδέσουμε από τον «**Separator**» το «**Inlet Stream**» εισάγουμε έναν «**Mixer**» με τις παρακάτω παραμέτρους:

- Inlet Stream 1 = Ret_Vapor_Recycle
- Inlet Stream 2 = Feed
- Outlet Stream = Mix

Τι παρατηρείτε όσον αφορά τα molar flow rates?

6. Επιλέγουμε τον «**Separator**» και θέτουμε:

- Inlet Stream = Mix

Στη συνέχεια θα διαχειριστούμε το ρεύμα («**Out_Vapor**») από την έξοδο του «**Splitter**».

7. Από την καρτέλα «**Exchangers**» εισάγουμε την μονάδα «**Cooler**» για να ελαττώσουμε την θερμοκρασία του αερίου στους 30°C:

- Inlet stream = Out_Vapor
- Outlet stream = Out_Vapor_Cooled
- Energy stream = Cool_power
- Calculation type = Outlet Temperature

- Outlet temperature = 30°C
8. Ο σκοπός μας είναι να διαχωρίζουμε το υγρό από το αέριο στην έξοδο του «**Cooler**» αφού το διαστείλουμε κατεβάζοντας την πίεση στις 12 atm. Από την καρτέλα «**Pressure Changers**» εισάγουμε την μονάδα «**Valve**» με τις ακόλουθες παραμέτρους:
- Inlet stream = Out_vapor_cooled
 - Outlet stream = Out_vapor_cooled_press
 - Calculation mode = Outlet Pressure
 - Outlet pressure = 12 atm

Τι παρατηρείτε στην ροή εξόδου «**Out_vapor_cooled_press**»;

9. Από την καρτέλα «**Separators/Tanks**» εισάγουμε την μονάδα «**Separator vessel**» με τις ακόλουθες παραμέτρους:
- Inlet stream = Out_vapor_cooled_press
 - Vapor stream = Vapor_2_1
 - Liquid stream = Liquid_2_1

Παρατηρείστε την ροή του υγρού και την ροή του αερίου.

10. Από την καρτέλα «**Mixers/Splitters**» εισάγουμε την μονάδα «**Mixer**» με τις ακόλουθες παραμέτρους:
- Inlet stream 1 = Liquid_2_1
 - Inlet stream 2 = Liquid_2
 - Outlet stream = Liquid_final

Παρατηρείστε την ροή μίξης.

11. Δημιουργούμε ένα «**Master Property Table**» για τα ρεύματα:
- Out_vapor
 - Out_vapor_cooled

- Vapor_2
- Liquid_2
- RET_Vapor
- RET_Vapor_Recycle

με τα εξής «**Properties**» για κάθε ροή:

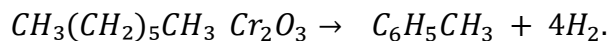
- Temperature, Pressure, Mass Flow, Molar Flow, Volumetric Flow, Mixture Density.

Με αυτόν τον τρόπο συνδέουμε τις νέες μονάδες με το σύστημα που υλοποιήσαμε στο 1^ο εργαστήριο έχοντας επιπλέον λειτουργία για **Vapor Recycle**.

4^ο Εργαστήριο Σχεδιασμού Χημικών Βιομηχανιών και Διεργασιών

Τίτλος: “Μονάδα παραγωγής τολουολίου με αφυδρογόνωση *n*-επτανίου”

Η **αφυδρογόνωση (dehydrogenation)** είναι μια χημική αντίδραση που περιλαμβάνει την απομάκρυνση του υδρογόνου, συνήθως από ένα οργανικό μόριο. Είναι το αντίστροφο της υδρογόνωσης. Σε αυτό το εργαστήριο θα σχεδιάσουμε μια διεργασία παραγωγής τολουολίου ($C_6H_5CH_3$) με αφυδρογόνωση επτανίου ($CH_3(CH_2)_5CH_3$). Το τολουόλιο παράγεται από *n*-επτάνιο με αφυδρογόνωση χρησιμοποιώντας καταλύτη Cr_2O_3 . Η αντίδραση δίνεται παρακάτω:



