

INTRODUKSJON TIL BRUK AV PROSESSIMULERINGSPROGRAMMET ASPEN PLUS

INTRODUCTION TO THE USE OF THE PROCESS SIMULATION SOFTWARE
ASPEN PLUS

TORBJØRN EIG SJØVIK

UNIVERSITETET FOR MILJØ- OG BIOVITENSKAP
INSTITUTT FOR MATEMATISKE REALFAG OG TEKNOLOGI
MASTEROPPGAVE 30 STP. 2013



Forord

Denne oppgaven er skrevet som en del av masterutdanningen i maskin og prosess ved Institutt for Matematiske realfag og Teknologi ved Universitetet for Miljø og Biovitenskap. Veileder for prosjektet har vært førsteamanuensis Odd-Ivar Lekang.

Oppgaven har bestått i å lage en introduksjon til prosessimuleringsprogrammet Aspen Plus med tanke på å ta dette i bruk i undervisningen ved IMT. Dette har blitt løst ved å gjennomføre ulike eksempler i programmet, og sammenlikne med håndberegninger.

Jeg valgte oppgaven på bakgrunn av at jeg hadde hørt om det liknende programmet HYSYS, å følte dette var noe om ville være nyttig og interessant å lære seg.

En takk må rettes til veileder Odd-Ivar Lekang som har bistått under prosjektet, men også professor John Mosbye som har vært svært delaktig i møter underveis.

Torbjørn Eig Sjøvik

Ås, 15.05.2013

Sammendrag

Denne masteroppgaven er en introduksjon i bruk av prosesssimuleringsprogrammet Aspen Plus, med tanke på framtidig bruk i prosessfagene ved institutt for matematiske realfag og teknologi ved Universitetet for Miljø og Biovitenskap. Målet var å finne ut om programmet er egnet å bruke i undervisning av prosessfag.

For å løse problemstillingen ble simuleringer i Aspen Plus satt opp og løst, med økende grad av vanskelighet. Dette resulterte i en brukerveiledning, som kan hjelpe nye brukere i å komme i gang med å bruke programmet.

Gjennom bruk av Aspen Plus har et bilde av vanskelighetsgraden tegnet seg. Brukerteskelen på programmet er ikke svært høy, og med grunnleggende kunnskap om prosessfag virker det sannsynlig at de fleste studenter vil kunne dra nytte av programmet.

På basis av erfaringene med Aspen Plus konkluderes det derfor med bruken av dette i undervisning virker mulig.

Abstract

This master thesis is an introduction to the use of the process simulation software Aspen Plus, for future use at IMT at the Norwegian University of Life Sciences. The aim has been to evaluate if the software is useful in the teaching process courses.

To solve this thesis, several simulations in Aspen Plus were set up and solved, with an increasing degree of difficulty. This resulted in a tutorial, which can help new users to get started using the software.

Through the use of Aspen Plus, a picture has been drawn of the difficulty of use. The threshold for using the software is quite low, and with basic knowledge of process theory, it seems likely that most students can draw use of the software.

On the basis of the experience with Aspen Plus, it is concluded that the use of this software in teaching is plausible.

Symboler og begreper

Det er i teksten brukt symboler på formen av en latinsk eller gresk bokstav, som symboliserer fysisk størrelse eller parameter (Tabell 1).

Tabell 1. Oversikt over symboler som er brukt i teksten, med forklaring og enhet.

Symbol	Beskrivelse	Enhet
x	Molfraksjon i væskefase	
y	Molfraksjon i gassfase	
α	Relativ flyktighet	
N	Antall trinn i destillasjonskolonne	
n	Stoffmengde	mol
P	Trykk	Pa eller bar
V	Volum	m ³
R	Den ideelle gasskonstanten	8,314472 m ³ *Pa/K*mol
T	Temperatur	°C, °F eller K
Z	Kompressibilitetsfaktor	
Q	Energi	kW

Begreper i Aspen Plus

I prosessimuleringsprogrammet Aspen Plus brukes begreper som ikke nødvendigvis er mye brukt utenfor programmet (Tabell 2).

Tabell 2. Forklaring på et lite utvalg av begreper man støter på i Aspen Plus som kan være greie å kunne.

Free water	Aspen Plus kan ta en separate vann-fase i systemer med en blanding av to væsker, kalt «free water». En del utsyr kan derfor ha utløp for vann utenom de ordinære utløpene. [1]
Pseudocomponents	Dette er komponentfraksjoner av oljeblanding, som er representert ved gjennomsnittlig kokepunkt. [2]
sequential modular (SM)	Den ordinære løsningsmetoden i Aspen Plus, der resultatet for hver utstyrsenhet blir beregnet separat, før det gjøres tilgjengelig for neste utstyrsenhet. [3]
equation-oriented (EO)	En modelleringsmetode tilgjengelig i Aspen Plus, der alle likninger for et system løses samtidig. Dette gir kortere simuleringstid, spesielt for systemer med resirkuleringsløyper. [4]

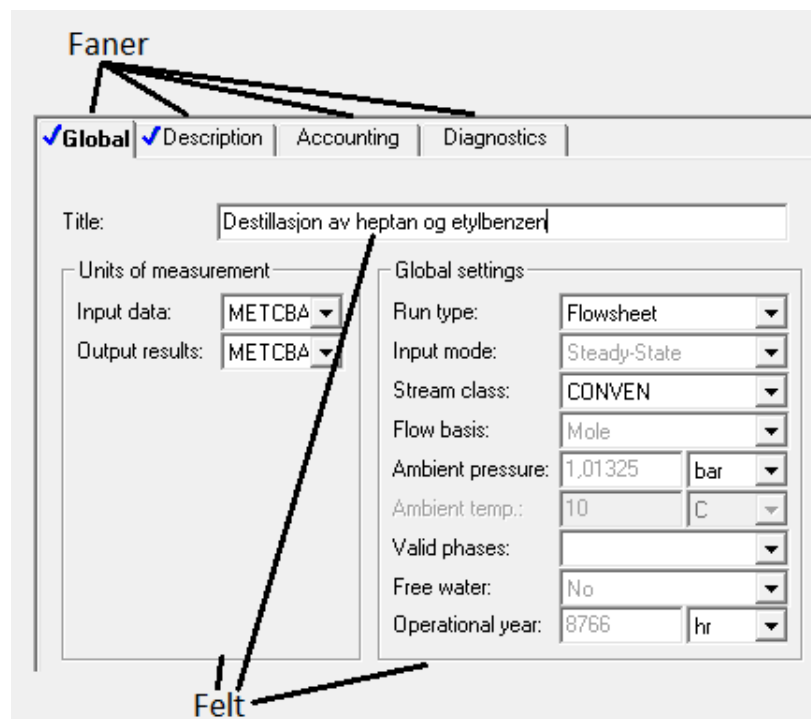
Generelle begreper

For å gjøre beskrivelser i teksten er det brukt ord som ikke uten videre er entydige (Tabell 3).

Tabell 3. Beskrivelse av ord som forekommer i teksten, og en forklaring på hva som menes med disse ordene.

Vindu	Grafisk brukergrensnitt for programmer som er åpne på datamaskinens. Brukes også om grafiske områder i et programs brukergrensnitt, som f.eks. «Process Flowsheet Window» og «Data Browser» i Aspen Plus.
Tast	Referer til en tast på datamaskinens tastatur
Knapp	Referer til et felt («knapp») i brukergrensnitt, som man trykker på med musepekeren
Dialogboks	Et vindu, eller en «boks», som brukes i et kort tidsrom for å gjennomføre enkelte handlinger eller valg. Denne dukker opp som følge av en handling brukeren har gjennomført, og er ikke blant de vinduene som ordinært er åpne i programmet

	brukergrensesnitt. Dialogboksen må (ofte) lukkes før man kan gjøre andre handlinger i programmet, eller lukkes av seg selv når man gjør et valg.
Fane	Brukes for å veksle mellom ulike sett av alternativer for input og resultater i et vindu (Figur 1).
Felt	I Aspen Plus er bl.a. alternativene for input i «data browser», avgrenset av en ramme med en beskrivende tittel(Figur 1). «Felt» brukes også om hvite områder som brukes til å innføre tekst eller tall.
Fraksjon	Andel av flerstoffblanding, med et bestemt kokepunktsområde



Figur 1 Skjerm bilde fra Aspen Plus. Viser eksempel på begrepene «faner» og «felt».

¹ Aspen Plus Help → Glossary F

² Aspen Plus Help → About Pseudocomponents

³ Aspen Plus Help → Glossary S

⁴ Aspen Plus Help → Glossary E

Innholdsfortegnelse

1. Innledning	2
2. Programpakken Aspen Plus	3
2.1. Bruk av programmet	3
2.2. Komponenter i simuleringen	8
2.3. Metoder for interaksjon mellom komponenter	9
2.4. Enhetsoperasjoner	12
2.5. Strømmer	15
2.6. Petroleum	16
2.7. Kjøre simulering	17
3. Binær destillasjon.....	19
3.1. Beskrivelse av prosess.....	19
3.2. Kokepunkt for væskeblanding	19
3.3. Estimering av kolonne.....	24
3.4. Detaljert simulering av kolonne.....	30
3.4.1. Resultat	38
3.4.2. Respons på endringer	40
3.5. Sammenlikning med håndberegninger.....	42
4. Destillasjon av multikomponentblanding	43
4.1. Om regneeksemplet.....	43
4.2. Oppsett av simulering	45
4.2.1. Resultat	51
5. Konklusjon.....	53
Anbefalinger.....	53
Videre arbeid.....	53
6. Referanser	54
7. Vedlegg	56

1. Innledning

Denne oppgaven er en introduksjon til prosesssimuleringsprogrammet Aspen Plus. Simuleringer av destillasjonskolonner blir brukt som eksempler på hvordan en simulering kan utføres i programmet. Bruk av prosesssimuleringsprogrammer er interessant av flere grunner. Man kan anvende regnemetoder som ikke er praktiske å bruke i håndberegninger, på grunn av det store regnearbeidet disse medfører. Mens man i håndberegninger gjerne forenkler prosessen man er interessert i, kan man i et program som Aspen Plus ta med flere variabler og gjøre mer detaljerte beregninger, slik at man kommer fram til mer detaljer om prosessen. For en stor prosess med mye forskjellig utsyr og mange strømmer, vil en endring av én strøm kunne føre til at mye av utstyret må ha en annen spesifisering og at sammensetningen av strømmer endres. Et prosesssimuleringsprogram kan løse mye av dette ved bare å kjøre en ny simulering, mens det kan føre til mye arbeid ved håndberegninger eller modeller i excel-ark. En kan derfor prøve ut mange forskjellige oppsett av en prosess, uten å bekymre seg for mye regnearbeid, slik at man heller kan konsentrere seg om at input og resultater er riktig.

Rent bortsett fra regnearbeidet, er en viktig side ved Aspen Plus at man har kjemisk data for et stort antall komponenter tilgjengelig i programmet. Ved håndberegninger kan være vanskelig å finne data for en komponent eller blanding f.eks. ved varierende trykk og temperatur. Siden så mye av data man trenger allerede er tilgjengelig i programmet, brukes mindre tid på å hente inn data, og man kan kanskje være mer kreativ ved å prøve ut en prosess med komponenter en ellers ikke hadde data for.

Prosessfagene ved Institutt for Matematiske realfag og Teknologi (IMT) ved Universitet for Miljø og Biovitenskap (UMB) bruker i dag ikke prosesssimuleringsprogram i undervisningen. Aspen Plus er interessant både for studenter og professorer ved IMT, som følge av de nevnte mulighetene programmet åpner innen beregninger. En annen fordel for både instituttet i seg selv og studentene ved instituttet, er at bruk av prosesssimuleringsprogram i forskning og undervisning kan øke interessen for disse ute i næringslivet. Denne type programmer er utbredt i prosessindustri verden over, og kan brukes innen f.eks. kjemisk industri, oljeproduksjon og matproduksjon.

Målsetningen for denne oppgaven er at den kan fungere som en introduksjon til programmet Aspen Plus, eller andre liknende programmer, for prosessfagene ved IMT, og som en vurdering av om programmet egner seg i undervisning av prosessfag.

Problemstilling

- Lage en introduksjon til Aspen Plus
- Vurdere om programmet egner seg i undervisning.

Begrensninger

- Underveis i brukerveiledningen gjennom simuleringene er ikke alle alternativer kommentert, ut i fra at de ikke har noe å si på resultatet, eller at andre verdier ikke er funnet.
- Inputmodusen «dynamic» har ikke blitt benyttet i denne oppgaven.

2. Programpakken Aspen Plus

Aspen Plus produseres av det amerikanske selskapet AspenTech. Dette selskapet oppsto på MIT for over 30 år siden, og er i dag en stor leverandør av programvare og tjenester til bl.a. kjemisk-, farmasøytisk- og petroleumsindustri [5].

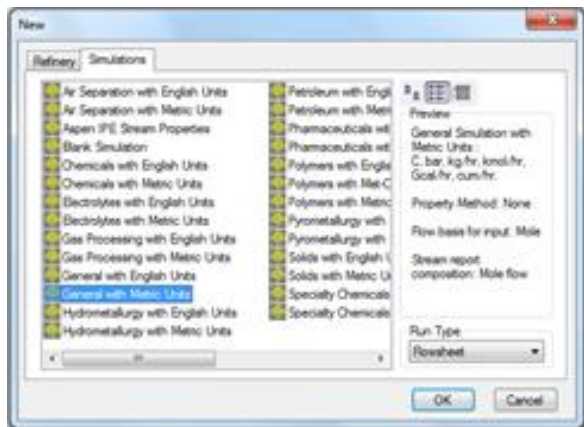
AspenONE er en programvarepakke levert av Aspen Tech, som inneholder mange små programmer for bruk i prosessindustri, i tillegg til de store prosessimuleringsprogrammene Aspen Plus og HYSYS. Det er programvareutgaven V7.3 av aspenONE som er brukt i denne oppgaven.

HYSYS er kanskje det mest kjente av de to prosessimuleringsprogrammene i aspenONE, og har nærmest blitt et begrep synonymt med prosessimuleringsprogram. Uten selv å ha brukt begge programmene, virker meningen blant andre brukere å være at Aspen Plus har et grafisk brukergrensesnitt som er lettere å bruke enn HYSYS.

Andre eksempler på konkurrerende prosessimuleringsprogram er ProSim[6], CHEMCAD[7] og PRO/II[8].

2.1. Bruk av programmet

Man finner programmet på startmenyen under AspenTech → Process Modeling V7.3 (avhenging av programvareversjon) → Aspen Plus → Aspen Plus User Interface. Man får da opp brukergrensesnittet til Aspen Plus, med en dialogboks hvor man kan velge å starte opp et prosjekt man har jobbet med og har lagret på maskinen, eller man kan velge mellom en blank simulering eller en simulering på basis av en mal. Om man ikke har noe lagret prosjekt, eller skal starte på et nytt prosjekt, kan man med fordel velge «template» (mal).



Figur 2. Skjerm bilde fra Aspen Plus. Viser dialogboks med oversikt over maler.

Om man velger template kommer man videre til en dialogboks (Figur 2) hvor man kan velge ulike maler, i to faner kalt «simulation» og «refinery». Malene har beskrivende navn som forteller hva de ulike er best egnet til, og en oversikt over egenskapene til den valgte mal. Forskjellene består av hvilke forhåndsvalgte enheter som benyttes, og det kan også være andre valg som er gjort. Det kan være hvilken basis strømninger skal være på (f.eks mol eller masse), hvilken form man får strømningsresultatene på og hvilken egenskapsmetode som brukes (se eget avsnitt). Det kan gjøre det litt lettere å sette opp en simulering ved å velge «riktig» mal, men man binder seg ikke til noe, da man kan endre alle valg på

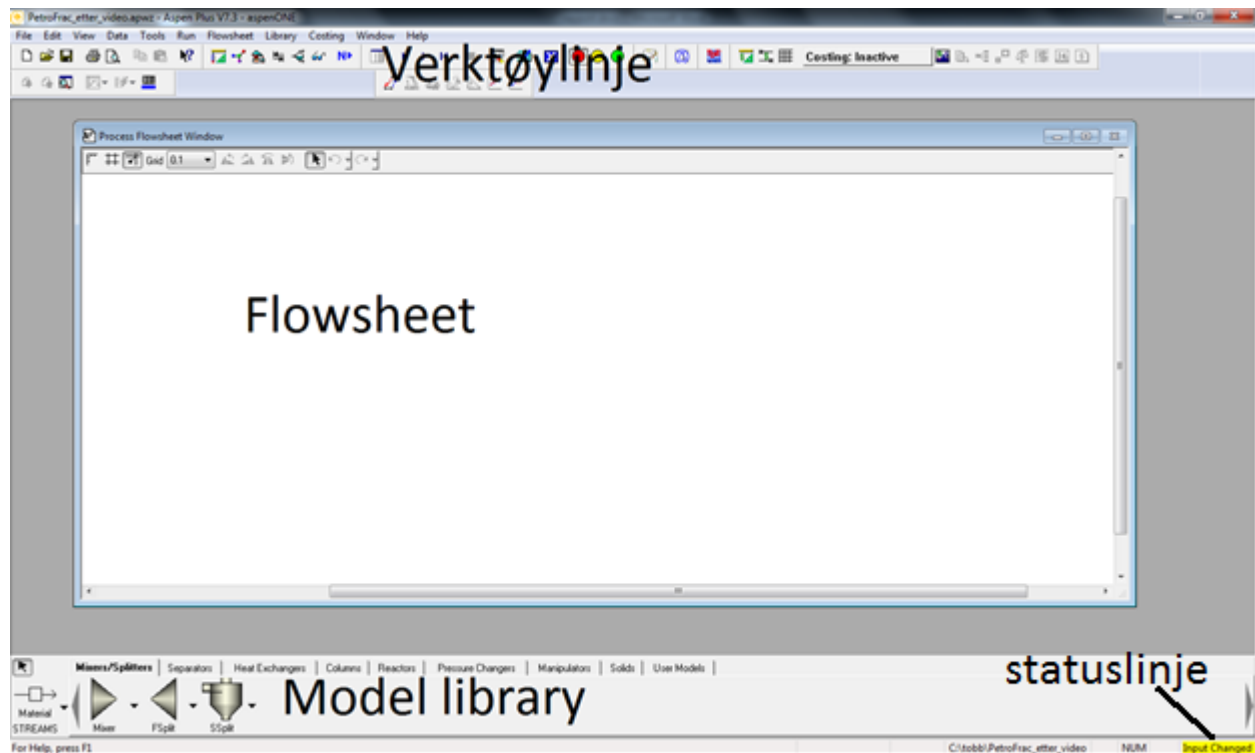
senere tidspunkt i programmet. Derfor kan «general with metric units» være et greit valg, siden man da i hvert fall ikke får inkludert en egenskapsmetode. Merk også feltet «Run Type» der man kan velge mellom bl.a. simulering med flytskjema (forhåndsvalgt) og regresjonsanalyse for å finne komponentegenskaper.

Når man så kommer inn i prosjektet, så vil en dialogboks, kalt «Start Page», dukke opp. Dette inneholder nyheter fra AspenTech, linker til kurs, link til «Help» o.l., men er ikke nødvendig for å jobbe i programmet, så det kan godt lukkes.

Grafisk brukergrensesnitt

Når man har startet programmet, vil man få opp det grafiske brukergrensesnittet (Figur 3). Dette består av en verktøylinje på toppen, et område i midten hvor man har flytskjema, eller «flowsheet», for simuleringen, og et område nederst, som er modellbibliotek, eller «model library». Modellbiblioteket inneholder alle typer strømmer og enhetsoperasjoner man kan ha med i flytskjemaet for et system. Nede til høyre har man et lite område som kalles «status bar», eller statuslinje.

Man kan endre verktøylinje og skru av/på modellbibliotek og statuslinje under «view» øverst til venstre i brukergrensesnittet.



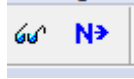
Figur 3. Skjerm bilde fra Aspen Plus. Viser det grafiske brukergrensesnittet til Aspen Plus, med tekstforklaringer.

Help

Aspen Plus har et omfattende hjelpebibliotek, kalt «Help», som er tilgjengelig fra verktøylinjen i brukergrensesnittet til Aspen Plus (Help → Help topics). Denne inneholder artikler med informasjon og referanser om alt utstyr og funksjoner i programmet. Man kan velge å bla gjennom innholdet i Help via en innholdsfortegnelse, eller man kan gjøre et søk, som vil gi alle artiklene som inneholder søkefrasen.

Videre, så må man gå inn på en artikkel, med tittel som virker mest passende, og se om artikkelen gir svar. Resultatene er kun rangert alfabetisk – det er ingen rangering på basis av relevans. I mange av artiklene er det en lenke til en eller flere artikler som også kan gi mer informasjon om emnet.

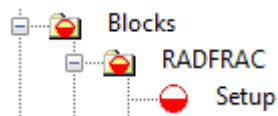
Data Browser



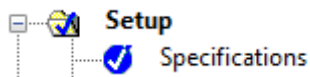
Figur 4. Skjermbilde fra Aspen Plus. Viser til venstre knapp for «data browser» og til høyre «next»-knappen.

To ikoner på verktøylinjen i Aspen Plus som er sentrale i bruken av programmet er «Data Browser» og «Next» knappen(Figur 4).

«Data Browser» er et vindu hvor man legger inn input for alt utstyr, alle strømmmer og simuleringen generelt. Hver strøm eller utstyrsenhet man plasserer i flytskjemaet vil få en egen mappe, som inneholder alle tilgjengelige alternativer for det som er valgt. Inntil Aspen Plus har fått nok input til å gjennomføre en simulering, så vil det være markert hvor det må legges inn input, med røde symboler(Figur 5). Når tilfredsstillende mengde input er lagt inn, vil dette markeres med blå symboler(Figur 6).