Σε αυτήν τη διαδικασία το τολουόλιο σχηματίζεται μαζί με το υδρογόνο όπως φαίνεται στην παραπάνω αντίδραση. Το διάγραμμα ροής της διαδικασίας της αφυδρογόνωσης δείχνει τη μετατροπή του *n*-επτανίου σε τολουόλιο χρησιμοποιώντας έναν καταλυτικό αντιδραστήρα που εισάγεται στην παραπάνω αντίδραση. Η διαδικασία παραγωγής τολουολίου ξεκινάει με την θέρμανση του *n*-επτανίου από 65 έως 800°F με την χρήση θερμοαντήρα. Έπειτα, το ρεύμα ροής τροφοδοτείται στον καταλυτικό αντιδραστήρα, ο οποίος λειτουργεί ισοθερμικά και μετατρέπει το 15 mol% του *n*-επτανίου σε τολουόλιο. Η εκροή του ρεύματος ροής ψύχεται στους 65°F και τροφοδοτείται σε μια μονάδα διαχωρισμού. Υποθέτοντας ότι όλες οι μονάδες του διαγράμματος ροής λειτουργούν υπό ατμοσφαιρική πίεση, ο ρυθμός ροής των ρευμάτων καθώς και οι άλλες ιδιότητες προσαρμόζονται κατάλληλα σε κάθε ροή ρεύματος [1].

Ανοίγουμε το πρόγραμμα **DWSIM**.

1. Δημιουργούμε μια νέα προσομοίωση: **File -> New Steady-state simulation**.
2. Από την καρτέλα «**Compounds**» προσθέτουμε τα εξής στοιχεία-αντιδραστήρια:
 - N-heptane
 - Toluene
 - Hydrogen

3. Από την καρτέλα «**Property Packages**» επιλέγουμε την εξίσωση επίλυσης «**Peng-Robinson**». Από την καρτέλα «**System of Units**» επιλέγουμε «**C5**» και αλλάζουμε την **πίεση (pressure)** από **bar** σε **atm** και την **θερμοκρασία (temperature)** από **°C** σε **°F**. Τέλος πατάμε «**Finish**».
4. Από το βασικό μενού επιλέγουμε «**Settings**» και πηγαίνουμε στην καρτέλα «**Reactions**» και έπειτα οδηγούμαστε στην καρτέλα «**Chemical Reactions**» και επιλέγουμε «**Add Reaction**» - > «**Conversion**» θέτοντας:
 - Name = Toluene Formation
 - Description = Production of toluene
 - Όλα τα στοιχεία στο include
 - Στο BC (βασικό στοιχείο) θέτουμε το N-heptane
 - N-heptane = -1 (αντιδρών)
 - Toluene = 1 (παράγωγο)
 - Hydrogen = 4
 - Phase = Vapor
 - Στο conversion θέτουμε την τιμή στο 15%
5. Εισάγουμε ένα «**Material Stream**» με ονομασία «**feed**» και θέτουμε τα εξής «**Compound Ammounts**»:

και «**Stream conditions**»:

- Pressure = 1 atm
- Temperature = 65 °F
- Mass flow rate = 3600 kg/h
- Molar flow = 35.9274 kmol/h
- Volumetric flow = 5.24272 m³/h

6. Από την καρτέλα «**Exchangers**» εισάγουμε έναν «**Heater**» (με ονομασία «**Heater**») με παραμέτρους:
 - Inlet Stream = feed
 - Outlet stream = heat_outlet
 - Energy Stream = heat_power
 - Calculation Type = Outlet Temperature
 - Pressure drop = 0
 - Efficiency = 100%
 - Outlet Temperature = 800 °F
7. Από την καρτέλα «**Reactors**» εισάγουμε έναν «**Conversion Reactor**» (με ονομασία «**C- Reactor**») με τις εξής παραμέτρους:
 - Inlet stream = heat_outlet
 - Outlet Stream 1 = reactor_outlet
 - Outlet Stream 2 = waste
 - Energy stream = reactor_power
 - Calculation Mode = Isothermic
8. Από την καρτέλα «**Exchangers**» εισάγουμε «**Cooler**» (με ονομασία «**Cooler**») τις εξής παραμέτρους:
 - Inlet stream = reactor_outlet
 - Outlet Stream = cool_outlet
 - Energy stream = cool_power
 - Calculation Type = Outlet Temperature
 - Pressure drop = 0
 - Efficiency = 100%
 - Outlet Temperature = 65 °F
9. Από την καρτέλα «**Separators/Tanks**» εισάγουμε «**Gas-Liquid Separator**» (με ονομασία «**Separator**») με παραμέτρους:
 - Inlet stream = cool_outlet

- Vapor Stream = vapor_outlet
- Light Liquid Stream = liquid_outlet
- Outlet Pressure Calculation = Inlet Minimum

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

- feed,
- heat_outlet,
- reactor_outlet,
- cool_outlet,
- vapor_outlet,
- liquid_outlet.

και με τις εξής παραμέτρους:

- Temperature, Pressure, Mass flow, Molar flow, Volumetric flow.

11. Εισάγουμε «**Property Table**» και θέτουμε στο object:

- C-Reactor,

με **Properties**:

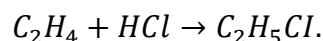
- Toluene Formation: Extent,
- N-heptane: Conversion.

Τι παρατηρείτε;

5^ο Εργαστήριο Σχεδιασμού Χημικών Βιομηχανιών και Διεργασιών

Τίτλος: “Μονάδα παραγωγής αιθυλοχλωριδίου”

Το χλωροαιθάνιο, γνωστό ως αιθυλοχλωρίδιο, χρησιμοποιείται κατά κόρον για την παραγωγή τετρααιθυλίου του μολύβδου, ενός πρόσθετου της βενζίνης. Είναι ένα άχρωμο, εύφλεκτο αέριο ή ψυκτικό υγρό, που χρησιμοποιείται κυρίως ως χημικό ενδιάμεσο σε διαλύτες, αερολύματα και στην αναισθησία. Χρησιμοποιείται ως διογκωτικός παράγοντας σε αφρώδη πλαστικά, στην παραγωγή αιθυλοκυτταρίνης και δρα ως παράγοντας αιθυλίωσης στην παρασκευή βαφών, χημικών και σε φαρμακευτικά προϊόντα. Σε αυτό το εργαστήριο θα σχεδιάσουμε μια διεργασία παραγωγής αιθυλοχλωριδίου. Μια μέθοδος για την παραγωγή αιθυλοχλωριδίου (C_2H_5Cl) είναι η αντίδραση αέριας φάσης του υδροχλωρίου (HCl) με αιθυλένιο (C_2H_4):



Το χλωριούχο αιθύλιο παράγεται με την αντίδραση της αέριας φάσης του HCl με αιθυλένιο (C_2H_4) πάνω από έναν καταλύτη χλωριούχου χαλκού και αυτή είναι μια εξαιρετικά εξώθερμη αντίδραση. Η παραγωγή χλωριούχου αιθυλίου θεωρείται ότι είναι μια steady state διαδικασία. Μια ροή τροφοδοσίας αποτελούμενη από 50 mol % HCl , 48 mol % C_2H_4 και 2 mol % N_2 στα 100 kmol/h με θερμοκρασία 25°C και πίεση 1 atm εισέρχεται στον αντιδραστήρα μετατροπής. Με βάση την δημοσίευση [1] μπορεί μέσω της παραπάνω διαδικασίας να επιτευχθεί η μετατροπή αιθυλοχλωριδίου με παράγοντα 96%. Ωστόσο τα αντιδρώντα που δεν συμμετείχαν στην αντίδραση πρέπει να διαχωριστούν από το τελικό προϊόν (που είναι αέριο). Ο διαχωρισμός του χλωριούχου αιθυλίου από τα αντιδρώντα που δεν αντέδρασαν μπορεί να επιτευχθεί με συμπίεση του αερίου στα 20 atm ακολουθούμενη από ψύξη στους 20°C που έχει ως αποτέλεσμα τον σχηματισμό δύο φάσεων με το αιθυλοχλωρίδιο να βρίσκεται σε υγρή φάση. Τα πιο πτητικά αντιδραστήρια μετά την ψύξη μπορούν εύκολα να διαχωριστούν από το υγρό χλωριούχο αιθύλιο. Αυτός ο διαχωρισμός μπορεί να επιτευχθεί χρησιμοποιώντας διαχωριστή αερίου-υγρού. Τα μη μετατρέπόμενα αντιδραστήρια και συγκεκριμένα το αιθυλένιο, το HCl και το

άζωτο ανακυκλώνονται πίσω στον μίκτη. Για να αποτραπεί η συσσώρευση αδρανών στο σύστημα, ένα μέρος του ρεύματος ανακύκλωσης αποσύρεται ως ρεύμα καθαρισμού [2].