Figur 5. Skjermbilde fra Aspen Plus. Viser et utsnitt av «data browser» med røde symboler som viser hvor det kreves input.



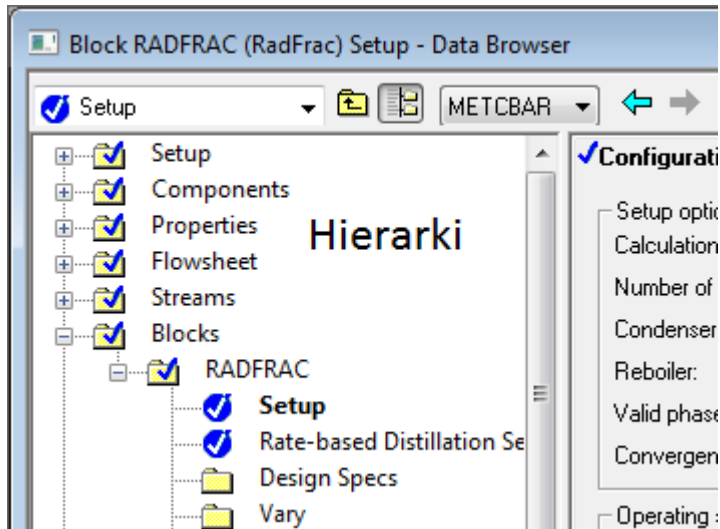
Figur 6. Skjermbilde fra Aspen Plus. Viser et utsnitt av «data browser» med blå symboler som viser at tilfredsstillende informasjon er ført inn i «setup» → «Specifications».

«Next» er en knapp som kan brukes for å komme seg gjennom de nødvendige steg med input. Hvis man har «Data Browser» åpen, så har denne en egen «Next»-knapp som leder til neste skjema, hvor input kreves. Når symbolet på mappen man skriver input i, skifter til blått, og således indikerer at dette skjemaet er tilfredsstillende utført, så kan man trykke «Next» for å komme neste skjema som krever input. Slik kan man navigere gjennom hele simuleringen.

På venstre side i «data browser» vises mappehierarkiet med oversikt over tilgjengelige innstillinger og resultater. Plasseringen til vinduet som er åpent til høyre, vises med uthevet skrift, slik som «setup», i Figur 7. I denne rapporten beskrives en sti fram til et vindu med mappenavn i «data browser», adskilt av piler («→»). Som eksempel blir stien vist på figuren:

«blocks» → «RADFRAC» (navn) → «setup»

«(navn)» etter «RADFRAC» er brukt for å bevisstgjøre at dette er et brukergitt navn, slik at det vil endres når andre navn brukes.



Figur 7. Skjermbilde fra Aspen Plus. Viser utsnitt av mappehierarkiet «data browser». Vinduet som er åpnet i «data browser» har i dette tilfellet: «blocks»→ «RADFRAC» (navn)→ «setup»

Om man har lagt inn input ved å klikke seg gjennom mappene «Data Browser» og det fortsatt kreves mer input, uten at man kan se hvor det skal være, kan man trykke «next», og det vil dukke opp en dialogboks, som forteller hva som må føres inn, eller man ledes direkte til menyen, ettersom hvor man er i programmet.

Markeringene i Aspen Plus om hvor det kreves input, er kun det minimum som programmet trenger for å gjennomføre en simulering. I enkelte tilfeller er det nødvendig å legge inn input i mapper, som ikke er uthevet, for at systemet skal være riktig beskrevet.

Input mode

I «data browser»: «Specifications»→fanen «global»→ «input mode»→ «steady state» eller «dynamic»

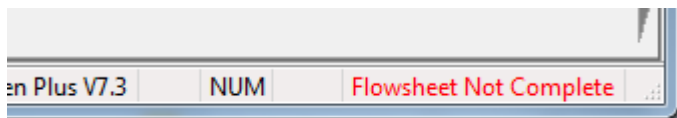
Dette er valg for hva slags form input i programmet skal være på. «Steady state» er forhåndsvalgt, men ved å endre til «dynamic» har man muligheter til å

Flytskjema

Dette er det sentrale arbeidsvinduet i Aspen Plus, med tittelen «process flowsheet window» øverst(Figur 8). Flytskjemaet som skal benyttes i simuleringen tegnes opp her, ved hjelp av modeller og strømmer fra modellbiblioteket.

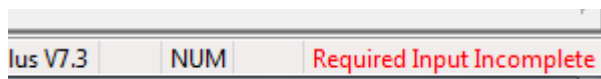


Figur 8. Skjermbilde fra Aspen Plus. I øvre venstre hjørne av flytskjemaet, har man en del alternativer for utseende på flytskjemaet. Fra venstre: 1) knapp for størrelsesangivelse langs ytterkantene. 2) knapp for å vise rutenett i flytskjema. 3) knapp for at strømningslinjer og utstyr skal legge seg i rutenettet automatisk. 4) oppløsningen på rutenettet. 5 – 8) endrer orienteringen på utstyret i flytskjemaet. 9) gjør at man får musepeker i flytskjemaet som kan flytte på utstyr og strømningslinjer. Denne knappen kan brukes etter at man har satt inn utstyr eller strømningslinjer, slik at man kommer ut av modus for å sette inn ting. Man kan også trykke på «esc»-tast. 10-11) Gå bakover eller evt. framover i endringer i flytskjemaet.



Figur 9. Skjerm bilde fra Aspen Plus. Statuslinjen forteller at flytskjema ikke er fullført.

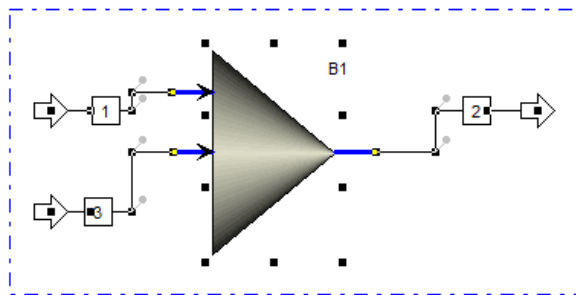
Før flytskjemaet er ferdig spesifisert, så vil man i nedre høyre hjørne finne meldingen (Figur 9) om at flytskjemaet ikke er ferdig. Minst én enhetsprosess med tilhørende strømmer må være tegnet inn for at flytskjemaet anses ferdig av programmet, og det isteden etterspørres input (Figur 10). Når Aspen Plus anser at det har fått nok input til å gjennomføre en simulering, vil beskjeden lyde «Required Input Complete».



Figur 10. Skjerm bilde fra Aspen Plus. Statuslinjen viser at simuleringen trenger mer input for å kunne kjøre simulering.

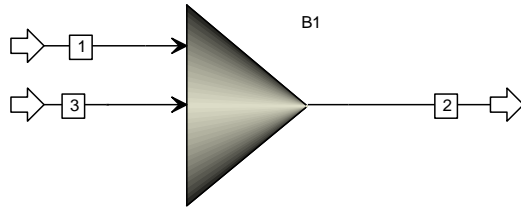
Man kan med fordel gi strømmer og utsyr nye navn ved å høyreklikke på boksen med navnet i, eller ved å lete opp strømmen eller utstyret i «Data Browser». Om man gir et gir et godt og beskrivende navn, kan det være lettere å jobbe med store systemer. Det er navnet som gis, som dukker opp i menyer senere i programmet, slik at det kan da være lettere om det er et navn som beskriver hva det er, fremfor å bare ha et tall. Aspen Plus bruker kun store bokstaver i disse navnene, de kan kun være åtte tegn lange og «ÆØÅ» aksepteres ikke.

Tips:



Figur 11. Skjerm bilde fra Aspen Plus. Viser markering av en prosess i flytskjemaet. Markeringen vises med en boks med stiptet linje rundt området som er markert.

For å gjøre flytskjemaet mer ryddig kan man markere den delen av systemet man vil fikse opp med en boks, ved å trykke ned venstre museknapp og dra diagonalt over (Figur 11). Deretter høyreklikker man, mens musepeker er på utstyrsenheten, og velger «align blocks» fra menyen som dukker opp. Denne handlingen vil rette opp en del strømmer som kunne vært rette, og flytte enhetsoperasjoner slik at de står på linje (Figur 12).



Figur 12. Skjermbilde fra Aspen Plus. Viser resultatet av å bruke funksjonen «Align Blocks».

2.2. Komponenter i simuleringen

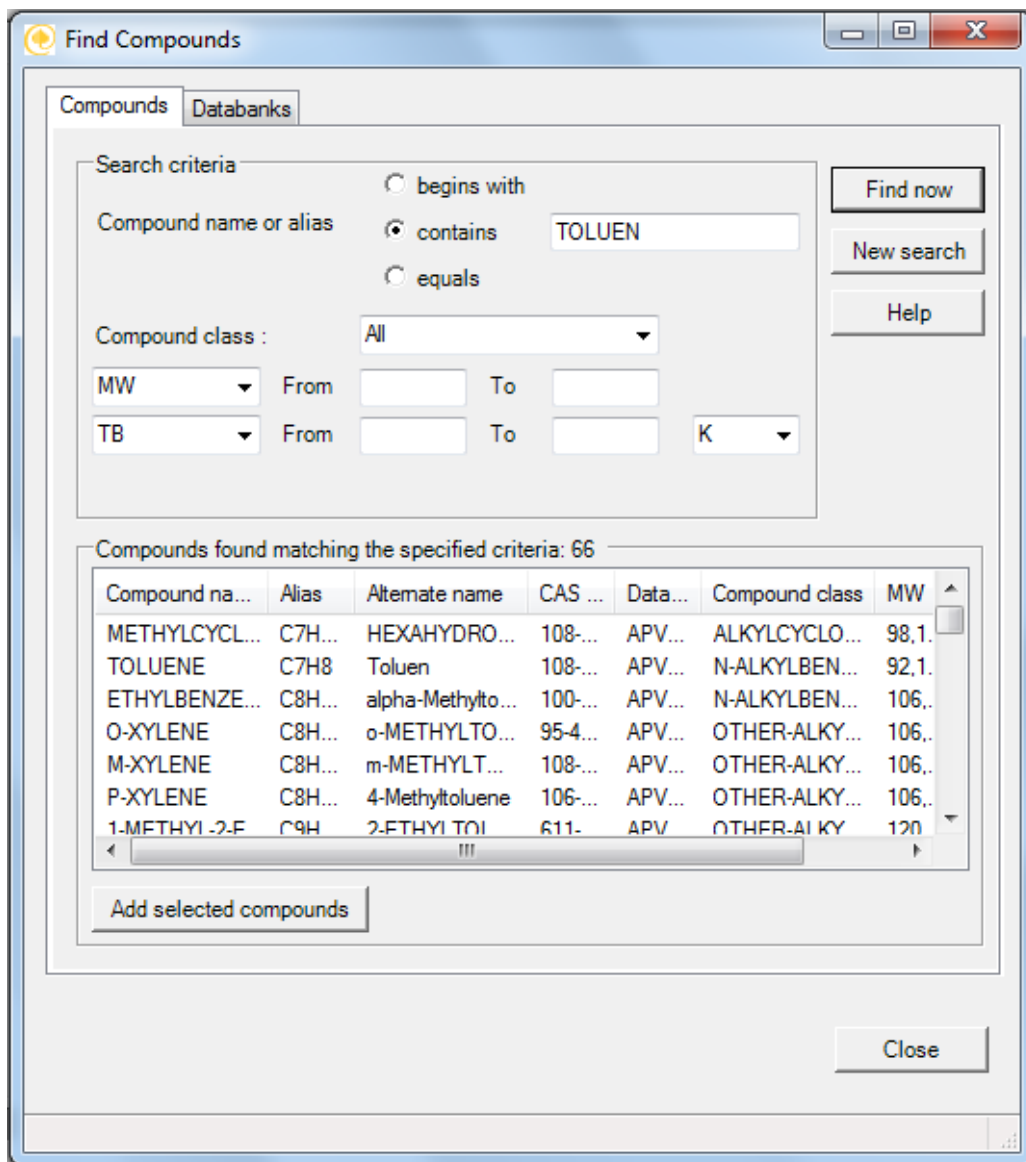
I «data browser»: «components» legges komponentene som skal benyttes i simuleringen inn.

Ved å skrive det engelske navnet til komponenten i kolonnen «component name»(Figur 13) og taste «enter», vil man for mange stoffer få lagt inn stoffet slik. Hvis navnet man skrev inn var tvetydig, vil man komme til «Find Compounds» (Figur 14). Her kan man søke etter komponenten, og bruke f.eks. CAS-nummer for å avgjøre at riktig stoff er valgt.

Alle komponentene må gis et navn, «Componenet ID» som blir brukt i programmet når man skal legge inn parametere i forhold til stoffene som er med(Figur 13).

Selection				
<input checked="" type="checkbox"/>	Petroleum	<input type="checkbox"/>	Nonconventional	<input checked="" type="checkbox"/>
Enterprise Database				
Define components				
	Component ID	Type	Component name	Alias
▶	w	Conventional	WATER	H2O

Figur 13. Skjermbilde fra Aspen Plus. Viser feltet der man skriver inn komponenter som skal være med i simuleringen.



Figur 14. Skjerm bilde fra Aspen Plus. Viser «Find Compounds» som brukes til å finne kjemiske forbindelser som skal brukes i simuleringen. I feltet «compounds found matching the specified criteria» finnes mye informasjon om forbindelsene som passer til søket. Ut i fra denne informasjonen kan man velge riktig forbindelse.

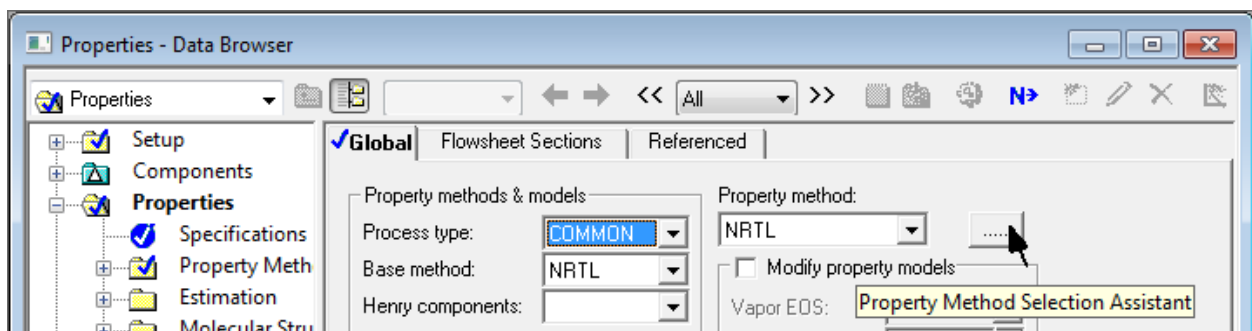
2.3. Metoder for interaksjon mellom komponenter

Under mappen «Properties» i «Data Browser», kan såkalte «Property methods», eller egenskapsmetoder spesifiseres for den aktuelle simuleringen. Egenskapsmetoden som velges, bestemmer de termodynamiske egenskapene til stoffene som opptrer i systemet, og hvordan de oppfører seg forhold til hverandre. De ulike metodene benytter forskjellige matematiske modeller for å behandle interaksjonen mellom ulike stoffer i forskjellige faser og i blandinger. Generelt er metodene enten basert på en tilstandslikning eller en aktivitetskoeffisientmodell. Metodene som bruker en tilstandslikning, er egnet for prosesser med stoffer som oppfører seg tilnærmet ideelt (liten entalpiendring ved konsentrasjonsendringer i blandingen) og foregår ved høyt trykk (over 10 bar) og høy temperatur/ stor variasjon i temperatur^[9]. Metodene som bruker en aktivitetskoeffisientmodell, er egnet for prosesser med stoffer som oppfører seg uideelt og foregår ved lavt trykk (under 10 bar)^[10]. Disse modellene er

avhengige at aktivitetskoeffisienter finnes i databanken til programmet for tilstanden til komponentene som er med i simuleringen.

Man kan velge en egenskapsmetode på basis av teorien bak hver av dem, men for å bestemme hvilken som er «best» å bruke, må man se hvilken metode som best beskriver et eksisterende system i drift. Når et prosessanlegg skal designes i Aspen Plus, blir derfor dette et spørsmål om erfaring, der man bruker en egenskapsmetode som man tidligere har sett beskriver tilsvarende, virkelige systemer.

Det finnes en «assistent» som kan hjelpe en med å velge riktig metode (Figur 15). Her blir man ledet igjennom ulike spørsmål, som man må svare på for simuleringen man setter opp, og det vil bli listet opp metoder som tilfredsstillere svarene. Man bør så søke opp metodene i «aspen plus help», for å se om det er unntak for en metode, som tilsier at man bør velge en annen.



Figur 15 Skjermbilde fra Aspen Plus. Musepeker viser knappen for «property method selection assistant», som kan hjelpe brukeren med å velge riktig egenskapsmetode.

Følgende er en oversikt over noen av egenskapsmetodene, som er å finne i programmet:

SYSOP0

Dette er en egenskapsmetode som antar ideell oppførsel for gass og væske. Raoult's lov anvendes for væske [11].

Sysop0 lastes alltid av programmet, når en simulering gjennomføres, for å gi programmet et grunnlag for utregningene.

IDEAL

Denne metoden anvender Raoult's lov for væsker, den ideelle gassloven for gass, $PV = nRT$, og Rackett-modellen for å beregne stoffmengde per volum i væskefasen [12].

Rackett-modellen er en empirisk likning som beskriver forholdet mellom volumendring og temperaturendring som en funksjon av kompressibilitetsfaktoren.[13]

NRTL

Non-Random Two-Liquid (NRTL) er navnet på en modell for beregning av aktivitetskoeffisienter for væsker, men også navnet på en egenskapsmetode. NRTL-modellen er velegnet for svært ikke ideelle kjemiske systemer [14], og brukes i flere egenskapsmetoder. Alle med navn som inkluderer «NRTL».

Egenskapsmetoden NRTL bruker NRTL-modellen for væskefasen, den ideelle gassloven for gassfasen og Rackett-modellen for å beregne det molare volumet til væskefasen. I tillegg brukes Henrys lov på stoffer som spesifiseres av brukeren som såkalte Henry-komponenter. Dette er aktuelt for gass løst i væske og stoffer som foreligger på tettfase (over kritisk temperatur og trykk).

WILSON

Wilson er navnet på en modell for beregning av aktivitetskoeffisienter for væsker, men også navnet på en egenskapsmetode. Wilson-modellen er velegnet for ikke ideelle systemer, og blir trukket fram som spesielt egnet til systemer med en etanol-vann-blanding^[15]. Modellen kan ikke benyttes for væske-væske-likevekter.

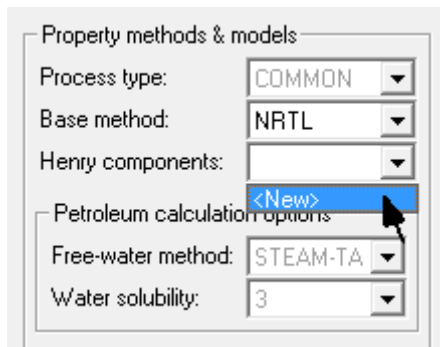
Wilson-metoden anvender Wilsons aktivitetsmodell for væskefasen, den ideelle gassloven for gassfasen og Rackett-modellen for beregning av det molare volumet. I tillegg kan Henrys lov spesifiseres for gass løst i væske og tettfase.

PENG-ROB

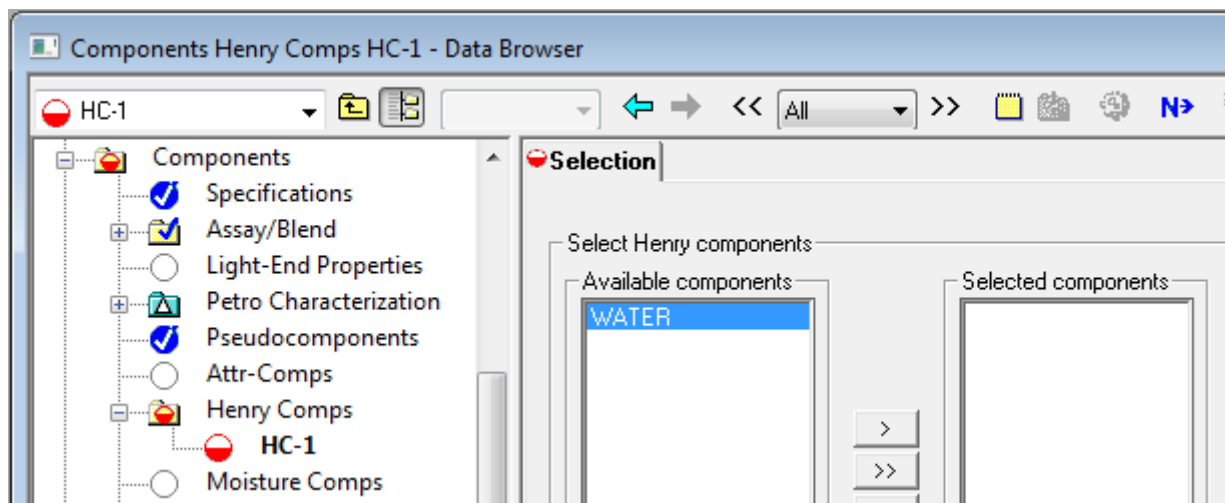
Peng-Rob er en egenskapsmetode som er egnet for upolare blandinger og spesielt ved høye temperaturer. Den skal bl.a. være egnet til hydrokarboner. Som navnet tilsier, er metoden basert på Peng-Robinson-tilstandslikningen^[16]. Denne brukes for alle termodynamiske egenskaper, utenom molart volum, der API metoden brukes for pseudokomponenter og Rackett-modellen brukes for reelle komponenter ^[17].