1. Δημιουργούμε μια νέα προσομοίωση: **File -> New Steady-state simulation.**
2. Από την καρτέλα «**Compounds**» προσθέτουμε τα εξής στοιχεία-αντιδραστήρια:
 - Ethylene
 - Hydrogen chloride
 - Nitrogen
 - Ethyl chloride
3. Από την καρτέλα «**Property Packages**» επιλέγουμε την εξίσωση επίλυσης «NRTL».
4. Από την καρτέλα «**System of Units**» επιλέγουμε «**C5**» και θέτουμε:
 - Temperature = °C
 - Mass flow rate = Kg/h
 - Pressure = atm
 - Molar flow rate = kmol/h
5. Από το βασικό μενού επιλέγουμε «**Settings**» και πηγαίνουμε στην καρτέλα «**Reactions**» και έπειτα οδηγούμαστε στην καρτέλα «**Chemical Reactions**» και επιλέγουμε «**Add Reaction**» - > «**Conversion**» θέτοντας:
 - Name = EC.
 - Description = Conversion of ethylene and hydrogen chloride to ethyl chloride.
 - Επιλέγουμε **όλα** τα στοιχεία στο **Include**.
 - Στο **BC** (βασικό στοιχείο) επιλέγουμε μόνο το **Ethylene**.
 - Ορίζουμε τους **στοιχειομετρικούς συντελεστές** ως εξής:
 - **Ethylene** = -1 (αντιδρών).
 - **Hydrogene Chloride** = -1 (αντιδρών).
 - **Nitrogen** = 0.
 - **Ethyl Chloride** = 1 (παράγωγο).
 - **Phase** = Vapor.
- Στο **Conversion** θέτουμε την τιμή ίση με 90.

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

- Object = feed
- Pressure = 1 atm
- Temperature = 25 °C
- Molar Flow = 100 kmol/h (Mass flow rate = 3225.63 kg/h)

και τα εξής «**Compound Amounts**»:

- Hydrogene chloride = 0.5
- Ethylene = 0.48
- Nitrogen = 0.02
- Ethyl Chloride = 0

7. Από την καρτέλα «**Reactors**» εισάγουμε έναν «**Conversion Reactor**» με παραμέτρους:

- Object = C-Reactor
- Inlet stream = feed
- Outlet Stream 1 = reactor_outlet
- Outlet Stream 2 = waste
- Energy stream = reactor_power

8. Από την καρτέλα «**Pressure Changers**» εισάγουμε έναν «**Compressor**» με παραμέτρους:

- Object = Compressor
- Inlet stream = reactor_outlet
- Outlet Stream = comp_outlet
- Energy stream = comp_power
- Outlet Pressure = 20 atm
- Adiabatic Efficiency = 75%

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

- Object = Cooler
- Inlet stream = comp_outlet
- Outlet Stream = cool_outlet

- Energy stream = cool_power
- Calculation type = Outlet Temperature
- Pressure drop = 0
- Efficiency = 100%
- Outlet Temperature = 20 °C

10. Από την καρτέλα «**Separators/Tanks**» εισάγουμε «**Gas-Liquid Separator**» με παραμέτρους:

- Object = Separator
- Inlet stream = cool_outlet
- Vapor Stream = vapor
- Light Liquid Stream = ethyl_chloride
- Outlet Pressure Calculation = Inlet Minimum

11. Από την καρτέλα «**Mixers/Splitters**» εισάγουμε ένα «**Splitter**» με παραμέτρους:

- Object = Splitter
- Inlet Stream = vapor
- Outlet stream 1 = splitter_outlet
- Outlet stream 1 = purge_stream

12. Από την καρτέλα «**Pressure Changers**» εισάγουμε έναν «**Expander**» με παραμέτρους:

- Inlet Stream = splitter_outlet
- Outlet stream = exp_outlet
- Energy Stream = exp_power
- Calculation Type = Outlet Pressure
- Thermodynamic Process = Adiabatic
- Outlet Pressure = 1 atm
- Adiabatic Efficiency = 100%

13. Από την καρτέλα «**Exchangers**» εισάγουμε έναν «**Heater**» με παραμέτρους:

- Object = Heater
- Inlet Stream = exp_outlet
- Outlet stream = heat_outlet

- Energy Stream = heat_power
- Calculation Type = Outlet Temperature
- Pressure drop = 0
- Efficiency = 100%
- Outlet Temperature = 25 °C

14. Από την καρτέλα «**Logical Ops**» εισάγουμε έναν «**Recycle Block**» με παραμέτρους:

- Object = Recycle
- Inlet Stream = heat_outlet
- Outlet Stream = rec_outlet

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

- Object = Mixer
- Inlet Stream 1 = feed
- Inlet Stream 2 = rec_outlet
- Outlet Stream = mix_out

16. Πηγαίνουμε στον «**Reactor**» και αλλάζουμε το Inlet Stream σε «**Mix_Outlet**».

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

- feed, reactor_outlet, ethyl_chloride

και με τις εξής παραμέτρους:

- Temperature, Pressure, Mass flow, Molar flow.

Τι παρατηρείτε;

6^ο Εργαστήριο Σχεδιασμού Χημικών Βιομηχανιών και Διεργασιών

Τίτλος: “Αφαίρεση του ισοπεντάνιου από το ν-πεντάνιο”

Το ν-πεντάνιο είναι μια αλυσίδα με 5C. Στο τμήμα προετοιμασίας πρώτης ύλης μιας μονάδας παραγωγής φυσικής βενζίνης, το ισοπεντάνιο αφαιρείται από τη φυσική βενζίνη χωρίς βουτάνιο [3].

Θα προσομοιώσουμε μια διαδικασία απομόνωσης του ισομερούς ισοπεντάνιου από το ν-πεντάνιο. Ρεύμα τροφοδοσίας 100Kg διαχωρίζεται με αναλογία 0 και 55.5Kg/s στο ρεύμα που εισέρχεται σε μονάδα διαχωρισμού, όπου η ποσότητα ροής μάζας του ισοπεντανίου θα είναι 11.1Kg.

Ανοίγουμε το πρόγραμμα **DWSIM**.

Ορισμός αρχικών συνθηκών προσομοίωσης και ρευμάτων ροής νερού και αιθανόλης.

9. Δημιουργούμε μια νέα προσομοίωση: **File -> New Steady-State Simulation** και ορίζουμε τα εξής:

- **Database Compounds:**
 - N-pentane ($\text{CH}_3(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$)
 - Isopentane ($\text{CH}_3\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_3$)
- **Property package:** Peng Robinson (PR)
- **Units system:** SI

10. Εισάγουμε «**material stream**» και μετονομάζουμε την μονάδα σε «**Feed**». Πηγαίνουμε στην καρτέλα «**Input Data**» αριστερά στον πίνακα με τις πληροφορίες του ρεύματος ροής του νερού και εισάγουμε στην υπό-καρτέλα «**Compound amounts**» τα ισοζύγια:

- N-pentane = 0.8
- Isopentane = 0.2

11. Επιστρέφουμε στην υπό-καρτέλα «**Stream Conditions**» και ορίζουμε τις εξής συνθήκες:

- Temperature = 298.15 K
- Pressure = 101325.0 Pa
- Mass Flow= 100 Kg/s

12. Εισάγουμε έναν «**Splitter**» από την καρτέλα «**Mixers/Splitters**» και θέτουμε:

- Inlet Stream = Feed
- Outlet Stream 1 (Generate) = Outlet_1
- Outlet Stream 2 (Generate) = Outlet_2
- Calculation Type = Stream mass Flow Specs
- Stream 1 Flow Spec = 55.5Kg/s
- Stream 2 Flow Spec = 0Kg/s

13. Εισάγουμε έναν «**Compound Separator**» από την καρτέλα «**Separators/Tanks**» και θέτουμε:

- Inlet Stream = Outlet_1
- Outlet Stream 1 (Generate) = Side_stream
- Outlet Stream 2 (Generate) = Low_stream
- Separation Fractors = Isopentane Spec = 11.1%
- Energy stream = CS_power

14. Εισάγουμε έναν «**Mixer**» από την καρτέλα «**Mixers/Splitters**» και θέτουμε:

- Inlet Stream 1 = Low_stream
- Inlet Stream 2= Outlet_2
- Outlet Stream (Generate) = Final_stream

15. Σε αυτό το βήμα θα εισάγουμε έναν πίνακα ιδιοτήτων. Πηγαίνουμε στην επιλογή «**Insert**» στην γραμμή εργασιών του DWSIM και επιλέγουμε «**Master Property Table**». Έπειτα πηγαίνουμε στα «**Objects**» και επιλέγουμε να εμφανίσουμε τις ροές:

- Feed
- Outlet_1
- Outlet_2
- Side_stream
- Low_stream

- Final_stream

με τα εξής «**Properties**» για κάθε ροή:

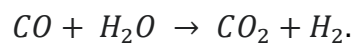
- Temperature, Pressure, Mass Flow, Molar Flow, Volumetric Flow, Molar flow (Mixture) / N-pentane, Molar Flow (Mixture) / N-pentane, Molar Flow (Mixture) / Isopentane, Mass Flow (Mixture) / Isopentane.

Τι παρατηρείτε;

7^ο Εργαστήριο Σχεδιασμού Χημικών Βιομηχανιών και Διεργασιών

Τίτλος: “Μονάδα παραγωγής υδρογόνου μέσω αντίδρασης μετατόπισης υδαταερίου”

Το υδρογόνο είναι μια από τις πιο ελπιδοφόρες πηγές ενέργειας. Το υδρογόνο είναι μια ευνοϊκή πηγή ενέργειας επειδή μπορεί να καεί, παρόμοια με τη βενζίνη και το φυσικό αέριο, ή να μετατραπεί σε ηλεκτρική ενέργεια σε μια κυψέλη καυσίμου χωρίς εκπομπές άνθρακα στο σημείο χρήσης. Η αντίδραση μετατόπισης υδάτινου αερίου είναι ένα σημαντικό μέρος της διαδικασίας αναμόρφωσης του μεθανίου με ατμό (Steam Methane Reforming - SMR), τα καυσαέρια μετά τη μεθανοποίηση έχουν μονοξείδιο του άνθρακα και μεγάλο μέρος του μη μετατρεπόμενου ατμού. Η μέθοδος παραγωγής υδρογόνου μέσω αντίδρασης μετατόπισης υδαταερίου (WGSR) αυξάνει την απόδοση υδρογόνου που παράγεται με αντίδραση μονοξειδίου του άνθρακα με τον εναπομείναντα ατμό. Η αντίδραση μετατόπισης υδαταερίου περιγράφει την αντίδραση μονοξειδίου του άνθρακα και υδρατμών προς σχηματισμό διοξειδίου του άνθρακα και υδρογόνου βάσει της παρακάτω αντίδρασης:



Αυτή η διαδικασία είναι σημαντική για δύο λόγους, πρώτον, αυξάνει την απόδοση. Δεύτερον, μετατρέπει το CO σε CO₂, επομένως αποφεύγεται η εκπομπή δηλητηριωδών αερίων CO. Το WGSR χωρίζεται σε δύο μέρη, το High Temperature Shift (HTS) με παράγοντα μετατροπής 80% και το Low Temperature Shift (LTS) με παράγοντα μετατροπής 100%. Το ρεύμα αερίων από την διαδικασία της SMR εισέρχεται στον αντιδραστήρα HTS που λειτουργεί στα 500-700K, όπου μετατρέπει τον εναπομείναντα ατμό κατά 35%, και στη συνέχεια η ροή ψύχεται στα 400K. Αργότερα, το ψυχρό ρεύμα μεταφέρεται στον αντιδραστήρα LTS ο οποίος λειτουργεί στα 300-400K για την αύξηση της απόδοσης H₂ κατά 2-3%. Η έξοδος του ατμού ψύχεται και αποστέλλεται σε έναν διαχωριστή, όπου ο υπόλοιπος ατμός συμπυκνώνεται στο νερό και το αέριο του προϊόντος απομακρύνεται [4].