Henry-komponenter

For å spesifisere Henry-komponenter, må man legge til dette under «Henry components» i «Properties» → «Specifications» og legge til «New»(Figur 16). Da vil det dukke opp en ny mappe under «Components» → «Henry Comps», med samme navn som man la inn under «Properties». Går man inn på denne(Figur 17), så kan man legge over de stoffene som skal behandles med Henrys lov. ^[18]



Figur 16 Skjermbilde fra Aspen Plus. Viser spesifisering en ny Henry-komponent, under «Properties» → «Specifications».



Figur 17 Skjermbilde fra Aspen Plus. Viser Henry-komponenten «HC-1», og komponentene i systemet som kan spesifiseres som Henry-komponent («water»).

2.4. Enhetsoperasjoner

Enhetsoperasjoner som pumper, miksere og destillasjonskolonner kalles «blocks» i Aspen Plus. Oversikten over disse vises på bunnen av Aspen Plus-vinduet, i modellbiblioteket. Enhetsoperasjonene er delt inn i hovedkategorier, som man kan veksle mellom med faner.

For å plassere enhetsoperasjoner i flytskjemaet klikker man først på den spesifikke typen man ønsker, og deretter på flytskjemaet. En kan merke seg at etter man har klikket på enhetsoperasjon, så går musepekeren fra å være ordinær pil til et kryss; da er man i «insert mode». Så lenge man ikke trykker på «esc»-tast eller velger annet utstyr eller strømmer, vil man plassere en ny enhet av samme type for hvert klikk man foretar i flytskjemaet.

Mixers/Splitters

Dette er utstyr for å blande sammen eller splitte opp material- eller varmestrømmer.

Separators

Denne kategorien inneholder utstyr for å separere stoffer fra hverandre ved å bruke gravitasjon og/eller trykkforskjeller.

Det er to ulike flash-separasjoner, med henholdsvis to og tre utløp. Disse kan skille gass og væske, mens utgaven med tre utløp også kan skille to ulike væskefaser basert på gravitasjon. Utgaven med to utløp kan brukes som fordamper, med varmestrømmer inn og ut.

Separatoren kalt «Decanter» kan skille to væskefaser, men skiller ikke ut gass.

Separatorene kalt «Sep» og «Sep2» splitter opp fødingen på basis av molfraksjon eller hvor stor strøm de ulike utløp skal ha. Dette er ingen tradisjonelle separasjoner, men kan brukes for å representere annet separator- eller destillasjonsutstyr, der man kjenner de resulterende strømmene fra før ^[19].

Heat Exchangers

Denne kategorien inneholder ulike varmevekslere. «Heater» har en materialstrøm og kan ha en varmestrøm inn eller ut. «HeatX» har to ulike materialstrømmer som utveksler varme, og kan brukes til ulike varmevekslerberegninger. «MHeatX» har muligheter for varmeveksling mellom flere varmestrømmer; altså fler en to. «HXFlux» brukes for å varmeoverføre fra en varmestrøm, ved hjelp av konveksjon eller en kombinasjon av konveksjon og stråling.

Columns

Denne kategorien inneholder kolonner for destillasjon og væske-væske-ekstraksjon.

Trinnene («stages») i en kolonne beskrives fra topp til bunn med stigende nummer, der kondensator er en plate.^[20]

DSTWU

Dette er en forenklet destillasjonsberegning som bruker Winn-Underwood-Gilliland-metoden for å estimere minimum antall trinn, minimum reflux-forhold og fødepunkt.

Winns metode brukes for å beregne minimum antall trinn, Underwood brukes for å beregne minimum reflux forhold og på basis av dette brukes Gilliland for å beregne nødvendig antall trinn for et spesifisert reflux forhold eller nødvendig reflux forhold for et spesifisert antall trinn [aspen plus help].

Likningen i Winns metode er en modifikasjon av Fenskes likning.

Fenskes likning:
$$N_{min} = \frac{\ln\left(\frac{x_D(1-x_B)}{x_B(1-x_D)}\right)}{\ln \alpha_{gjennomsnitt}} - 1$$
, [MSH, 7th ed, p. 688]

Winns likning:
$$N_{min} = \frac{\ln\left(\frac{x_{LK,D}(x_{HK,B})^{\theta_{LK}}}{x_{LK,B}(x_{HK,D})^{\theta_{LK}}}\right)}{\ln \beta_{LK/HK}}$$
 [aspen plus help → "Winn Method in DSTWU"]

Forholdet mellom $\beta_{LK/HK}$ og θ_{LK} er gitt av: $\beta_{LK/HK} = \frac{K_{LK}}{(K_{HK})^{\theta_{LK}}}$, [Aspen Plus Help]. «K» i uttrykket er K-verdier for gass-væske-likevekten til lett (LK) og tung (HK) komponent. K-verdien beskriver forholdet mellom mengder, på basis av mol eller partialtrykk, av to ulike faser, av samme stoff, i likevekt [aspen plus help → K-value].

DSTWU-kolonnen kan med fordel brukes til å estimere en kolonne, siden den krever forholdsvis lite input, for så å bruke resultatene herfra til å spesifisere en mer detaljert kolonne, som f.eks. RadFrac.

Distl

Dette er en forenklet destillasjonsberegning som bruker Edmister-metoden. Denne kolonnen må få spesifisert antall trinn, reflux-forhold og forholdet mellom molstrømmen på fødingen og destillatet. «Distl» kan da finne effekten som må tilføres i kokeren og tas ut i kondensatoren.

RadFrac

Dette er en rigorøs modell for fraksjonert destillasjon, som har et bredt bruksområde og store spesifiseringsmuligheter. Den kan brukes med to og tre faser, der det kan være to ulike væskefaser.

Kolonnen kan brukes til destillasjon, absorpsjon, stripping, ekstraherende og azeotropisk destillasjon[aspen plus help].

Det kan spesifiseres at kjemiske reaksjoner skjer i kolonnen.

RadFrac har en Rating-modus og Design-modus. I design-modus bruker man «Design-Spec» og «Vary», under menyen for RadFrac, for å spesifisere parametere for hvor effektiv kolonnen er, f.eks hvor rent destillatet skal være. Her må man legge inn et anslag for den parameteren man vil variere i «Setup». I rating-modus må man legge inn to ekstra inputer i «Configuration», som f.eks reflux ratio og den tilførte effekten i kokeren.

«Tray Sizing» og «Tray Rating» kan brukes for å finne størrelsen på platene i kolonnen avhengig av type plate, og derav diameter på kolonnen.

Extract

Dette er en væske-væske ekstraksjonskolonne.

MultiFrac

Dette er en generell modell for å simulere et system av flere kolonner med ulike spesifikasjoner.

Bør ifølge Aspen kun brukes der PetroFrac-kolonnen ikke strekker stil [Aspen Plus Help → MultiFrac].

SCFrac

Dette er en forenklet modell for å simulere råolje-destillering.

Denne kolonnen krever en del input, i forhold til at det er en forenklet modell, slik at den er ikke spesielt mye lettere å bruke en PetroFrac. Hvis man har alle data som kreves for å bruke denne kolonnen, kan man godt vurdere og kun spesifisere en PetroFrac-kolonne. Det har ikke blitt funnet særlig med eksempler på bruk av denne kolonnen, som kan antyde at bruken av den ikke er spesielt utbredt.

PetroFrac

Dette er en modell for destillasjon av råolje, som har flere alternativer for input en SCFrac.

PetroFrac er utstyrt med mulighet for tilkobling av side-strippere, eller avdrivere. Per definisjon, skal strippere redusere mengden bestanddeler med lavt kokepunkt (flyktige), slik at væsken som går ut i bunn har høy konsentrasjon av bestanddeler med høyt kokepunkt [snl.no/avdriver][MSH, UOCE, s. 645].

Reactors

Her finnes ulike reaktorer, som f.eks. tanker med omrøring eller pluggstrømsreaktorer.

Pressure Changers

Dette er ulike enhetsprosesser som medfører endring i trykk i en materialstrøm, som pumper, kompressorer og rørdeler med høydeforskjeller.

Manipulators

Dette er generiske enhetsprosesser som endrer eller modifierer variabler for en strøm^[21].

Solids

Modellene her tar for seg enhetsprosesser som står for behandling av komponenter på fast form, som f.eks. knusere og sykkloner.

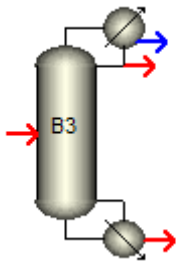
User Models

Her kan brukeren selv spesifisere en enhetsprosess.

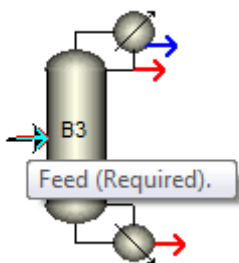
2.5. Strømmer

Det finnes tre typer strømmer man kan bruke i flytskjemaet, energi-, arbeid- og materialstrømmer. Disse finnes også i modellbiblioteket, på bunnen av brukergrensesnittet. Arbeidsstrømmer er effekt til pumper^[22].

Enhetsoperasjonene har gjerne porter for tilkobling av strømmer. Enkelte har også porter for flere typer av strømmer. Når man har trykket på en av strømmtypene, vil de portene der det er mulig å koble til denne strømmtypen dukke opp som røde og blå piler på enheten(Figur 18). De røde pilene markerer porter det er nødvendig at er forbundet med en strøm, for at simuleringen skal kunne gjennomføres, mens de blå er valgfrie. Holder man musepekeren over en port, vil det dukke opp en beskrivelse av denne(Figur 19).

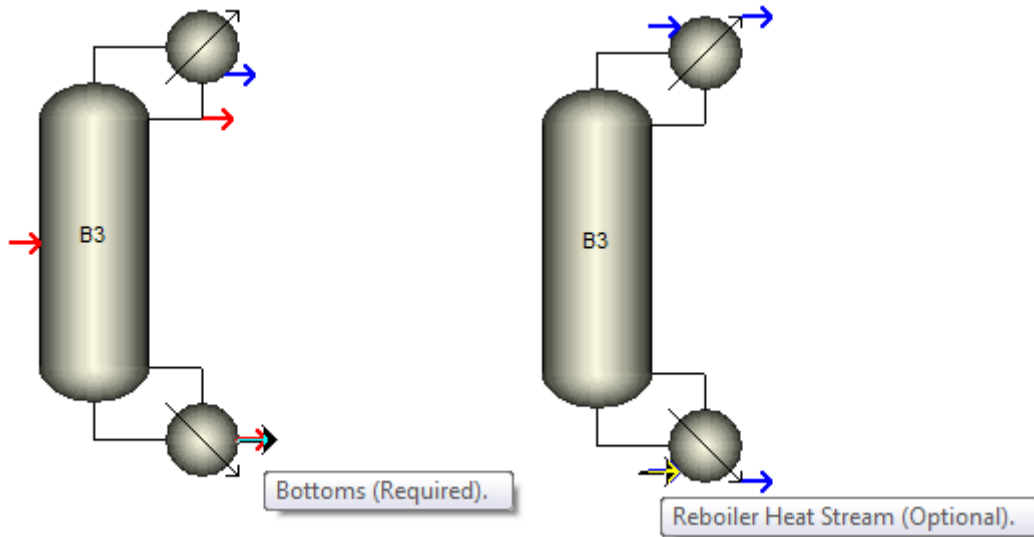


Figur 18 Skjerm bilde fra Aspen Plus. Viser en DSTWU-kolonne med mulige porter. Portene som krever tilkobling er markert som røde, mens valgfrie porter er markert med blått.



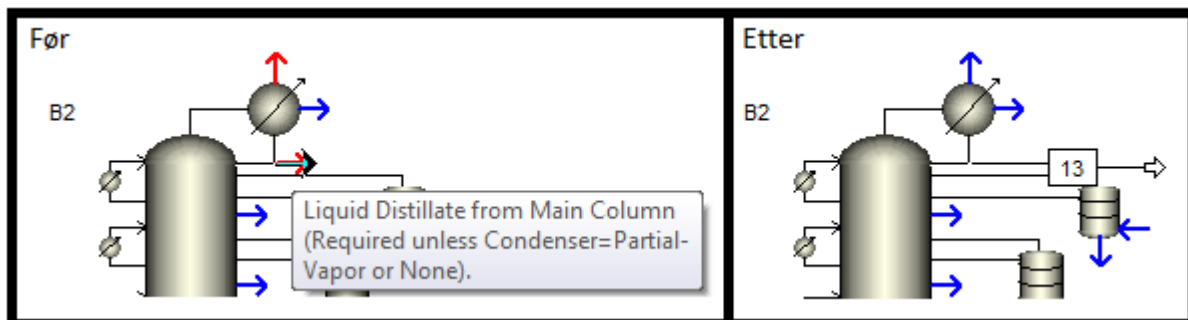
Figur 19 Skjerm bilde fra Aspen Plus. Viser en DSTWU-kolonne med mulige porter. Musepeker er over porten «Feed», som resulterer i at en hvit boks med en beskrivelse dukker opp.

Det er kun portene som er aktuelle for strømmtypen man har valgt som vil dukke opp. Så om man bytter fra materialstrøm til energistrøm, så vil portene (pilene) som man ser på utstyret i flytskjemaet endres(Figur 20).



Figur 20 Skjermbilde fra Aspen Plus. Viser forskjellen mellom massestrømmene (til venstre) og energistrømmene (til høyre) til en DSTWU-kolonne.

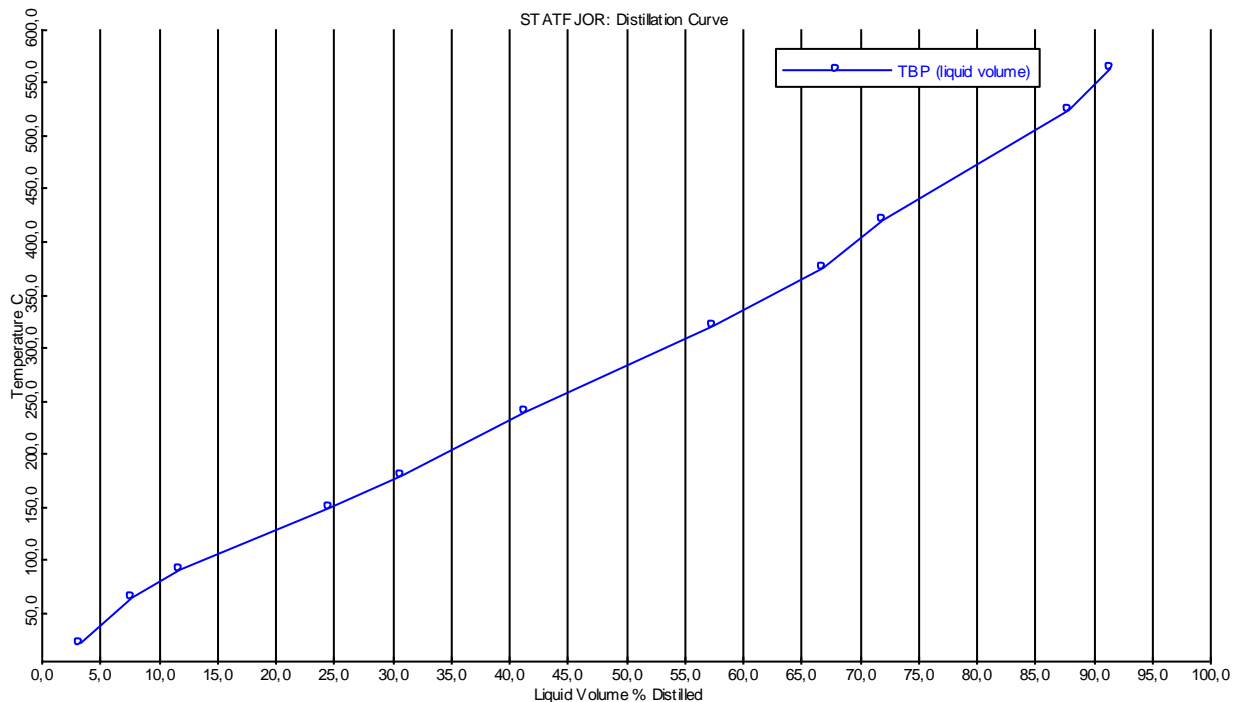
For enkelte typer utstyr, som f.eks kolonnen PetroFrac, kan det være at flere strømmer er markert som nødvendige, enn det som er tilfellet. Dette kommer av at enkelte porter blir unødvendige for visse spesifikasjoner. For PetroFrac er snakk om hva slags type kondensator man velger(Figur 21).



Figur 21 Skjermbilde fra Aspen Plus. Viser en PetroFrac-kolonne før og etter at en strøm har blitt koblet til uttaket for destillat på væskeform. Pilen som peker vertikalt fra toppen går fra rød (nødvendig) til blå (frivillig).

2.6. Petroleum

Aspen Plus inneholder funksjonalitet for å gjøre simuleringer av råoljeprosesseringsanlegg.



Figur 22

Råolja, kalles «assay» i Aspen Plus, og er en blanding av mange ulike kjemiske forbindelser. Hver forbindelse blir ikke behandlet hver for seg. Man angir heller kurver for egenskapene til en type råolje(Figur 22), og densiteten i bulk^[23]. Råolja deles opp i andeler etter hva kokepunktet er, kalt pseudokomponenter. Som forhåndsvalg i programmet, deles råolja opp etter bestemte intervaller(Tabell 4). Andelene det deles inn i, kalles «cuts» i programmet.

Tabell 4. Oversikt over forhåndsvalgte temperaturintervaller for fraksjoner i Aspen Plus ^[24].

Fahrenheit			Celsius		
Kokepunktssområde	Ant. andeler	Inkrement	Kokepunktssområde	Ant. andeler	Inkrement
100 – 800	28	25	37,8 – 426,7	28	13,89
800 – 1200	8	50	426,7 – 648,9	8	27,78
1200 - 1600	4	100	648,9 - 871,1	4	55,56

2.7. Kjøre simulering

Når statuslinjen viser «required input complete», kan simuleringen kjøres. Om man har navigert seg gjennom hele oppsettingen av simuleringen, med «next»-knappen, vil et trykk på denne føre til at man blir spurt om å sette i gang simuleringen.

Hvis man har kjørt en simulering med systemet, og gjort endringer, kan det være greit å nullstille systemet, kalt «reinitialize» i Aspen Plus, før man kjører ny simulering. Hvis man ikke nullstiller før man kjører ny simulering, vil Aspen Plus bruke verdiene fra forrige simulering som utgangspunkt for den nye. Hvis man har et svært stort og komplisert system som tar lang tid å simulere, kan det være nyttig å ta utgangspunkt i forrige simulering, men tidsbruk på simuleringer på forholdsvis små systemer har vist seg

ikke å være noe problem. Hvis man er i en tidlig fase med å sette opp et system, og resultatene for systemet varierer forholdsvis mye for hver simulering, vil det ikke ha noen hensikt at neste simulering skal ta utgangspunkt i et resultat som er langt unna det man forventer. Hvis første simulering f.eks. ikke konvergerer, så er ikke dette et godt utgangspunkt for en ny simulering. Om en simulering ikke får noen løsning, tilsynelatende uten at noe er galt, kan en nullstilling hjelpe. [25]

3. Binær destillasjon

3.1. Beskrivelse av prosess

For å se på simulering av en destillasjon av en binær væskeblanding, utføres en destillasjon gjennomført i kurset TMPP251 ved UMB (vedlegg 1). Dette er en destillasjon av en blanding av 42 %mol n-heptan og 58 %mol etylbenzen. Fødingen er på 200 kmol/h og er væske på kokepunkt. Kolonnen skal ha hullplater, indirekte oppvarming og 70% platevirkningsgrad.

Det er gitt at væskeblandingen kommer inn på kokepunkt, men temperaturen er ikke gitt. Derfor må først dette bli funnet.

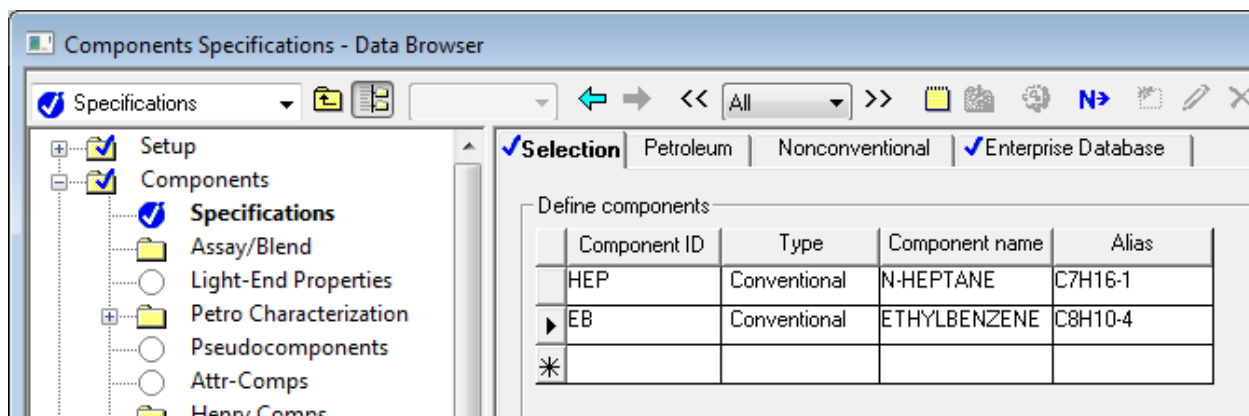
For å finne et estimat for antall trinn som er nødvendig i destillasjonskolonnen, må en simulering gjennomføres med en kolonne-modell som ikke trenger mye input, da det er lite som er gitt i oppgaven. Derfor settes det opp en simulering med en DSTWU-kolonne.

For å finne mer informasjon om kolonnen må en mer omfattende kolonne-modell anvendes, da DSTWU kolonnen ikke gir størrelse på kolonne eller interne strømmer. Til slutt settes det derfor opp en simulering med den mer omfattende RadFrac-kolonnen.

3.2. Kokepunkt for væskeblanding

Når programmet er startet opp, ta utgangspunkt i malen «generall with metric units» og velg «run type» → «data regression». Dette er en regresjonsanalyse som kan gi oss bl.a. damp-væske-likevekt (koke- og duggpunktsdiagram) for dette systemet.

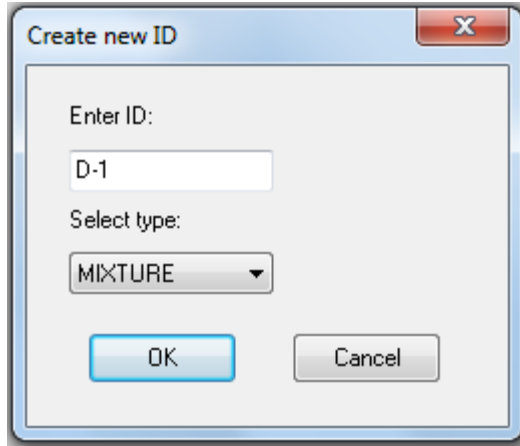
I vinduet man kommer til («components» → «specifications»), så kan man skrive inn navnene på stoffene som skal være med i simuleringen, i kolonnen «component name», etterfulgt av et trykk på enter-tasten. For stoffene i denne simuleringen, gir dette et utvetydig svar. Om man skulle være usikker, kan man bruke knappen «Find» nederst i dette vinduet. Når man søker opp et stoff her, vil man få opp bl.a. alternative navn på stoffet og CAS-nummer, slik at man kan dobbeltsjekke at man virkelig har valgt riktig. Tilslutt må man legge inn et navn i kolonnen «component ID», som brukes senere i programmet (Figur 23). Trykk «next».



Figur 23 Skjermbilde fra Aspen Plus.

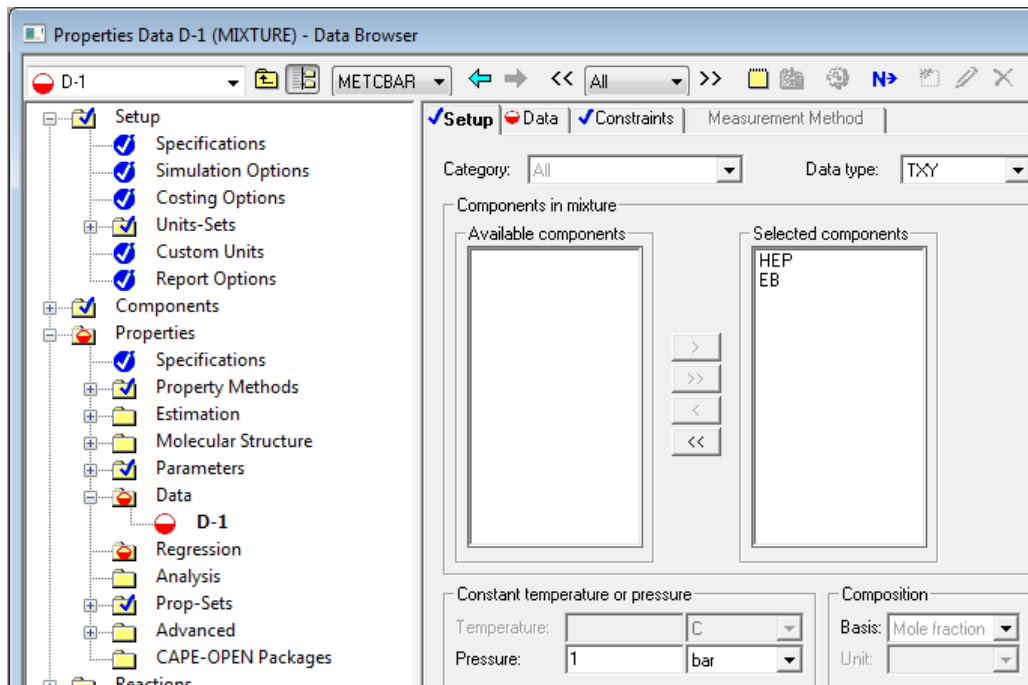
«Properties»→ «specifications». For å velge egenskapsmetode, kan man først gå gjennom «property method selection assistant» (Figur 15). Ved å velge «chemical components»→ «hydrocarbon system»→ «No» (ikke råolje eller pseudokomponenter), blir vi anbefalt «PENG-ROB» og «LK-PLOCK». Velger «PENG-ROB», siden denne er gjennomgått tidligere og egner seg for upolare stoffer og hydrokarboner. Trykk «next». En dialogboks vil dukke opp; velg «go to next required input step».

Gå så til «properties»→ «data»→ trykk på «New». En dialogboks(Figur 24), dukker opp. Velg «mixture» og trykk «ok».

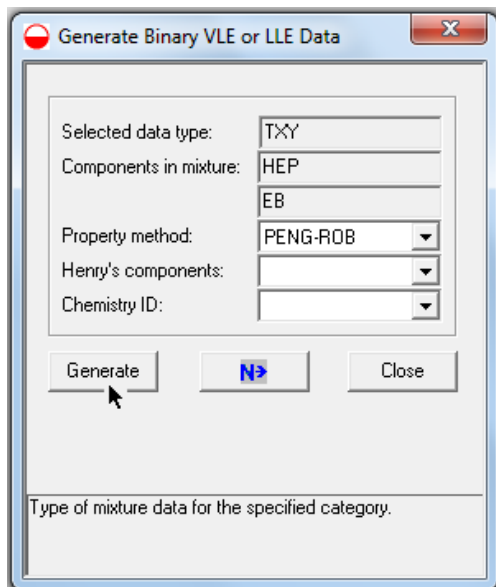


Figur 24 Skjermbilde fra Aspen Plus.

I vinduet man kommer til (under «data»→ «D-1» (navn)), velges begge komponentene med dobbelpilen og velg «Data Type» → «TXY», som gir damp-væske-likevekt ved konstant trykk. Da kan man føre inn trykket på strømmen i «pressure», 1 bar(Figur 25). Bytt fra fanen «Setup», til «Data». Trykk på knappen «generate data». En dialogboks dukker opp(Figur 26). Sett «property method» til «PENG-ROB», som var den vi brukte i simuleringen, og trykk «generate».

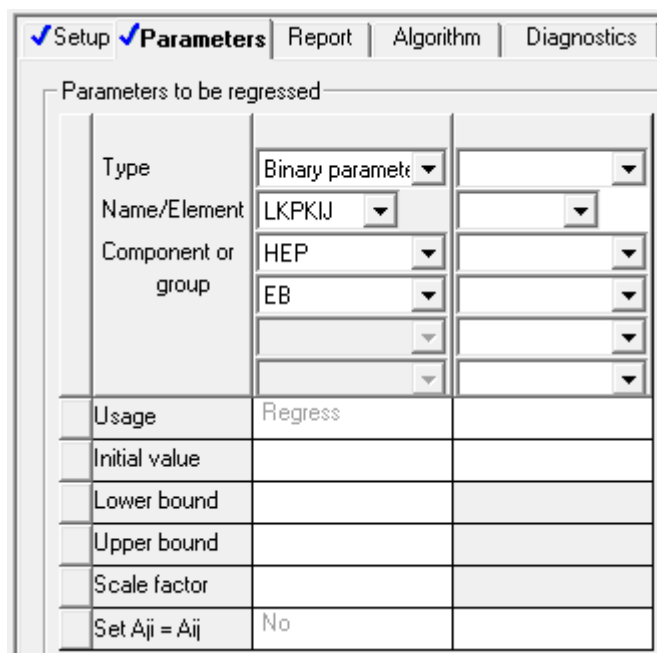


Figur 25 Skjermbilde fra Aspen Plus.



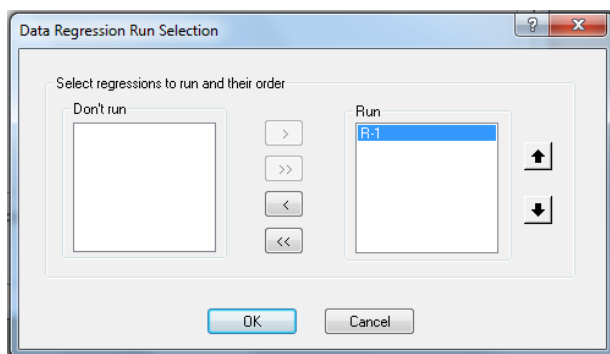
Figur 26 Skjermbilde fra Aspen Plus.

Gå så til «properties» → «regression», og trykk «new», og trykk «ok» i dialogboksen som dukker opp. «Method» må velges til LK-PLOCK (den andre av de forslåtte for simuleringen), da programmet ikke aksepterer at samme metode skal stå for genereringen av dataene og regresjonen. I kolonnen «data set», velges «D-1» ved å trykke i det hvite feltet. Bytt fane fra «setup» til «parameters», og legg til input(Figur 27). «Binary parameter», velges da det er egenskaper for den binære blandingen vi er interessert i. Elementene som velges («Lkpkij») er tilhørende egenskapsmetoden som er valgt, og gir en kurve som passer bra med datapunktene. Begge komponentene må velges, siden det er egenskaper for den binære blandingen som er interessant.



Figur 27 Skjermbilde fra Aspen Plus.

Kjør simuleringen ved å trykke «next» i «data browser». Sørg for at «R-1» er i feltet «Run»(Figur 28), og trykk «OK».



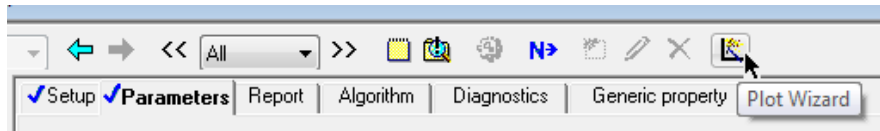
Figur 28

Gå tilbake til «data browser»: «properties»→ «regression»→ «R-1» og trykk på «plot wizard»(Figur 29). En dialogboks dukker opp med en velkomstmelding, som kan trykke på «next»(NB! I dialogboksen) for å komme forbi. I «step 2» velges «T-xy»(Figur 30). Trykk «next». I «step 3» kan man endre komponenten som skal være på x-aksen til «HEP» (n-heptan), siden dette er destillatet, selv om ikke dette er nødvendig(Figur 31). Trykk på «next», og man kommer til «step 4», der man ikke trenger å gjøre noen endringer, så kan man trykke «finish». Da vil diagrammet dukke opp (Figur 32). Av dette kan vi lese av at kokepunktet for en blanding med 42 % n-heptan og 58 % etylbenzen, ved 1 bar, er ca. 113 °C.

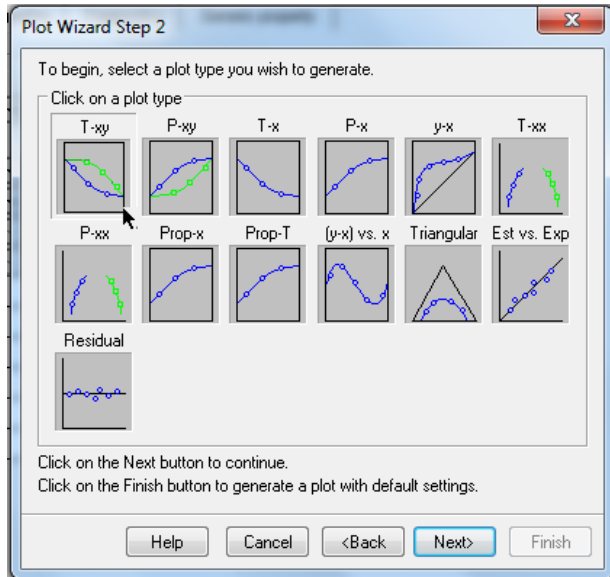
Temperaturen ved endepunktene for kurven, der det er henholdsvis 100 % n-heptan og 100 % etylbenzen, stemmer overens med kokepunktene til stoffene på ren form.

Kokepunkt, n-heptan: 96,5 °C ved 1 atm ^[26]

Kokepunkt, etylbenzen: 136,2 °C ved 1 atm ^[27]



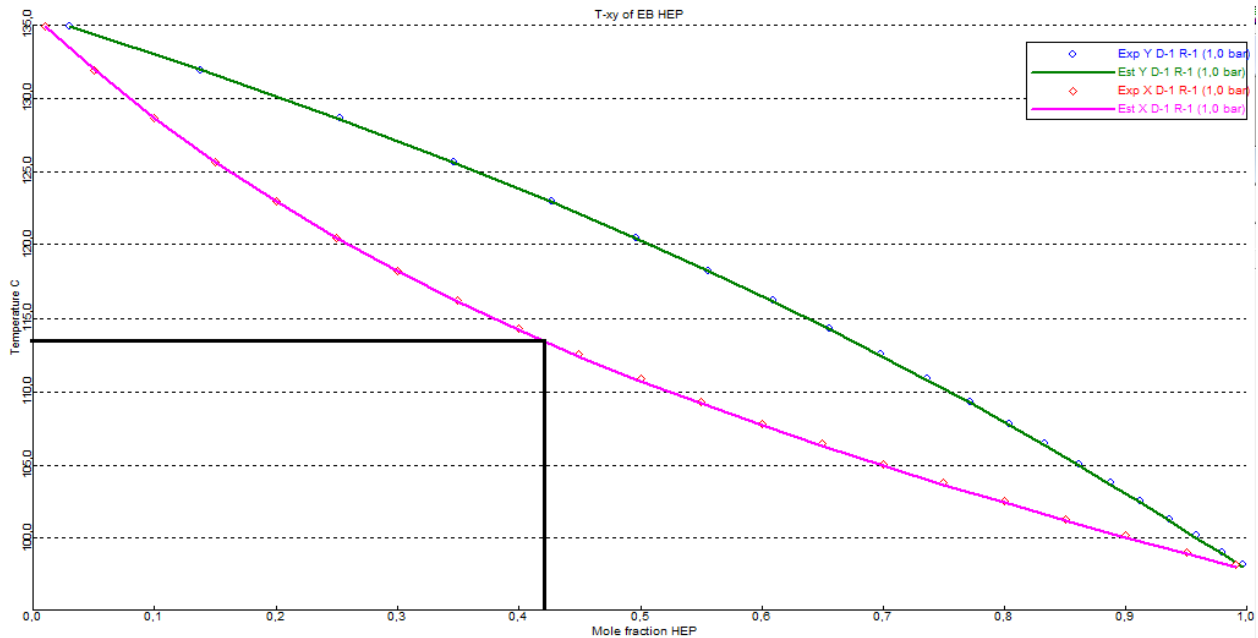
Figur 29 Skjerm bilde fra Aspen Plus.



Figur 30 Skjerm bilde fra Aspen Plus.



Figur 31 Skjerm bilde fra Aspen Plus.

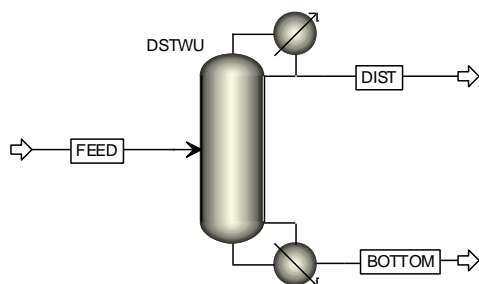


Figur 32. Skjermbilde fra Aspen Plus. Her er en linje dratt vertikalt fra konsentrasjonen i fødingen, 42 % n-heptan, til kokepunktskurven (i rosa). Fra dette punktet er en linje dratt horisontalt til temperatur-aksen. Krysningpunktet med temperatur-aksen angir kokepunktet for blandingen

3.3. Estimering av kolonne

Man kan bruke samme simulering, der stoffene allerede er lagt inn. I «data browser» går man på «setup» → «specifications» → fanen «global» → feltet «global settings» → i «run type» velg «flowsheet». Nå dukker flytskjemaet opp, og noen av menyene i «data browser» endres, da man bytter simuleringstype.

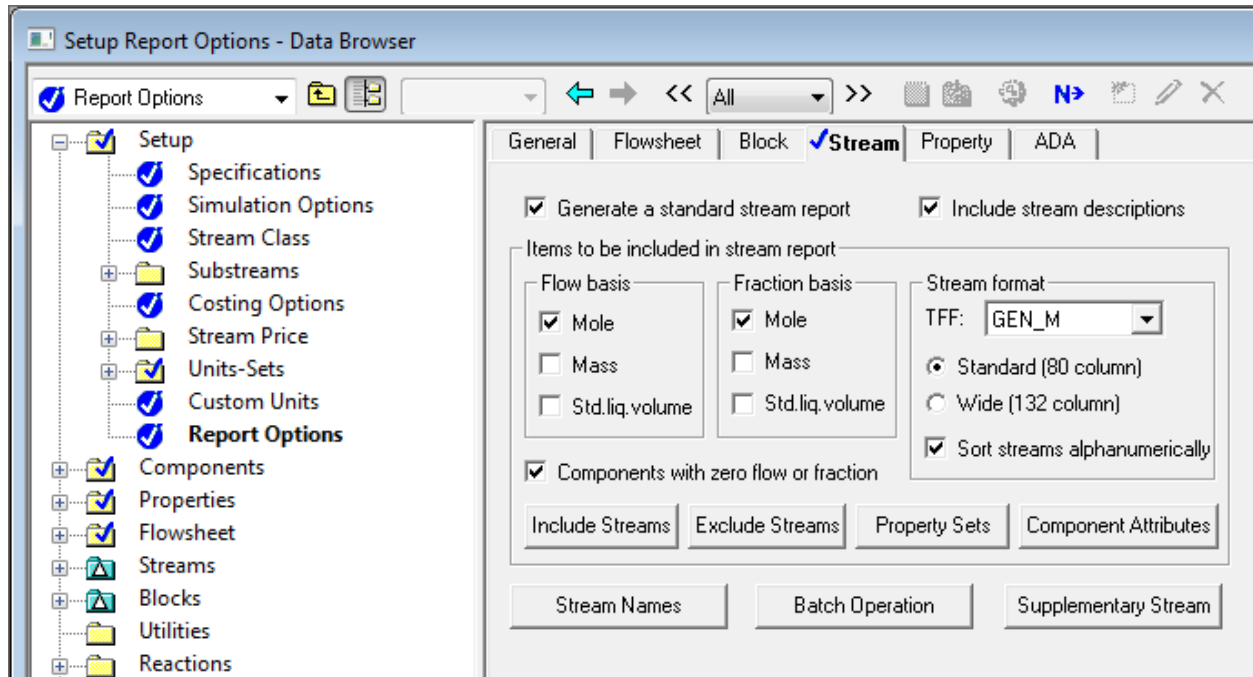
I det tomme flytskjemaet, plasseres en DSTWU-kolonne, fra modellbiblioteket, under «Columns». Kobler så til materialstrømmer til de røde portene, og navngir strømmer og kolonne hensiktsmessig (Figur 33).



Figur 33 Skjermbilde fra Aspen Plus.

Flytskjemaet er nå ferdig, og Aspen Plus etterspør input. Man kan da trykke på «next»-knappen på verktøylinjen, og tykke OK i dialogboksen som dukker opp. «Data browser» vil nå åpnes. Det er ikke nødvendig med endringer i «setup» → «specifications», men man kan f.eks. legge inn en tittel på simuleringen, om ønskelig. Om man trykker på punktet «setup» → «report options», og videre på fanen «stream», kan man velge hvordan resultatene for strømmene skal presenteres. I feltet «fraction basis»

velger man «mole»(Figur 34). Ved å gjøre dette, får man presentert mol-andelene i tabellen med resultater for strømmene. Trykk videre på «next» i «data browser».



Figur 34 Skjermbilde fra Aspen Plus.

«Streams»→ «FEED» (navn). Her skal man fylle i input for fødingen. Ifølge oppgaven skal fødingen være på kokepunkt. Dette ble funnet å være 113 °C ved 1 bar («3.2. Kokepunkt for væskeblanding»). Siden destilleringen er ved atmosfærisk trykk, settes «pressure» til 1 bar. I feltet «composition» endres «mole-flow» til «mole-frac», slik at vi kan føre inn andelene av de to stoffene i strømmen. Merk at man må føre inn andeler, slik at summen av dem er 1(Figur 35). Trykk «next».

Specifications | Flash Options | PSD | Component Attr. | EO Options

Substream name: **MIXED** Ref Temperature

State variables:

- Temperature: 113 C
- Pressure: 1 bar
- Total flow: 200 kmol/hr (Mole)
- Solvent:

Composition:

Component	Value
HEP	0,42
EB	0,58

Total: 1

Figur 35 Skjermbilde fra Aspen Plus.