1. Δημιουργούμε μια νέα προσομοίωση: **File -> New Steady-state simulation.**
2. Από την καρτέλα «**Compounds**» προσθέτουμε τα εξής στοιχεία-αντιδραστήρια:
 - Ethane
 - Oxygen
 - Nitrogen
 - Water
 - Hydrogen
 - Carbon monoxide
 - Carbon dioxide
3. Από την καρτέλα «**Property Packages**» επιλέγουμε την εξίσωση επίλυσης «**Peng-Robinson**».
4. Από την καρτέλα «**System of Units**» επιλέγουμε «**SI**» και θέτουμε:
 - Temperature = K
 - Mass flow rate = Kg/s
 - Pressure = Pa
 - Molar flow rate = mol/s
5. Από το βασικό μενού επιλέγουμε «**Settings**» και πηγαίνουμε στην καρτέλα «**Reactions**» και έπειτα οδηγούμαστε στην καρτέλα «**Chemical Reactions**» και επιλέγουμε «**Add Reaction**» - > «**Conversion**» θέτοντας:
 - Name = WSGR-HTS.
 - Description = Reaction for HTS.
 - Στο **Include** επιλέγουμε μόνο **Water, Hydrogen, Carbon monoxide, Carbon dioxide.**
 - Στο **BC** (βασικό στοιχείο) επιλέγουμε μόνο το **Water, Carbon monoxide.**
 - Ορίζουμε τους **στοιχειομετρικούς συντελεστές** ως εξής:
 - **Water** = -1 (αντιδρών).
 - **Carbon monoxide** = -1 (αντιδρών).
 - **Carbon dioxide** = 1 (προϊόν).
 - **Hydrogen** = 1 (προϊόν).
 - **Nitrogen** = 0.

- **Oxygen** = 0.
 - **Methane** = 0.
 - **Phase** = Vapor.
 - Στο **Conversion** θέτουμε την τιμή ίση με 80.
6. Από το βασικό μενού επιλέγουμε «Settings» και πηγαίνουμε στην καρτέλα «**Reactions**» και έπειτα **οδηγούμαστε** στην καρτέλα «Chemical Reactions» και επιλέγουμε «**Add Reaction**» - > «**Conversion**» θέτοντας:
- Name = WSGR-LTS.
 - Description = Reaction for LTS.
 - Στο **Include** επιλέγουμε μόνο **Water, Hydrogen, Carbon monoxide, Carbon dioxide**.
 - Στο **BC** (βασικό στοιχείο) επιλέγουμε μόνο το **Water, Carbon monoxide**.
 - Ορίζουμε τους **στοιχειομετρικούς συντελεστές** ως εξής:
 - **Water** = -1 (αντιδρών).
 - **Carbon monoxide** = -1 (αντιδρών).
 - **Carbon dioxide** = 1 (προϊόν).
 - **Hydrogen** = 1 (προϊόν).
 - **Nitrogen** = 0.
 - **Oxygen** = 0.
 - **Methane** = 0.
 - **Phase** = Vapor.
 - Στο **Conversion** θέτουμε την τιμή ίση με 100.
7. Εισάγουμε **ένα «Material Stream»** και θέτουμε ως «**Stream Conditions**» (όπως προέκυψαν από μια διαδικασία Steam Methane Reforming (SMR)):
- Object = feed_SMR
 - Pressure = 405300 Pa
 - Temperature = 617.15 K
 - Mass Flow = 0.085 kg/s (Molar flow = 4.709 mol/s)

και ως «**Compound Amounts**»:

- Methane = 0.016
 - Oxygen = 0.007
 - Nitrogen = 0.28
 - Water = 0.25
 - Hydrogen = 0.32
 - Carbon monoxide = 0.077
 - Carbon dioxide = 0.05
8. Από την καρτέλα «**Exchangers**» εισάγουμε «**Cooler**» με παραμέτρους:
- Object = Cooler-1
 - Inlet stream = feed_SMR
 - Outlet Stream = cool_outlet-1
 - Energy stream = cool_power-1
 - Calculation type = Outlet Temperature
 - Pressure drop = 0
 - Efficiency = 100%
 - Outlet Temperature = 589.15 K (316 °C)
9. Από την καρτέλα «**Reactors**» εισάγουμε έναν «**Conversion Reactor**» με παραμέτρους:
- Object = HTS-Reactor
 - Inlet stream = cool_outlet
 - Outlet Stream 1 = top-1
 - Outlet Stream 2 = bottom-1
 - Energy stream = HTS_power
10. Από την καρτέλα «**Exchangers**» εισάγουμε «**Cooler**» με παραμέτρους:
- Object = Cooler-2
 - Inlet stream = top-1
 - Outlet Stream = cool_outlet-2
 - Energy stream = cool_power-2
 - Calculation type = Outlet Temperature

- Pressure drop = 0
- Efficiency = 100%
- Outlet Temperature = 417.15 K (144 °C)

11. Από την καρτέλα «**Reactors**» εισάγουμε έναν «**Conversion Reactor**» με παραμέτρους:

- Object = LTS-Reactor
- Inlet stream = cool_outlet-2
- Outlet Stream 1 = top-2
- Outlet Stream 2 = bottom-2
- Energy stream = HTS_power

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

- Object = Cooler-3
- Inlet stream = top-2
- Outlet Stream = cool_outlet-3
- Energy stream = cool_power-3
- Calculation type = Outlet Temperature
- Pressure drop = 0
- Efficiency = 100%
- Outlet Temperature = 333.15 K (60 °C)

13. Από την καρτέλα «**Separators/Tanks**» εισάγουμε «**Gas-Liquid Separator**» με παραμέτρους:

- Object = Separator
- Inlet stream = cool_outlet-3
- Vapor Stream = hydrogen
- Light Liquid Stream = water
- Outlet Pressure Calculation = Inlet Maximum
- Override Sep Temperature = 298.15 K (25 °C)
- Energy Stream = sep_power

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

- feed_SMR,

- top-1,
- top-2,
- cool_outlet-1,
- cool_outlet-2,
- cool_outlet-3,
- water,
- hydrogen

και με τις εξής παραμέτρους:

- Temperature, Pressure, Mass flow, Molar flow.

Τι παρατηρείτε;

8^ο Εργαστήριο Σχεδιασμού Χημικών Βιομηχανιών και Διεργασιών

Τίτλος: “Μονάδα εκχυλιστικής απόσταξης για το διαχωρισμό ακεταλδεΐδης και τολουολίου ”

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 [5]. 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. % ακεταλδεΰδης 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;

Αναφορές

1. HYSYS: An Introduction to Chemical Engineering Simulation by Mohd. Kamaruddin Abd Hamid chapter-13 page no-146.
2. Nayef Ghasem, "Computational methods in Chemical Engineering," 1st Ed, Taylor and Francis Group, 2017
3. Basic Principles And Calculations In Chemical Engineering (8th Edition) by David Himmelblau & James.B.Riggs.
4. Stepić, R., Wick, C. R., Strobel, V., Berger, D., Vučemić-Alagić, N., Haumann, M., ... & Smith, D. M. (2019). Mechanism of the Water–Gas Shift Reaction Catalyzed by Efficient Ruthenium-Based Catalysts: A Computational and Experimental Study. *Angewandte Chemie International Edition*, 58(3), 741-745.
5. Unit Operations of Chemical Engineering by Warren L. McCabe, Julian C. Smith, Peter Harriott, 7 Edition, McGraw Hill Education.

Προτεινόμενη Βιβλιογραφία

- R. Sinnott and G. Towler, Chemical Engineering Design, Butterworth - Heinemann, Elsevier, Oxford, 6th Edition, 2020.
- Δ. Μαρίνος-Κουρής, Ζ. Μαρούλης, Σχεδιασμός Χημικών Βιομηχανιών, Παπασωτηρίου 1993.
- M.S. Peters, K.D. Timmerhaus, R.E. West, Σχεδιασμός και Οικονομική Μελέτη Εγκαταστάσεων για Μηχανικούς, μετάφραση Δ. Μαρίνος-Κουρής, Ζ. Μαρούλης, Μ. Κροκίδα, Εκδόσεις Τζιόλα, 2006.