«Blocks» → «DSTWU» (navn) → «input». Ser bort fra trykkfall, så i feltet «pressure», settes trykket til 1 bar for koker og kondensator. I feltet «condenser specifications» velges «total condenser», hvis ikke dette allerede var forhåndsvalgt. Setter reflux ratio til 1,8, som er brukt i oppgaven. I feltet «key component recoveries», settes «light key – comp» til «HEP» og «heavy key – comp» til «EB». Dette ut i fra spesifikasjonene til destillatet og bunnproduktet, som i oppgaven spesifiserer at man ønsker høy konsentrasjon av n-heptan i destillat og høy konsentrasjon av etylbenzen i bunnprodukt. Parameterne kalt «recovery», angir for hvert av stoffene, hvor mange mol av stoffet som er i fødingen som hentes ut i destillat-strømmen. «Recovery», eller uthenting, av den mest flyktige forbindelsen skal derfor være høy, mens for den minst flyktige skal denne være lav. For hver av komponentene blir «recovery» funnet ved hjelp av Likning 1.

$$recovery = \frac{\text{mol i destillat}}{\text{mol i føding}}$$

Likning 1

Utregning av «Recovery»:

Symboler: F = Føding [kmol/h], D = Destillat [kmol/h], B = Bunnprodukt [kmol/h], x = molfraksjon av n-heptan, y = molfraksjon av etylbenzen

$$D = \frac{F(x_F - x_B)}{x_D - x_B} = \frac{200(0,42 - 0,01)}{0,97 - 0,01} = 85,42 \text{ kmol/h}$$

Likning 2

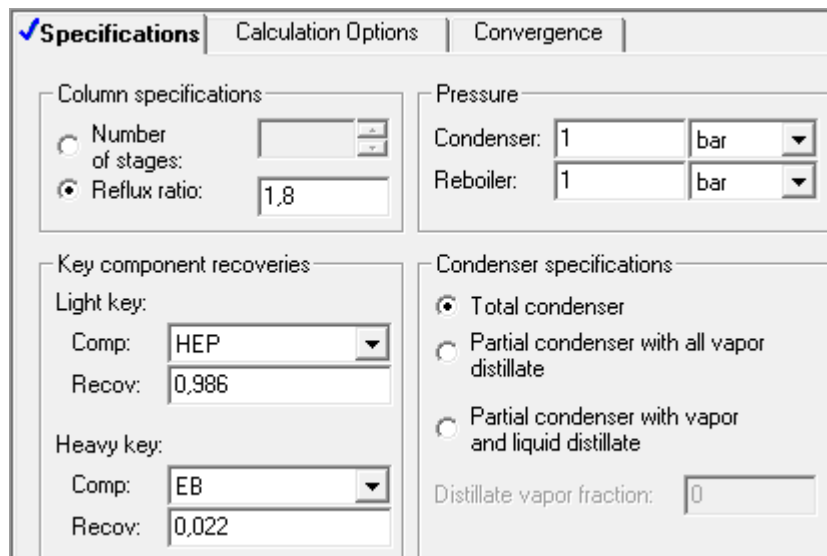
$$recovery, light = \frac{\text{mol lett forbindelse i D}}{\text{mol lett forbindelse i F}} = \frac{D \cdot x_D}{F \cdot x_F} = \frac{85,42 \cdot 0,97}{200 \cdot 0,42} = 0,986$$

Likning 3

$$recovery, heavy = \frac{\text{mol tung forbindelse i D}}{\text{mol tung forbindelse i F}} = \frac{D \cdot y_D}{F \cdot y_F} = \frac{85,42 \cdot 0,03}{200 \cdot 0,58} = 0,022$$

Likning 4

Disse verdiene legges inn i «data browser»: «blocks» → «DSTWU» (navn) → «specifications» (Figur 36).



Figur 36 Skjermbilde fra Aspen Plus.

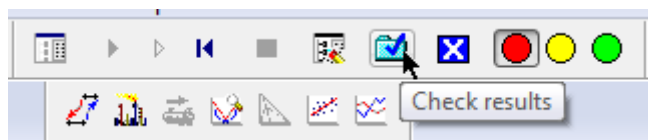
Nå skal nedre høyre hjørne i Aspen Plus vise beskjeden «required input complete», og når man trykker «next», vil en dialogboks spørre om vi ønsker å kjøre simuleringen. Trykk «ok». Det vil dukke opp en dialogboks, som spør om å aktivere kostnadsestimering, som man kan lukke ved å trykke «close».

Man kan også starte simuleringen ved å gå inn på «run» → «run» på toppen av verktøylinjen, eller bruke pil-symbolet på verktøylinjen (Figur 37).



Figur 37 Skjermbilde fra Aspen Plus.

For å se resultatene for strømmene, trykker man på mappen, med en blå hake, som er å finne på verktøylinjen (Figur 38).



Figur 38 Skjermbilde fra Aspen Plus. Viser knappen «check results». Knappen øverst til venstre er «run controll panel», og viser hva som er galt om simuleringen f.eks. ikke konvergerer.

Under «result summary» → «streams», finner man tabellen (Figur 39). Hvis man trykker på knappen «Stream Table», vist her, får man denne tabellen i flytskjemaet også. Om man gjør endringer på simuleringen, og kjører den på nytt, vil tabellen oppdateres

Display: All streams Format: GEN_M Stream Table

	BOTTOM	DIST	FEED	
Temperature C	134,9	98,6	100,0	
Pressure bar	1,000	1,000	1,000	
Vapor Frac	0,000	0,000	0,000	
Mole Flow kmol/hr	114,624	85,376	200,000	
Mass Flow kg/hr	12162,319	8570,239	20732,558	
Volume Flow cum/hr	16,011	13,844	29,098	
Enthalpy Gcal/hr	0,228	-4,084	-4,048	
Mole Flow kmol/hr				
HEP	1,176	82,824	84,000	
EB	113,448	2,552	116,000	
Mole Frac				
HEP	0,010	0,970	0,420	
EB	0,990	0,030	0,580	

Figur 39. Skjerm bilde fra Aspen Plus. Viser de resulterende strømmene for simuleringen.

Man kan finne informasjon om kolonnen i «result summary» → «model summary». Man kan finne mer informasjon om kolonnen i «data browser», under «blocks» → «DSTWU» (navn) → «results», vist på Figur 40. Under fanen «balance» finner man en energi- og massebalanse for kolonnen, vist på Figur 41.

Summary Balance Reflux Ratio Profile

Results

Minimum reflux ratio:	1,21974508	
Actual reflux ratio:	1,8	
Minimum number of stages:	7,86533969	
Number of actual stages:	14,3143025	
Feed stage:	8,24757695	
Number of actual stages above feed:	7,24757695	
Reboiler heating required:	2222,7881	kW
Condenser cooling required:	2164,84371	kW
Distillate temperature:	98,6184196	C
Bottom temperature:	134,936195	C
Distillate to feed fraction:	0,42688	
HETP:		

Figur 40. Skjerm bilde fra Aspen Plus. Viser resultat for DSTWU-kolonnen.

Summary **Balance** Reflux Ratio Profile

Mass and energy balance

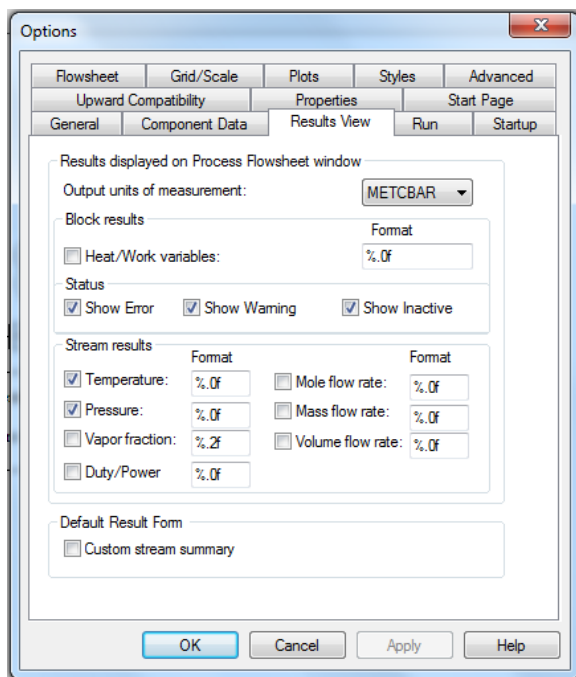
	Total	In	Out	Rel. diff
Mole-flow: kmol/hr	200	200	200	0
Mass-flow: kg/hr	20732,5578	20732,5578	20732,5578	1,7547E-16
Enthalpy: kW	-4542,6108	-4484,6665	-4484,6665	-0,0127557

Figur 41. Skjerm bilde fra Aspen Plus. Viser masse og energi-balanse for DSTWU-kolonnen.

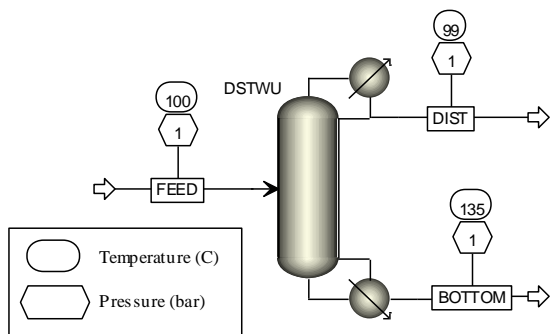
Renheten i de resulterende strømmene, stemmer over ens med oppgaven. Destillatstrømmen fikk en mol-strøm på 85,376 kmol/h i Aspen Plus, mens beregnet var 85,42 kmol/h (likning 2). Avrundet til et desimal . Minimum reflux er funnet å være 1,22 i Aspen Plus, som avviker noe fra 1,16 i oppgaven. Antall trinn er kalkulert til 14,3, noe som stemmer forholdsvis bra med de 6,7 (forsterker) + 6,2 (avdriver) teoretiske trinnene i oppgaven. Oppgaven har 6,7 teoretiske trinn over føding, mens Aspen Plus har 7,2. Virkningsgraden til platene er ikke tatt hensyn til i simuleringen. Man kan heller ikke regne på størrelsen til platene med DSTWU-kolonnen.

En kan merke seg at det er en viss differanse i masse og energibalansene, noe det i teorien ikke skulle vært. Noe av forklaringen på dette, kan være at når effekten til oppvarming og nedkjøling beregnes av utsyrsenheten, og ikke overføres med en material- eller energistrøm, kan dette resultere i avvik^[28].

Man kan få en del resultater presentert som symboler tilknyttet strømmene. På verktøylinjen trykker man på «tools» → «options». En dialogboksen dukker opp (Figur 42). Her er det valgt at trykk og temperatur skal presenteres. I kolonnen «Format», kan man bestemme antall desimaler. Flytskjemaet ser nå ut som på Figur 43. Etter simuleringen har hver av strømmene fått symboler som indikerer temperatur og trykk. På verktøylinjen kan man gå til «view» → «global» data for å slå dette av og på.



Figur 42. Skjerm bilde fra Aspen Plus. Viser spesifikasjonen for symbolene i flytskjemaet.

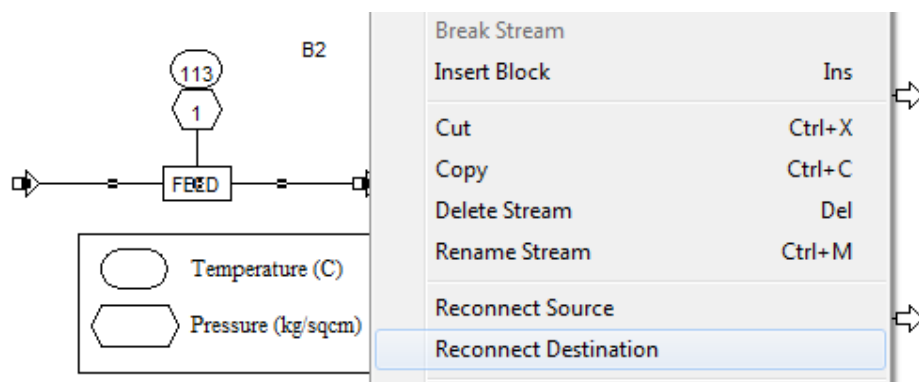


Figur 43. Skjermbilde fra Aspen Plus. Viser flytskjema med bobler med data. Tegnforklaring i nedre venstre hjørne.

3.4. Detaljert simulering av kolonne

Nå har vi fått et utgangspunkt for hvordan en kolonne for destillering av en blanding av 42 % n-heptan og 58 % etylbenzen bør være. Nå kan vi erstatte DSTWU-kolonnen, med den mer omfattende RadFrac-kolonnen, som blant annet kan gi oss diameteren til kolonnen. Om man skulle ønske å gå tilbake til simuleringen med DSTWU-kolonnen, så bør man lagre denne før man begynner med endringene, for så å lagre den endrede simuleringen med et nytt navn.

For å fjerne DSTWU-kolonnen fra flytskjemaet, venstreklikker man på den og trykker så på «delete»-tasten, og trykker «ok» i dialogboksen. Man legger så inn en RadFrac-kolonne, ved å trykke på denne i modellbiblioteket, under «columns», for så å trykke én gang i flytskjemaet, der DSTWU-kolonnen tidligere sto. For å tilkoble strømmene til portene på RadFrac-kolonnen, høyreklikker man på strømmen og velger «reconnect destination» (for føding) eller «reconnect source» (for destillat og bunnprodukt) fra menyen som dukker opp (Figur 44). Man kobler så strømmene til tilsvarende porter som for DSTWU-kolonnen.



Figur 44 Skjermbilde fra Aspen Plus.

Hvis man nå åpner «data browser» og trykker «next», kommer man til «blocks» → «RADFRAC» (navn) → «setup». Under fanen «configuration», må vi fylle inn informasjon om kolonnen. Fra DSTWU vet vi at det trengs 7,2 trinn over føding og totalt 14,3 trinn, derfor 7,1 trinn under føding. RadFrac-kolonnen godtar ikke antall trinn med desimaltall, noe som også gjelder virkelige platekolonner. Bruker derfor totalt 16

trinn, med føding på trinn 9. Setter «number of stages» til 16 og «condenser:» settes til «total». Lar «reboiler» stå som «kettle», slik at kolonnen modellen selv regner ut effektbehovet, om noen strømmer endrer seg. I feltet «operating specifications» må vi føre inn to parametere vi vet om prosessen. I dette tilfellet vet vi at reflux ratio er 1,8 og at destillat-strømmen er 85,42 kmol/h (Likning 2)(Figur 45).

Figur 45 Skjermbilde fra Aspen Plus.

Under fanen «streams», settes «FEED» (navn) → «Stage» til 9. Under fanen «pressure» settes «Top stage / Condenser pressure» → «Stage 1 / Condenser pressure» til 1 bar. Vi tar ikke hensyn til trykfall, og lar derfor de andre feltene i fanen «pressure» forbli tomme.

Vi kan nå kjøre en simulering for å se hvilket resultat kolonnen gir i sin nåværende form.

Under «results summary» → «streams» finner en da at konsentrasjonen av n-heptan i destillatet er 97,1 %mol og konsentrasjon av etylbenzen i bunnproduktet er 99,1 %mol. Helt uten å gi programmet noen føringer for ønskede spesifikasjoner for de resulterende strømmene, gir altså kolonnen et resultat som antagelig ville vært tilfredsstillende i en reell produksjonssituasjon. Men vi kan få programmet til å justere parametere for prosessen, slik at vi får eksakt ønsket resultat.

Vi ønsker å oppnå 97,0 %mol av n-heptan i destillatstrømmen. Man kan da legge inn en spesifikasjon med et mål for prosessen under «Blocks» → «RADFRAC» (navn) → «design specs». Her trykker man på «new», og så «ok» i dialogboksen. «Design specification» → «type» settes til «mole purity». «Specification» → «target» settes til 0,97. «Stream type» skal være «product». Bytt så til fanen «components». I feltet «components» velges «HEP» (navn) over til «selected components» siden det er konsentrasjonen av denne komponenten vi er interessert i. I feltet «base components» velges begge over til «selected components», da begge komponentene er i kolonnen(Figur 46).

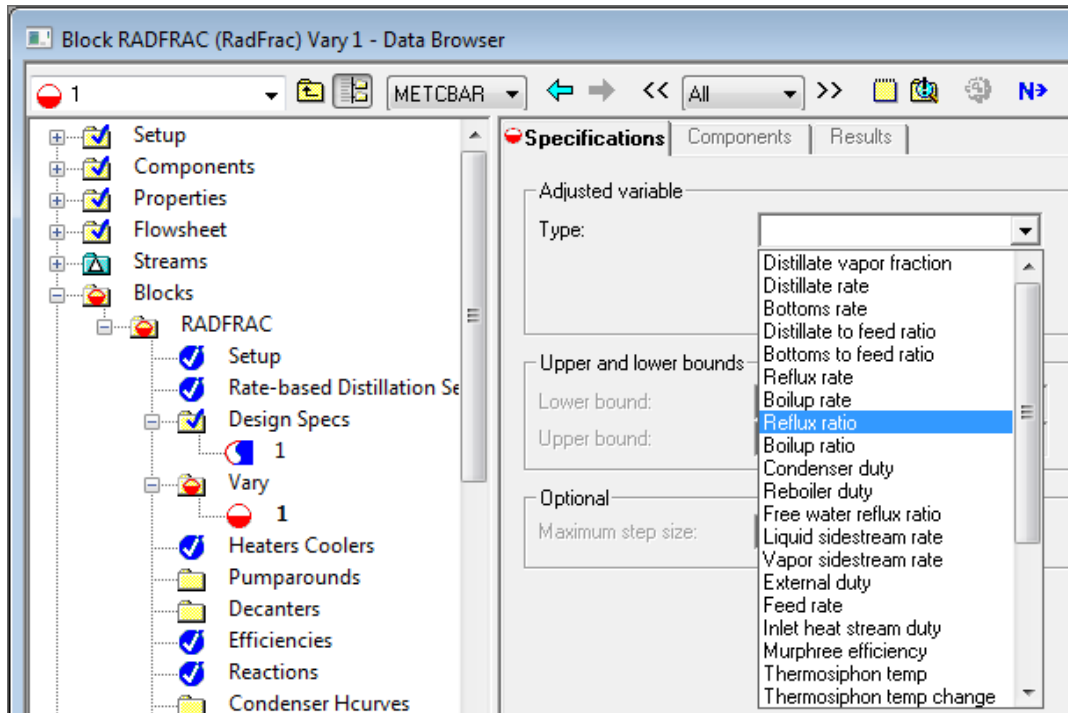
I større systemer, hvor mange ulike komponenter spesifiseres under «components» i «data browser», mens de ulike enhetsoperasjonene kun bruker enkelte av disse komponentene, så må man plukke ut de som brukes i enheten man spesifiserer.



Figur 46. Skjerm bilde fra Aspen Plus. Feltet «Components» er komponent man er interessert i «design specification», mens «base components» er komponentene som er med i enhetsprosessen.

Bytt til fanen «feed / product streams». «DIST» (navn) velges fra «available streams» over i «selected streams», da det er denne strømmen som skal ha konsentrasjonen, som er spesifisert som mål for «design spec».

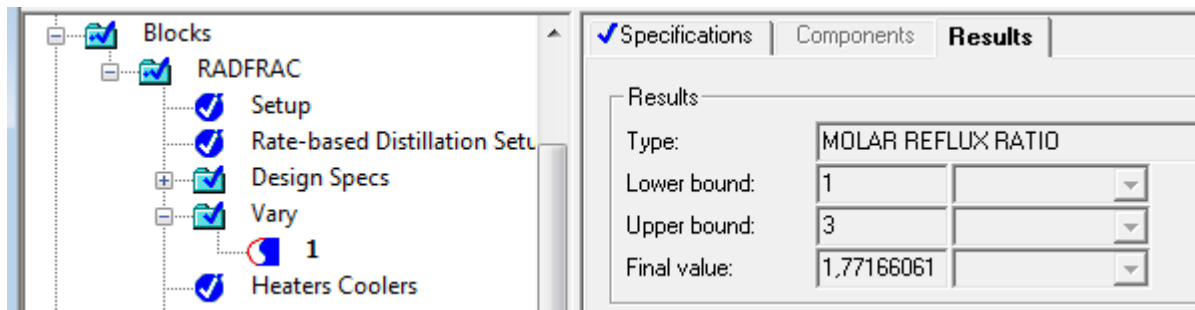
Gå så til «blocks» → «RADFRAC» (navn) → «vary». Denne mappen ble markert med rødt i det man la til en ny «design spec». Under «vary» bestemmes parameteren som skal varieres for å nå målet spesifisert under «design spec». Trykk på «new», og så «ok» i dialogboksen. Under «type», i feltet «adjusted variable», finnes listen over parametere som kan justeres for å nå målet (Figur 47). Hvis parameteren man ønsker å variere er blant «operating specifications» for en enhetsprosess, må en startverdi føres inn her (Figur 45). Det betyr at vi kan velge å variere reflux ratio eller destillatstrømmen, men ikke f.eks. oppvarmingseffekten i kokeren («reboiler duty»), da vi ikke har spesifisert denne. Siden destillatstrømmen er fastlåst av føding og ønsket sammensetning av destillat (Likning 2), velges det å variere reflux ratio. Setter «lower bound» og «upper bound», intervallet reflux skal være innenfor, til henholdsvis 1 og 3. Setter «maximum step size» til 0,01.



Figur 47 Skjermbilde fra Aspen Plus.

Kjør simuleringen. Nå er konsentrasjon av n-heptan i destillat 97,0 %mol og etylbenzen i bunnprodukt 99,0 %mol.

I «data browser», gå til «blocks» → «RADFRAC» (navn) → «vary» → fanen «results». Her kan man se at den endelige reflux ratio er 1,77 (Figur 48). Man finner også dette resultatet under «blocks» → «RADFRAC» (navn) → «modell summary».

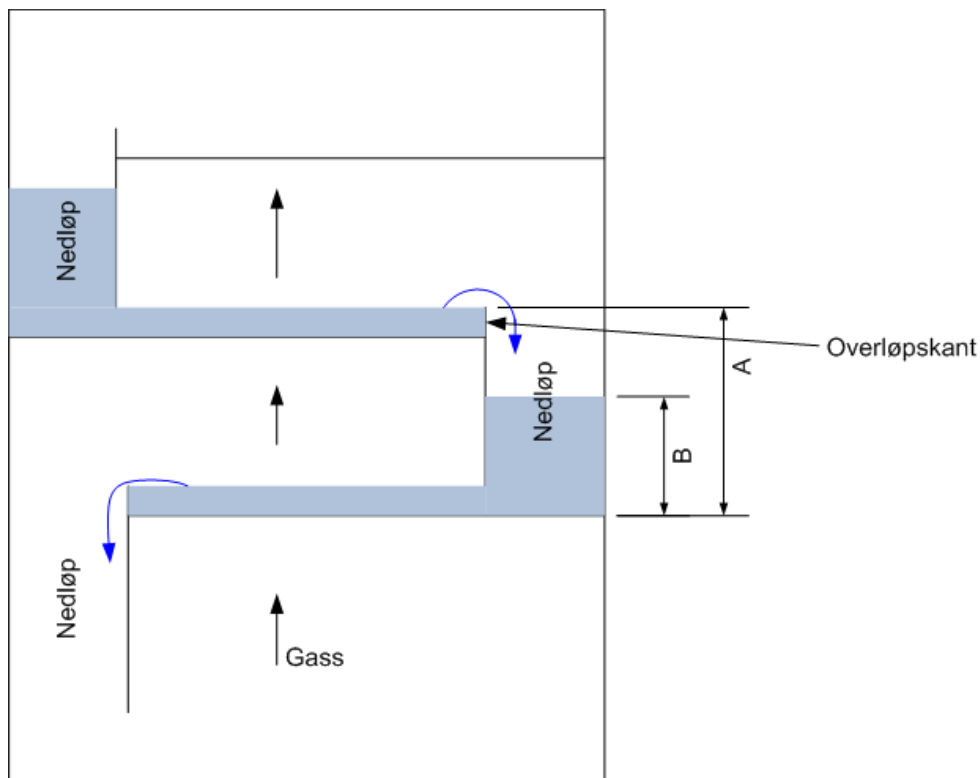


Figur 48 Skjermbilde fra Aspen Plus.

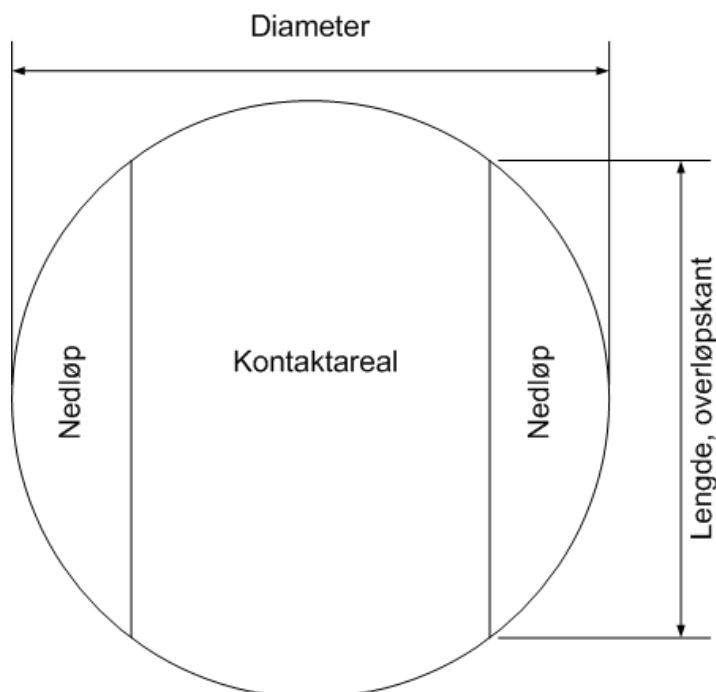
Størrelse på kolonne

For å finne diameteren på kolonnen brukes funksjonen «tray sizing». «Tray» er engelsk for utvekslingsplate (kort: «plate») og om man finner nødvendig diameter for denne, er kolonnediameteren mer eller mindre gitt av dette.

Hastigheten på gassen oppover i kolonnen må ikke være så stor at ikke væsken blir blokkert. I tillegg må man ha et adskilt nedløp for væsken, som heller ikke kan være for lite, da det kan føre til opphopning av væske oppover i kolonnen^[29] (Figur 49).



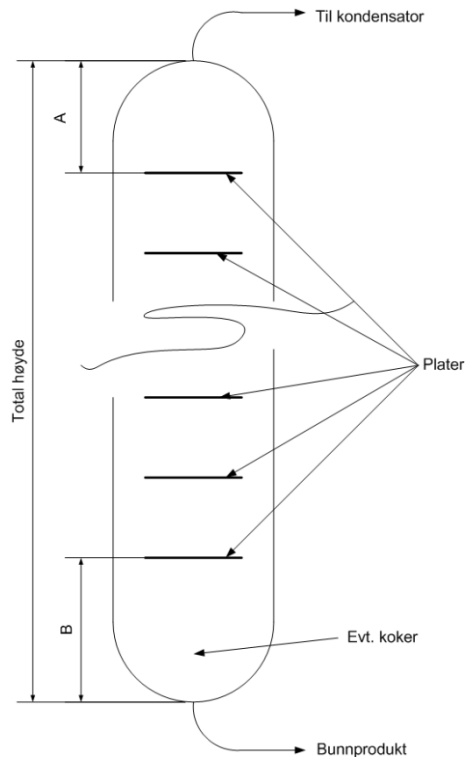
Figur 49. Hvis dampstrømmen er for stor, vil trykket av denne føre til at væsken i et nedløp ikke kommer ut på platen under, men hoper seg opp i nedløpet og tilslutt oversvømmer platen over. Fractional flooding = B / A



Figur 50. Illustrasjon av platen, sett ovenfra. Nedløpet til og fra platen tar bort areal, slik at utveksling mellom damp og væske kun skjer i arealet merket «kontaktareal». Lengden på overløpskanen («Side weir length») blir gitt i resultatene fra «tray sizing» [30][31]. «Minimum downcomer area» = $(2 * \text{Nedløp}) / (\text{Tverrsnittsareal til kolonnen})$

For å legge inn «tray sizing», gå til «blocks» → «RADFRAC» (navn) → «tray sizing». Her trykker man på «new», og så «ok» i dialogboksen. I feltet «trayed section» settes «starting stage» til 2 og «ending stage»

til 15. Siden første trinn i kolonnen er kondensator og siste trinn er koker, kan ikke disse tas med i størrelsesberegningen. Det er spesifisert i oppgaven at det skal være hullplater i kolonnen, som tilsvarer «sieve tray», derfor settes «tray type» til «sieve». I feltet «tray geometry» kan en merke seg forhåndsverdier for parametere som påvirker kolonnens størrelse. Disse benyttes, da oppgaven ikke spesifiserer dette. «Tray spacing» (plateavstand) er satt til 0,6096 m = 2 fot. Denne avstanden vil påvirke totalhøyden til kolonnen(Figur 51).



Figur 51. Illustrasjon av den totale høyden til kolonnen. «A» er avstand mellom topp av kolonne og øverste plate og «B» er avstand mellom nederste plate og bunn av kolonne. «A» og «B» vil avhenge av utformingen av kolonnen i topp og bunn. F.eks. hvordan dråpeutskiller og tilbaketløp er utformet i toppen, hvordan rør til og fra koker er utformet og hvor høyt væskeniå en skal ha i bunnen.

Gå så til fanen «design». Under feltet «sizing criteria» → «minimum downcomer area» settes andelen for areal på nedløpet i forhold til det totale platearealet(Figur 50). I oppgaven er det gitt et påslag på nødvendig areal, på 5 %.

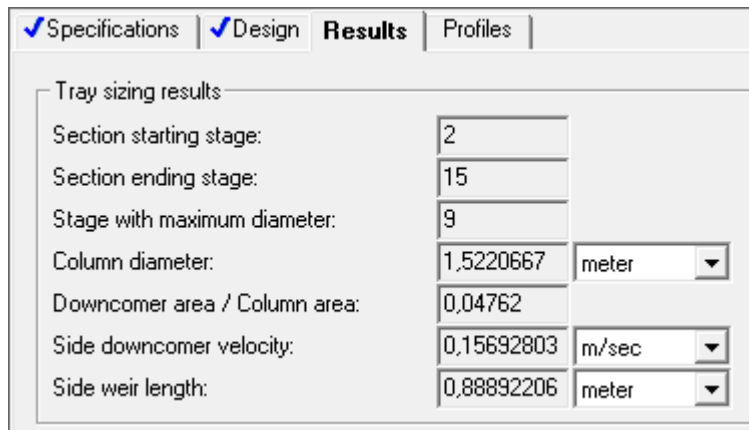
$$\text{Fractional minimum downcomer area} = \frac{\text{Nedløpsareal}}{\text{Totalareal}} = \frac{\text{Totalareal} - \text{Nødvendig areal}}{\text{Totalareal}}$$

$$= \frac{\text{Nødvendig areal} * 1,05 - \text{Nødvendig areal}}{\text{Nødvendig areal} * 1,05} = \frac{1,05 - 1}{1,05} = \frac{0,05}{1,05} \approx 0,04762$$

Likning 5

«Minimum downcomer area» settes så til 0,04762. Lar forhåndsvalget i «fractional approach to flooding» stå (verdi: 0,8)(Figur 49). I feltet «design parameters», settes «flooding calculations method» til «Fair72», som er en konservativ metode^[32]. «Fair72» er et uttrykk for væskeshastigheten i væskenedløpet, som en funksjon av plateavstanden og «fractional approach to flooding»

Kjør simuleringen. Nå kan resultater for platestørrelse leses av under «blocks» → «RADFRAC» (navn) → «tray sizing» → fanen «results» (Figur 52). Under fanen «profiles» kan de individuelle resultatene for hver plate leses av. Det er platen som gir størst total størrelse som bestemmer diameteren på kolonnen^[33]. I Aspen Plus er denne funnet å være 1,53 m, om man avrunder opp.



Figur 52 Skjermbilde fra Aspen Plus.

Interne damp- og væskestrømmer

Etter at simulering med plater har blitt kjørt, så kan man hente ut profiler over hvordan parametere endrer seg i kolonnens høyde. Disse finner man i «data browser» under «blocks» → «RADFRAC» (navn) → «profiles».

Tabellene som er tilgjengelige viser data for hvert trinn. En del parametere er på formen «from» eller «to», og beskriver en parameter henholdsvis fra eller til et trinn. Det kan være f.eks. hvor stor væskestrøm som forlater («from») et trinn, eller densiteten til dampen som strømmer til («to») et trinn.

I fanen TPFQ vises temperatur, trykk, tilført eller uttatt effekt («heat duty») og damp- og væskestrøm for hvert trinn (Figur 53). Øverst i kolonnen, fra trinn 2 til 1, er dampstrømmen størst, med 236,8 kmol/h. En kan merke seg at dampstrømmen fra trinn 1 er 0. Dette kommer av at trinn 1 er en total kondensator, slik at all damp blir kondensert til væske her. Den største væskestrømmen er nederst i kolonnen 332,9 kmol/h (fra trinn 15 til 16).

En kan merke seg at væskestrømmen fra trinn 16, 114,58 kmol/h, er bunnproduktstrømmen. En kan også merke seg kolonnen «heat duty», som viser tilført eller uttatt effekt på trinnene. I denne kolonnen gjelder dette trinn 1 (kondensator) og trinn 16 (koker).

TPFQ						
Compositions		K-Values		Hydraulics		Reactions
Efficiencies						
View: Summary		Basis: Mole				
Profiles						
Stage	Temperature	Pressure	Heat duty	Liquid from	Vapor from	
	C	bar	kW	kmol/hr	kmol/hr	
1	98,62079	1	-2120,5117	236,755249	0	
2	99,5609927	1	0	149,389891	236,755249	
3	100,972334	1	0	146,770128	234,809891	
4	102,960028	1	0	143,50234	232,190128	
5	105,506688	1	0	140,092491	228,92234	
6	108,377882	1	0	137,100213	225,512491	
7	111,154932	1	0	134,880097	222,520213	
8	113,447421	1	0	133,470156	220,300097	
9	115,094573	1	0	332,303243	218,890156	
10	117,651128	1	0	330,195553	217,723243	
11	121,235535	1	0	328,784762	215,615553	
12	125,399611	1	0	328,844854	214,204762	
13	129,262202	1	0	330,135055	214,264854	
14	132,141285	1	0	331,711315	215,555055	
15	133,94747	1	0	332,929621	217,131315	
16	134,958739	1	2178,51488	114,58	218,349621	

Figur 53 Skjermbilde fra Aspen Plus. Viser tabellen «TPFQ», som viser væske- og dampstrømmer i kolonne, i tillegg til tilstanden på trinnet.

I fanen «compositions» kan man se sammensetningen av gass- og væskeblandingen på hvert trinn.

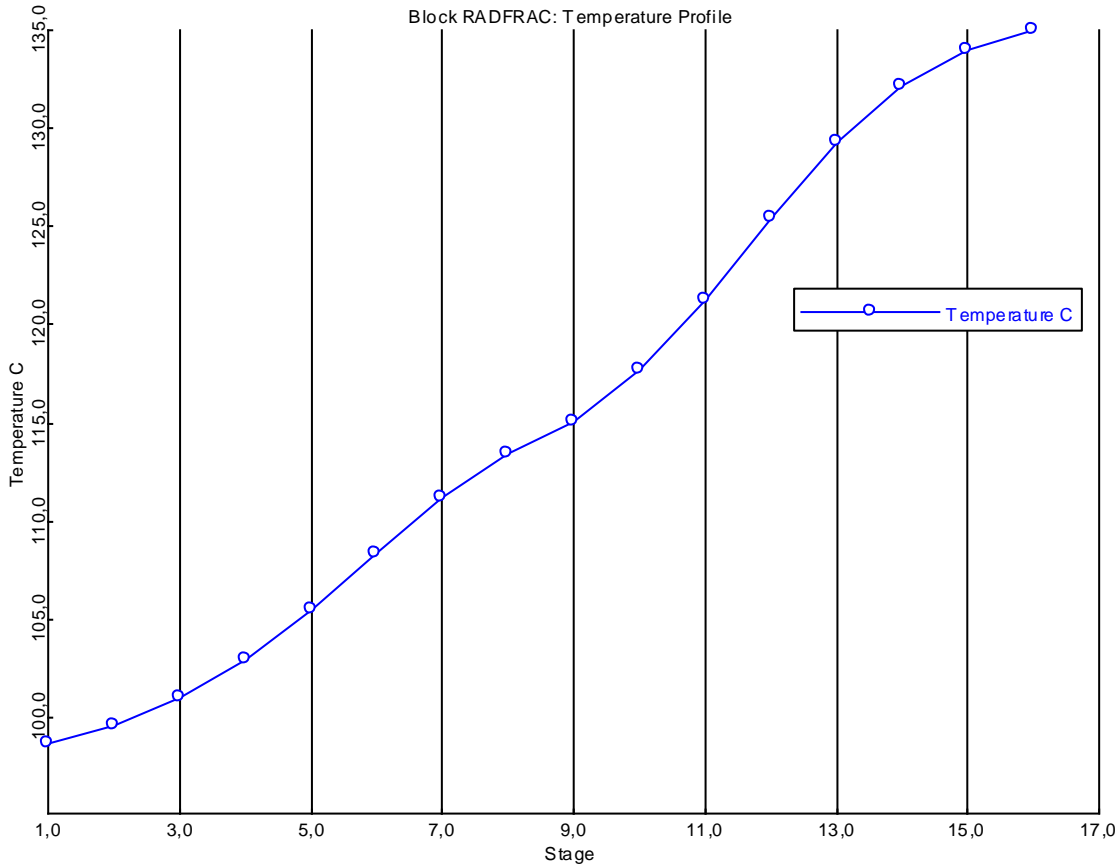
I fanen «K-values» kan man for hver av komponentene se forholdet mellom hvor mye av stoffet som er i gass og væskefase. Uttrykket for K-verdien er som følger^[34]:

$$K = \frac{y}{x}$$

Likning 6

I fanen «hydraulics» vises mange parametere for hvert trinn, bl.a. viskositet, temperatur og densitet.

Man kan bruke «plot wizard» øverst i «data browser» og få presentert data som kurver, f.eks. hvordan temperaturen endrer seg oppover i kolonnen(Figur 54).



Figur 54 Kurve fra Aspen Plus. Viser temperatur på hvert trinn i kolonnen.

3.4.1. Resultat

Etter simulering kan vi finne følgende data:

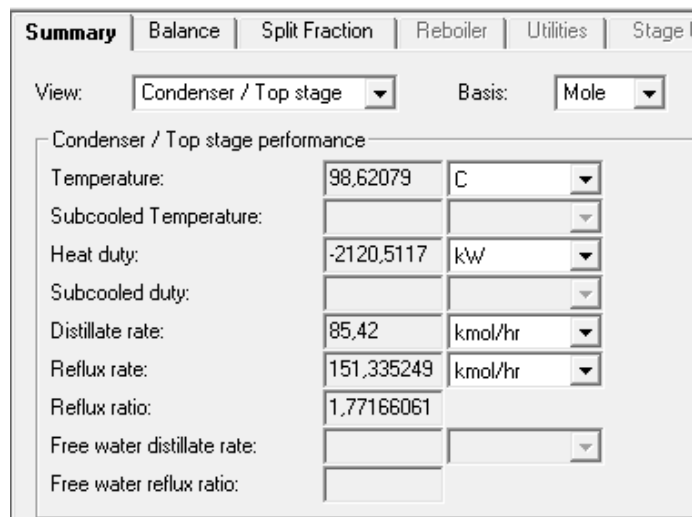
Tabell over strømmene: i «check results»: «results summary» → «streams» (Figur 55)

Spesifikasjoner for kondensatoren: i «data browser»: «blocks» → RADFRAC (navn) → «results» (Figur 56)

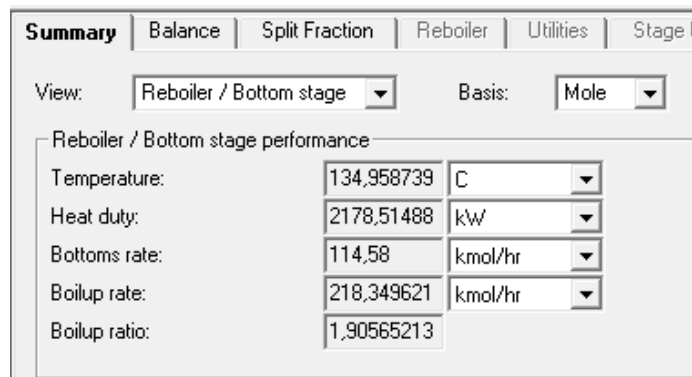
Spesifikasjoner for kokeren: i «data browser»: «blocks» → RADFRAC (navn) → «results» (Figur 57)

	BOTTOM	DIST	FEED	
Temperature C	135,0	98,6	113,0	
Pressure bar	1,000	1,000	1,000	
Vapor Frac	0,000	0,000	0,000	
Mole Flow kmol/hr	114,580	85,420	200,000	
Mass Flow kg/hr	12157,847	8574,711	20732,558	
Volume Flow cum/hr	16,004	13,851	29,634	
Enthalpy Gcal/hr	0,230	-4,086	-3,906	
Mole Flow kmol/hr				
HEP	1,143	82,857	84,000	
EB	113,437	2,563	116,000	
Mole Frac				
HEP	0,010	0,970	0,420	
EB	0,990	0,030	0,580	

Figur 55 Skjerm bilde fra Aspen Plus.



Figur 56 Skjerm bilde fra Aspen Plus. Spesifikasjoner for kondensator. En merke seg væskestrømmen som går tilbake som relflux («reflux rate»).



Figur 57 Skjerm bilde fra Aspen Plus. Spesifikasjoner for koker.

Alle resultatene vi har funnet underveis i simuleringen samles (Tabell 5).

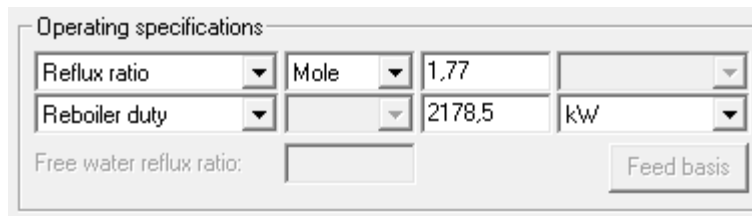
Tabell 5. Hovedparametere for kolonnen som er beregnet.

Parametere	Verdi
Antall trinn	16
Antall plater	14
Platetype	Hullplate
Reflux ratio	1,77
Destillat, mengde	85,48 kmol/h
Bunnprodukt, mengde	114,58 kmol/h
Reflux, mengde	151,3 kmol/h
Største interne væskestrøm (bunn i kolonne)	332,9 kmol/h
Største interne dampstrøm (topp i kolonne)	236,8 kmol/h
Tilført effekt i kokeren	2178,5 kW
Uttatt effekt i kondensator	-2020,5 kW
Kolonnediameter	1,53 m

3.4.2. Respons på endringer

For å se hva endringer i input fører til av endringer i resultat for kolonnen, kjøres en rekke simuleringer på en RadFrac-kolonne (Tabell 6). Til simuleringene benyttes RadFrac-kolonnen vi har spesifisert i «Detaljert simulering av kolonne».

For å holde effekten i kokeren konstant, og for å kunne endre den, gjøres først en endring i «data browser» under «blocks» → «RADFRAC» (navn) → «setup» → i feltet «operating specifications», endres «destillate rate» til «reboiler duty». Denne settes til 2178,5 kW. Man må også endre reflux til 1,77 (Figur 58).



Figur 58 Skjermbilde fra Aspen Plus. Viser endringer i input i «data browser»: «blocks» → «RADFRAC» (navn) → «setup»

Husk å fjerne «design specs» og «vary», slik at ikke programmet forsøker å endre reflux ratio. Dette gjøres ved å gå til «data browser»: «blocks» → «RADFRAC» (navn) → «vary» → i feltet «object manager» markere «1» (navn) og trykke på «delete»-knappen. Det samme gjentas under «design specs».

Starter med uendret simulering før hver endring, slik at ikke endringene bygger på hverandre.

Tabell 6. Endringer i input på kolonnen, med hvilket resultat dette medfører og forklaring på hvorfor.

Endring i input	Resultat	Forklaring
Redusere antall plater (husk at fødingen må flyttes (la den være i «midten» av kolonnen), og «tray sizing» endres for å passe med det nye antallet)	Konsentrasjon av n-heptan i destillat synker, det samme gjør konsentrasjon av etylbenzen i bunnprodukt. Kolonnediameter, interne strømmer og kondensator effekt endres ikke nevneverdig.	Med færre trinn, er det færre muligheter for utveksling mellom damp og væske, som gir dårligere resultat. I et McCabe-Thiele-diagram vil man komme til lavere konsentrasjon i destillat, om man beveger seg færre trinn fra føding.
Redusere tilført effekt i koker (endring som fortsatt gir løsnings; f.eks 1000kW)	Konsentrasjonen av n-heptan i destillat reduseres, med holder seg bedre enn konsentrasjon av etylbenzen i bunnprodukt. Mengden destillat minker, mens bunnprodukt øker. Kolonnediameter minker.	Den væska som fordampes blir kondensert, og gir forholdsvis god konsentrasjon av n-heptan. Men siden effekten er redusert, fordampes mindre, så mengden destillat blir liten. Mye av fødingen vil dermed gå rett ut i bunnproduktet. Siden mengden damp minker, minsker diameteren
Redusere tilført effekt i koker (stor endring; tilført effekt kun 1kW)	Dialogboks om at simulering ikke konvergerer. Se forklaring under «run control panel» (se Figur 38). En advarsel om at trinn 1 har tørket opp, og det altså ikke er noen strøm her.	Det er altså ikke tilstrekkelig effekt til å få fordampet nok væske til at kolonnen fungerer. Fødingen går uendret ut i bunnproduktet

Øke tilført effekt i koker (til f.eks. 4000 kW)	Bunnproduktet blir tilnærmet ren etylbenzen, men mengden minker. Destillatmengden øker, men konsentrasjonen av n-heptan blir lavere. De interne strømmene øker. Kolonnediameteren øker.	Mye av væsken i kolonnen fordampes, slik at det blir mindre væske i bunnen av kolonnen. Begge komponenter blir fordampet av den store effekten i koker, slik at destillatet ut av kondensator inneholder en stor andel av minst flyktig forbindelse. Når mye damp går opp i kondensatoren, går mye væske i reflux. Siden dampstrømmen øker, vil kolonnediameteren øke.
Øke tilført effekt i koker (stor endring; til f.eks. 10000 kW)	Dialogboks om at det er advarsler knyttet til simulering. Under «run control panel» finner en at trinn 16 (koker) har tørket ut, og altså ingen strøm her.	Den tilførte effekten er så stor at en svært stor andel av den tilførte væsken er fordampet, at det er svært lite væske igjen i kokeren. Fødingen vil dermed bli fordampet og gå opp i kondensatoren og ut som destillat med tilnærmet samme sammensetning.
Redusere refluxforholdet	Konsentrasjonen av etylbenzen i bunnproduktet blir høyere, men mengden minker. Mengden destillat øker, men konsentrasjon av n-heptan blir lavere. Den interne væskestrømmen blir mindre, mens dampstrømmen ikke endres så mye. Kolonnediameter minker litt.	Redusert refluxforhold gir mindre væske i tilbakeløp, noe som reduserer effektbehovet i koker. Når effekt er konstant, blir resultatet likt det vi fikk når effekten ble økt. Siden dampstrømmen minker forholdsvis lite, så endres heller ikke kolonnediameteren særlig.
Flytting føding	Om man flytter fødingen oppover eller nedover i kolonnen, så blir konsentrasjonen av n-heptan i destillat og etylbenzen i bunnprodukt redusert.	Når fødingen flyttes, blir plasseringen mindre optimal. Selv om man får flere plater i avdriver, når det blir få i forsterker, vil mange av platene ha tilnærmet samme sammensetning og tilstand, slik at det er lite drivkraft, og virkningen blir dårlig. Det blir samme tilfelle om fødingen flyttes motsatt vei. ^[35]
Endre avstand mellom plater	Ved redusert plateavstand, blir kolonnediameteren større, mens økt avstand reduserer diameteren. Sammensetningen og mengden i de resulterende strømmene er uendret.	Ved mindre avstand mellom platene, blir volumet i væskenedløpet redusert, om plateutformingen er uendret. For å unngå oversvømming av platene, må volumet i væskenedløpet økes, ved øke platediameteren.
Bytte egenskapsmetode fra «PENG-ROB» til «IDEAL»	Konsentrasjonen av n-heptan i destillat øker litt, mens konsentrasjon av etylbenzen i bunnprodukt reduseres.	Interaksjonen mellom de to komponentene beskrives forskjellig av de to egenskapsmetodene. Hvilken metode som er «riktigst» må bestemmes på basis av erfaring fra tilsvarende systemer, eller ved å kjøre prosessen i en virkelig kolonne. Med PENG-ROB valgte vi å bruke få trinn, mens med IDEAL man tydelig bruke fler.

3.5. Sammenlikning med håndberegninger

I vedlegg 1 finnes håndberegningsoppgaven som simuleringen er basert på. Resultatene herfra blir sammenliknet med resultatene fra simuleringen (Tabell 7).

Effekt i koker og fordamper er ikke med i vedlegg 1. Utregningen blir som følger:

Fordampingsentalpi er gitt i oppgaven: n-heptan: 31850 kJ/kmol; etylbenzen: 36860 kJ/kmol

Effekt som tas ut i kondensator:

$$Q = \text{dampstrøm} * \text{fordampingsentalpi for sammensetning i topp}$$
$$= \frac{239,1 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}}{3600 \frac{\text{s}}{\text{h}}} * \left(0,97 * 31850 \frac{\text{kJ}}{\text{kmol}} + 0,03 * 36860 \frac{\text{kJ}}{\text{kmol}} \right) = 2125,4 \text{ kW}$$

Hvis man antar at blandingen som fordamper i bunnen av kolonnen har samme sammensetning som dampen som kondenser, og ikke tar hensyn til oppvarmingen av væske som går ut som bunnprodukt, vil koker-effekten bli den samme.

Tabell 7. En sammenstilling av resultatene for en kolonne, som både er simulert i Aspen Plus og håndberegnet.

Parametere	Aspen Plus	Håndberegninger
Antall trinn	16	18
Antall plater	14	18
Platetype	Hullplate	Hullplate
Reflux ratio	1,77	1,8
Destillat, mengde	85,48 kmol/h	85,4 kmol/h
Bunnprodukt, mengde	114,58 kmol/h	114,6 kmol/h
Reflux, mengde	151,3 kmol/h	153,7 kmol/h
Største interne væskestrøm (bunn i kolonne)	332,9 kmol/h	353,7 kmol/h
Største interne dampstrøm (topp i kolonne)	236,8 kmol/h	239,1 kmol/h
Tilført effekt i kokeren	2178,5 kW	2125,4 kW
Uttatt effekt i kondensator	-2020,5 kW	-2125,4 kW
Kolonnediameter	1,53 m	1,5 m

Sett over et så stemmer resultatene bra overens. Vi fikk lik sammensetning av de resulterende strømmene, og mengdene ble like også. De indre strømningene ble noe mindre, siden vi bruker et lavere reflux ratio. Dette medvirker også til at tilført effekt i koker og uttatt effekt i kondensator blir mindre, siden mengdene som skal varmes og kjøles blir mindre.

Den største forskjellen kan vel sies å være at antall plater blir noe mindre. Når en simulering ble utført på kolonnen med egenskapsmetode: IDEAL, så vi at renheten i de resulterende strømmene ble dårligere. En bør derfor kunne si at å bruke egenskapsmetode IDEAL i dette tilfellet gir et konservativt resultat.

4. Destillasjon av multikomponentblanding

4.1. Om regneeksemplet

Eksempelet er basert på en simulering som er presentert i en publikasjon av Aspen Plus^[36]. Mye av input for kolonnen i dette eksemplet er identisk med input i publikasjonen, men det brukes bl.a. en annen multikomponentblanding i føding.

Dette eksemplet tar for seg en separering av en multikomponentblanding i fraksjoner.

Multikomponentblandingen er en råolje fra Nordsjøen, slik at prosessen er en råoljeraffinering.

Fraksjonene etter separeringen ligner de oljeproduktene man bruker i hverdagen, slik som bensin, diesel og parafin. I en kommersiell raffineringsprosess er fraksjonene mer å betrakte som råstoff for produktene som er i handel. Fraksjonene behandles videre, f.eks. ved å lage lettere forbindelse av bunnproduktet^[37], og å tilsette andre forbindelser til drivstoff, slik at det egner seg for bruk i kjøretøy^[38].

Råoljen består av mange ulike kjemiske forbindelser, men istedenfor å skille ut enkeltforbindelsene, skiller man ut fraksjoner. Fraksjonene er andeler av råoljen som har et bestemt kokepunktssområde, og selv om det er en blanding av stoffer, har de likevel såpass like egenskaper at de kan brukes slik.

Temperaturområdene en definerer for de ulike fraksjonene varierer noe mellom ulike kilder, men det er satt opp en inndeling som brukes i dette eksemplet (Tabell 8).

Tabell 8. Viser kokepunktssområdene^[39] som er brukt i dette eksemplet.

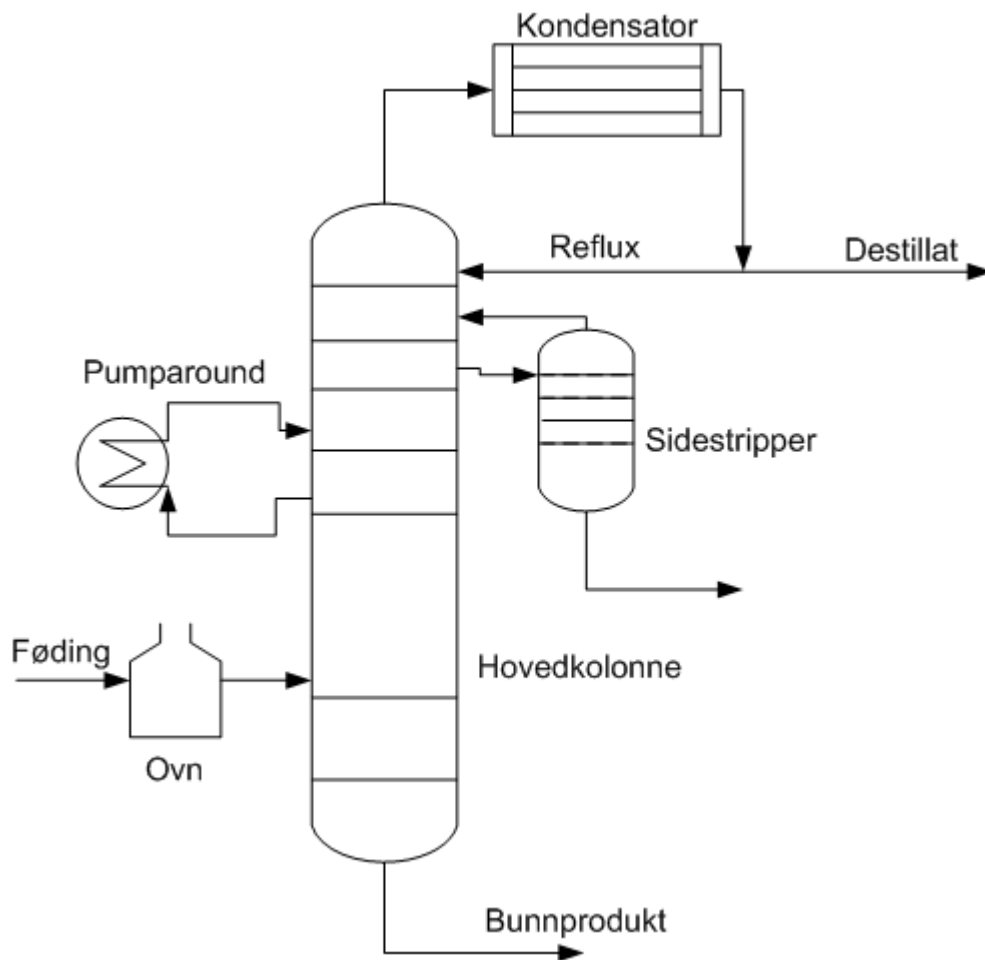
Fraksjon	Bruksområde	Kokepunkt [°C]
Lettbensin	Drivstoff til kjøretøy	0 - 70
Bensin	Drivstoff til kjøretøy	70 - 140
Nafta	Råstoff til produksjon av bensin	140 - 180
Parafin	Brukes til oljefyr og som flydrivstoff (Jet A-1)	180 – 250
Diesel	Drivstoff til kjøretøy; tung fyringsolje ligger i samme fraksjon	250 – 350
Tungolje	Behandles videre i annet utstyr	350 -

De resulterende strømmene fra kolonnen kalles «nafta», «parafin», «diesel», «AGO» (Atmospheric gasoil^[40]). Tungolje som er fordampet, og blir videre behandlet).

Dette er en stor kolonne. Fødingen til hovedkolonnen er 12 730 m³/døgn. Statoil produserer, til sammenlikning, ca. 19 000 m³/døgn (2010) av statfjord-råoljen^[41], slik at kolonnen som blir satt opp i denne simuleringen kan ta i mot 2/3 av dagsproduksjonen av denne råoljen.

Kolonnemodell i Aspen Plus

PetroFrac-modellen består av en hoveddestillasjonskolonne med tilhørende kondensator med refluxsløyfe og ovn for oppvarming av føding. I tillegg har den muligheter for såkalte pumparounds og sidestrippere (Figur 59).



Figur 59. Prinsippskisse av PetroFrac.

Hoveddestillasjonskolonnen deler opp fødingen slik at fraksjoner av råoljen med lavt kokepunkt er i toppen av kolonnen, mens fraksjoner med høyt kokepunkt er i bunnen.

Sidestrippere er avdriverkolonner som tar inn en fraksjon fra hovedkolonnen^[42]. Disse sørger for at eventuelle flyktige forbindelser går ut i toppen av avdriveren, og tilbake i hovedkolonnen, mens bunnproduktet er en mer avgrenset fraksjon, enn det man ville fått om man tok ut væske direkte fra et trinn i hovedkolonnen.

Pumparounds er et system for å ta ut væske fra et trinn, kjøle den ned, for så å føre den inn på et trinn høyere i kolonnen. Dette gjøres i mellom væskeuttak fra kolonnen eller sidestrippere. Hensikten med pumparounds er å øke temperaturdifferansen oppover i kolonnen, f.eks. i tilfeller der kokepunktene til væskefraksjoner ligger langt fra hverandre ^[43]. I dette eksemplet brukes ikke energien fra nedkjølingen til noe, men det er porter på pumparounds i PetroFrac, slik at den kan utnyttes i et større system.

Stoffer i simuleringen

Råolje, som skal tilsvare egenskapene til oljen fra statfjord-feltet i Nordsjøen.

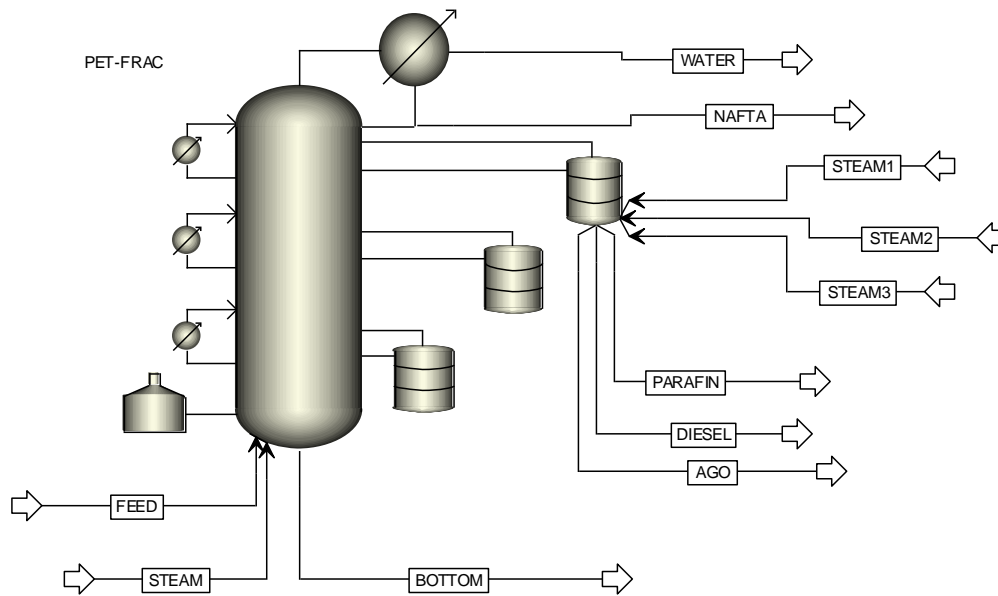
Vanndamp brukes for å tilføre energi i hovedkolonne og sidestrippere. Det å innføre vanndamp i hydrokarbonsystemer har den fordelen at koketemperaturen reduseres, slik at prosessen foregår ved lavere temperatur enn om kolonnen kun inneholdt hydrokarboner^[44].

Annen informasjon om kolonne presenteres underveis i eksemplet.

4.2. Oppsett av simulering

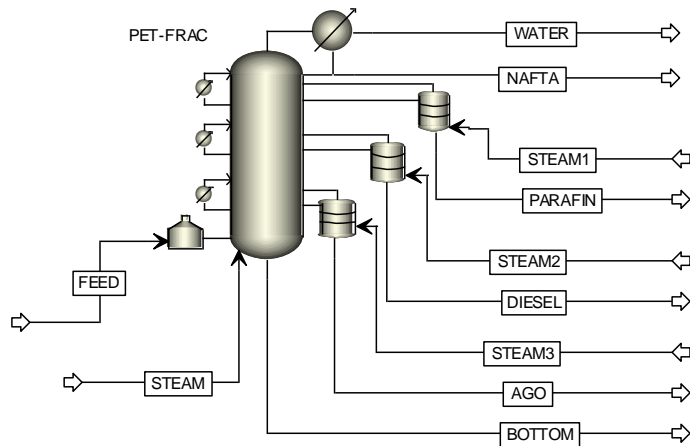
Flytskjema

Tegner opp et flytskjema (Figur 60).



Figur 60.

«Feed» og «steam» skal inn på port «main column feed». «Steam1», «steam2» og «steam3» skal inn på port «stripper steam feed». «Parafin», «diesel» og «AGO» skal ut av «bottoms product from stripper». Dette fører til at mange strømmer sitter i klynge rundt noen av portene. Man kan bruke flytskjemaet sånn som det er, men man kan flytte strømmene slik at systemet visuelt ser riktigere ut. Trykk på «esc»-tast, slik at man har vanlig musepeker, og ikke insert-modus (kryssformet musepeker). Man kan da ta tak i enden av strømmen nærmest porten og flytte den dit det er ønskelig (Figur 61).



Figur 61.

Setup

Specifications:

Flow basis → StdVol

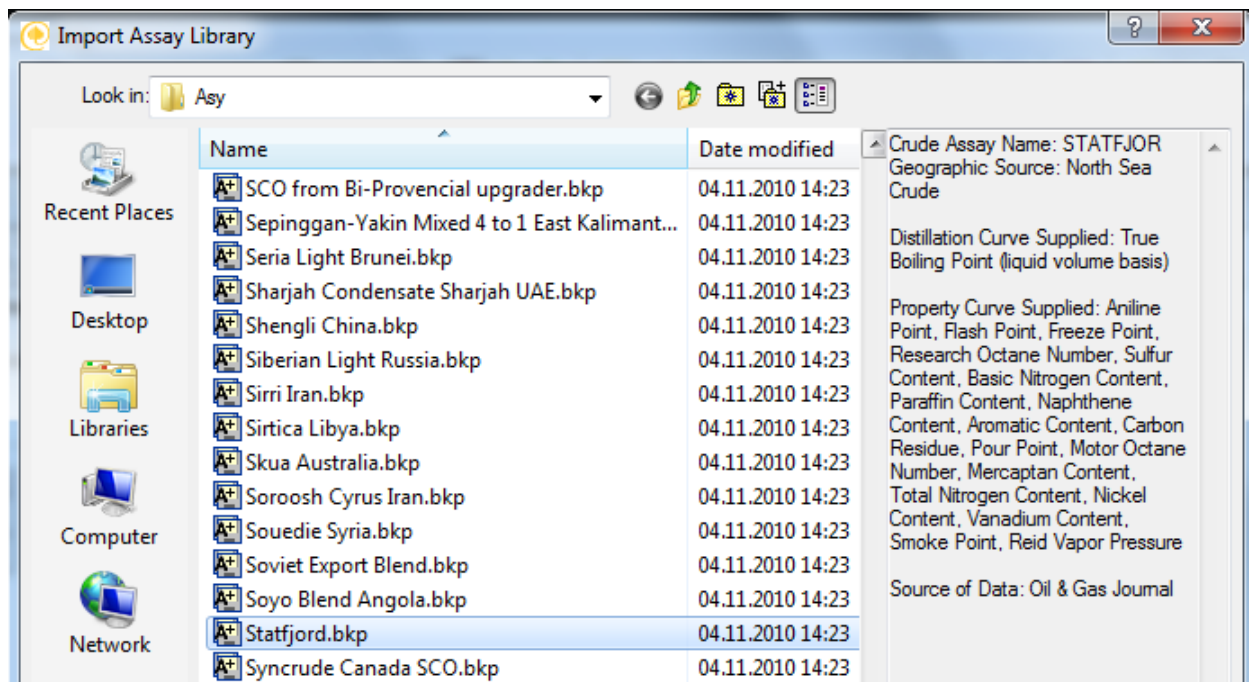
Input data → SI-CBAR (angir SI-enheter, men med temperatur i grader Celsius og trykk i bar).

Report options → fane «streams» → felt «Fraction basis» → std.liq. volume.

Components

Fane: Specifications → Selection → Component name: WATER → Component ID: f.eks. "W"

Fane: Petroleum → knapp: «Assay Library» → «Aspen Plus assay library» → i dialogboks, søk opp «Statfjord». Når råoljen er markert, vises hva slags spesifikasjoner som er registrert for denne (Figur 62). Trykk «OK». «STATFJØR» finnes nå under «Assays» og i fanen «Specifications». Merk at det finnes flere Nordsjø-råoljer i «Aspen Plus assay library».



Figur 62. Skjermbilde fra Aspen Plus. I grått felt til høyre i bildet vises hva som er tilgjengelig for «Statfjord».

Properties

Bruker «property method selection assistant» for å finne ut hvilken metode som er best egnet.

Specify component type → hydrocarbon system → «Yes», siden en råolje med pseudokomponenter er valgt. → «No», siden det er en atmosfærisk kolonne. → Får bl.a. foreslått «GRAYSON», som er anbefalt for å lage nye simuleringer^[45].

Streams

Strømmer som trenger input er markert med rødt i «data browser» → «streams», slik at disse trenger input (Tabell 9).

Tabell 9. Input som skal føres inn for respektive strømmer under streams. Data kommer fra en Aspen Plus publikasjon^[46].

Strøm	State variables			Composition (mass fraction)	
	Temperature [°C]	Pressure [bar]	Total flow	W	STATFJOR
FEED	380 ^[47]	3	530 m ³ /h		1
STEAM	205	4,1	5500 kg/h	1	
STEAM1	205	4,1	1500 kg/h	1	
STEAM2	205	4,1	450 kg/h	1	
STEAM3	205	4,1	360 kg/h	1	

Blocks

I «data browser», gå til «blocks» → «PET-FRAC» (navn) og før inn input (Tabell 10).

Tabell 10. Input i PET-FRAC-kolonnen, fordelt på faner i vinduet. Data kommer fra en Aspen Plus publikasjon^[48].

Fane: Configuration		
Setup options	Number of stages	25
	Condenser	Total
	Reboiler	None-bottom feed
Operating specifications	Destillate rate	StdVol 86,1 m ³ /h
Fane: Streams		
Feed streams	FEED: Stage: 22, Convention: Furnace	
	STEAM: Stage: 25, Convention: On-Stage	
Product streams	BOTTOM: Stage: 25, Phase: Liquid	
	NAFTA: Stage: 1, Phase: Liquid	
	WATER: Stage: 1, Phase: Free water	
Fane: Pressure		
	Stage 1 / Condenser pressure	1,08 bara
	Stage 2 pressure	1,43 bara
	Bottom stage pressure	1,70 bara
Fane: Furnace		
Furnace type	Single stage flash	
Furnace specifications	Fractional overflash	StdVol: 0,03
Furnace pressure		1,67 bara

Trykk «next». Aspen Plus skal ha spesifisert tre sidestriper automatisk ^[49], slik at man kommer til «Blocks»→ «PET-FRAC» (navn)→ «Strippers». Om man kommer til «Blocks»→ «PET-FRAC» (navn)→ «connectivity», må man gå til «strippers» manuelt. Hvis ingen er spesifisert, legg til tre stykker ved å trykke på «New», og legg inn input(Tabell 11).

Tabell 11. Spesifikasjoner for de tre sidestriperne til RadFrac-kolonnen.Data kommer fra en Aspen Plus publikasjon^[50].

	S-1	S-2	S-3
Setup			
Number of stages	4	3	2
Stripper product	PARAFIN	DIESEL	AGO
Main column connecting stages			
Liquid draw	6	13	18
Overhead return	5	12	17
Stripping medium			
Stripping steam	STEAM1	STEAM2	STEAM3
Flow specifications			
Bottom product→ StdVol	77,5 m ³ /h	109,3 m ³ /h	56,3 m ³ /h

Hvis man nå trykker på «next»-knappen, vil man i en dialogboks få beskjed om at nødvendig input er ferdig. Mer input skal til, så trykk «cancel». Gå så til «Blocks»→ «PET-FRAC» (navn)→ «pumparounds».

Legg til to pumparounds, ved å trykke på «new» to ganger. Kaller disse «P-1» og «P-2», og legger til input for disse(Tabell 12).

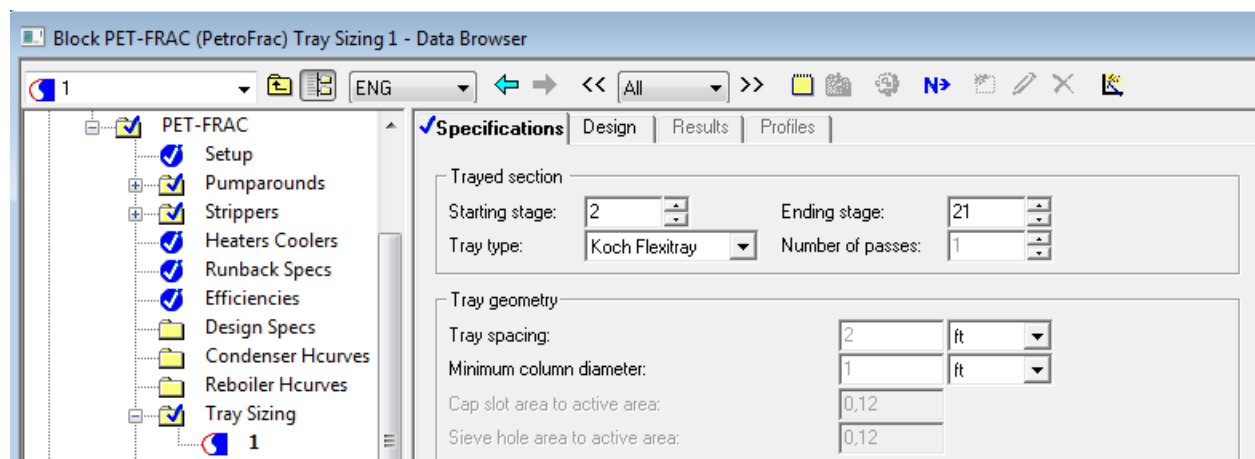
Tabell 12. Input for pumparounds for RadFrac-kolonnen. Data kommer fra en Aspen Plus publikasjon^[51].

	P-1	P-2
Source → Draw stage	8	14
Destination → Return stage	6	13
Drawoff type	Partial	Partial
Operating specifications		
Flow → StdVol	324,6 m ³ /h	72,9 m ³ /h
Heat Duty	11723 kW	4396 kW

Størrelse på kolonne

Det er ønskelig å finne størrelsen på hovedkolonnen. Dette kan løses på samme måte, som for «Binær destillasjon», ved å bruke «tray sizing».

I databrowser, gå inn på «Blocks» → PET-FRAC(navn) → «Tray sizing». Her må man legge til en ny størrelsesberegning, ved å trykke på «New» nede i vinduet «Tray Sizing». I dialogboksen som dukker opp kan man velge navn, «1» i dette tilfellet, og man ledes til et nytt vindu(Figur 63).



Figur 63. Skjerm bilde fra Aspen Plus.

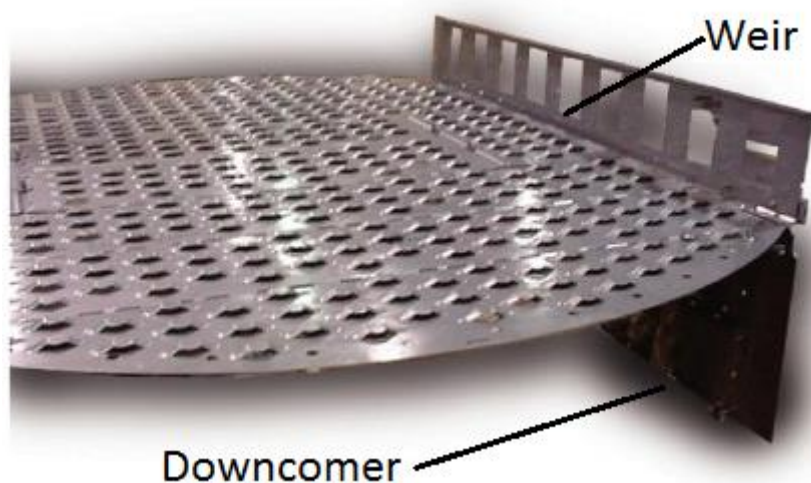
«Starting stage» settes til «2», siden trinn 1 er kondensator. Setter «ending stage» til «25». Velger platetype «Koch Flexitray».

Under fanen «Design», beholdes de forhåndsvalgte verdiene i feltet «sizing criteria» («fractional approach to flooding»: 0,8 og «minimum downcomer area»: 0,1). «Flooding calculation method», settes til «Bulletin 960», som er en publikasjon fra plateprodusenten.

«Flexitray» er produsert av Koch-Glitsch, og er en ventilplate. Standardventilen(Figur 64) er av en type som reguleres av gass-strømmen oppover i kolonnen. Dette gjør at plater med denne type ventiler kan brukes selv om dampstrømmen i kolonnen endrer seg^[52]. Ventilene er spred utover plater som kan kjøpes ferdigprodusert(Figur 65).



Figur 64. Standardventilen på Koch-Glitsch Flexitray® [53]



Figur 65. Superfrac®-plate fra Koch-Glitsch, med tekstforklaring tilført av forfatter. Dette er en annen platetype, men illustrerer hvordan platene er dekket av ventiler. Til høyre på platen er overløpskanten («weir»), som regulerer væskehøyden oppå platen, og platen som væsken renner nedover til platen under («downcomer»). Det fremgår av brosjyren til Flexitray, at det også er konstruert på denne måten. [54]

Merk at sidestripperne også kan dimensjoneres på samme måte; i «data browser»: «blocks»→ «PET-FRAC»→ «Strippers»→ «S-1»(navn)→ «tray sizing».

Design spec

I Aspen Plus publikasjonen blir det lagt inn to «design spec»'s. Hvis begge disse legges inn i denne simuleringen gir det uheldig resultater, men ved å bruke en spesifikasjon for nafta påvirker det resultatet bra.

I «data browser», gå til «flowsheeting options»→ «design spec»→ trykk «new»→ aksepter «DS-1» i dialogboksen.

Man ledes til et nytt vindu («flowsheeting options»→ «design spec»→DS-1). Trykk «new», og gi variabelen et navn («NAFSPEC» her), og «ok». En ny dialogboks ved navn «variable definition» dukker opp. I feltet «Reference» legg inn:

Type: StreamProp, Stream: NAFTA, PropSet: D86-95. Trykk «next».

Kommer til fanen «Spec». I feltet «design specification expressions», legg inn:

Spec: NAFSPEC, Target: 190,6 [°C] (som tilsvarer 375 °F), Tolerance: 0,1. Trykk «next»

Kommer til fanen «vary». I feltet «manipulated variable», legg inn:

Type: Block-Var, Block: PET-FRAC, Variable: STDVOL-D.

I feltet «manipulated variable limits», legg inn:

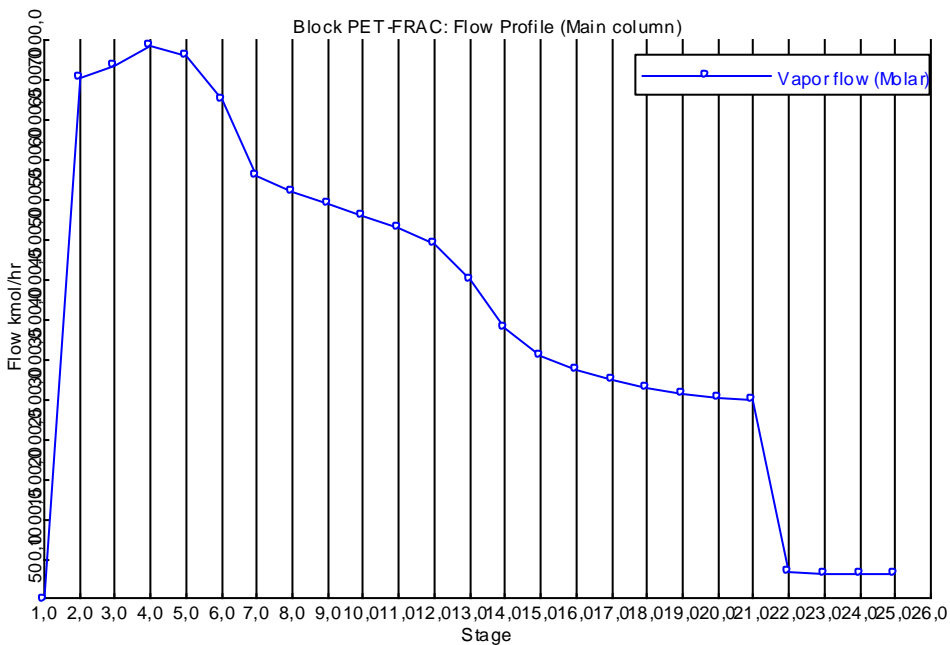
Lower: 50, Upper: 200.

Kjør simulering.

4.2.1. Resultat

Plot for kolonne

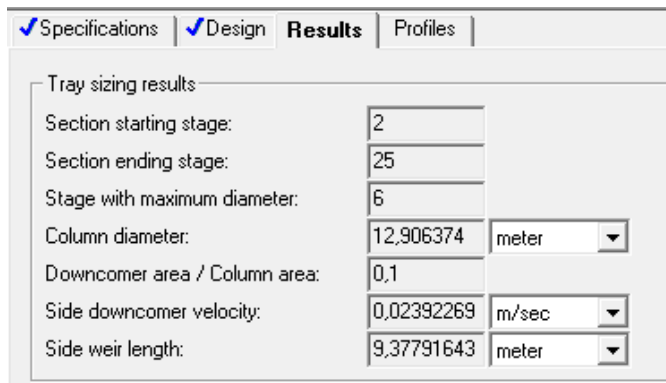
Om man i «Data Browser» går inn i «Blocks» og så trykker på mappen for PetroFrac-kolonnen, kan man få opp «Plot Wizard» for kolonnen. Her kan man få bl.a. temperaturplot fordelt på plater, komponentfordeling per plate og dampstrømmen i kolonnen(Figur 66).



Figur 66. Diagram fra Aspen Plus, som viser den varierende dampstrømmen i kolonnen for hvert trinn.

Størrelse på plater

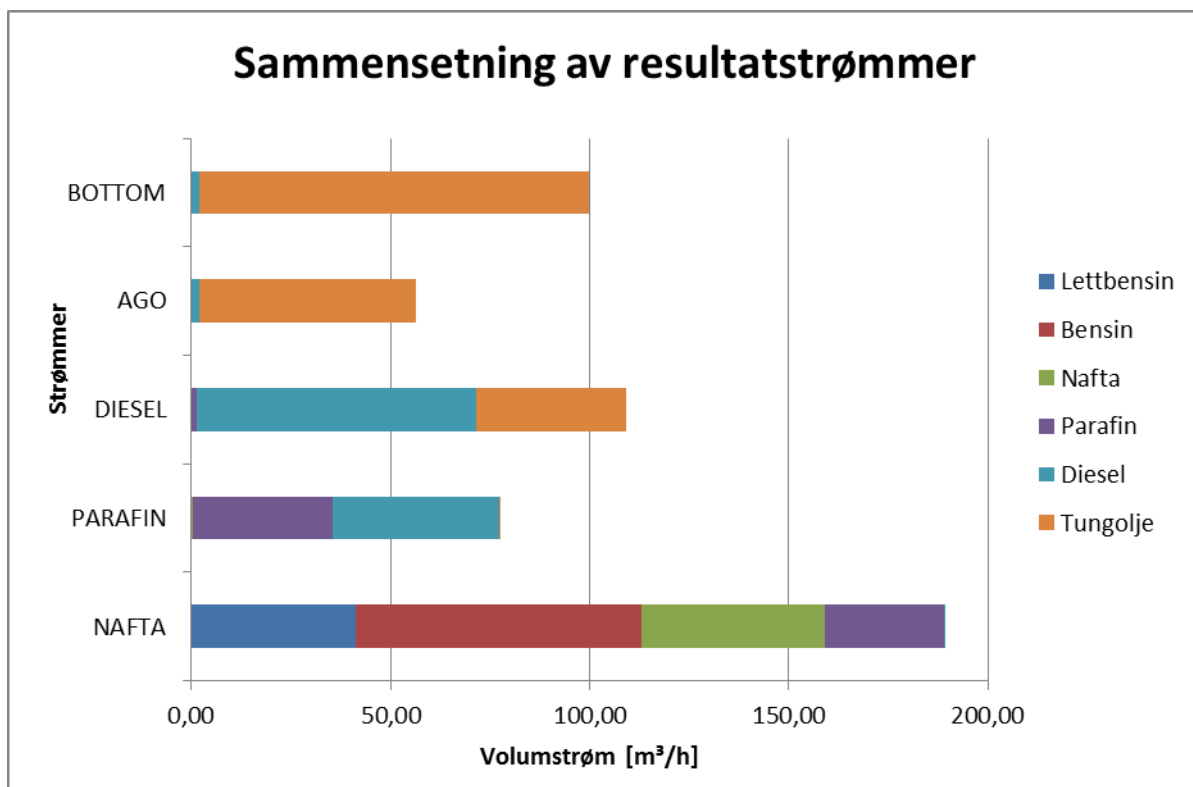
Det endelige resultatet for kolonnen er basert på den største diameteren i «Profiles» (Figur 67).



Figur 67 Skjerm bilde fra Aspen Plus.

Fraksjoner

Hvis man kopierer ut dataene for pseudokomponentene fra tabellen man finner i «check results»: «results summary» → «streams» under «LiqVol 60F cum/hr», legger det over i et excel-ark, og deler inn etter kokepunktområde som er spesifisert (Tabell 8), kan man få en fin presentasjon av de resulterende strømmene (Figur 68).



Figur 68. Diagram fra excel på basis av resultatet fra Aspen Plus.

Kommentar til resultat

Vi ser at fraksjonene er forholdsvis bra skilt fra hverandre. At f.eks. fraksjonen Diesel eksisterer både i strømmen DIESEL og PARAFIN er ikke unaturlig, siden disse fraksjonene ligger ved siden av hverandre i temperatur.

5. Konklusjon

- Brukterskelen på programmet, virker for meg, ikke er høyere enn at det fint er mulig å bruke programmet i undervisning, etter grunnleggende opplæring i prosessfag.
- Eventuell undervisning vil nødvendigvis ikke behøve å ta så lang tid. Selv om det er mange alternativer for noen av enhetsoperasjonene, er det få vinduer å forholde seg til; hovedsakelig «data browser». Når dette mestres bør man ha god kontroll på hva man går gjennom av menyer, selv om man må undersøke mer av teorien bak.
- Studenter som gjennomfører øvinger, kan synes å være en egnet metode for å lære seg programmet.
- Mulighetene programmet gir gjør at det er egnet til å bli brukt til masteroppgaver ved UMB.

Anbefalinger

- Brukere av programmet må gjøres obs på at ulike metoder egner seg til ulike prosesser.

Videre arbeid

Denne oppgaven tar for seg en liten del av programmet Aspen Plus. Mulighetene for videre arbeid er derfor stor.

- Kjøre simuleringer på mer komplekse systemer.
- Utforske mulighetene ved å bruke «input mode» → «dynamic»
- Generelt å bruke programmet videre til masteroppgaver.

6. Referanser

- ⁵ <http://www.aspentech.com/30th/>
- ⁶ <http://www.prosim.net/en/index.php>
- ⁷ <http://www.chemstations.com/>
- ⁸ http://iom.invensys.com/EN/Pages/SimSci-Esscor_ProcessEngSuite_PROII.aspx
- ⁹ Aspen Plus Help → Advantages and Disadvantages of the Equation-of-State Method
- ¹⁰ Aspen Plus Help → Advantages and Disadvantages of the Activity Coefficient Method
- ¹¹ Aspen Plus Help → sysop0
- ¹² Aspen Plus Help → IDEAL Property Method
- ¹³ Rackett, H. G. (1970). Equation of State for Saturated Liquid. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 15 (4): 514 – 517 (link: pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/je60047a012)
- ¹⁴ Aspen Plus Help → NRTL (Non-Random Two-Liquid)
- ¹⁵ Aspen Plus Help → Wilson Activity Coefficient Model
- ¹⁶ Peng, D. Y. & Robinson, D. B. (1976). A New Two-Constant Equation-of-state. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, 15 (1): 59-64
- ¹⁷ Aspen Plus Help → PENG-ROB
- ¹⁸ Aspen Plus Help → Specifying Supercritical (HENRY) Components
- ¹⁹ Aspen Plus Help → Sep2
- ²⁰ Aspen Plus Help → Stage Numbering
- ²¹ Aspen Plus Help → Manipulators
- ²² Aspen Plus Help → Working with Streams
- ²³ Aspen Plus Help → About Assay Data
- ²⁴ Aspen Plus Help → Pseudocomponent Cut Points
- ²⁵ Aspen Plus Help → Reinitializing SM Simulation Calculations
- ²⁶ <http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/search/r?dbs+hsdb:@term+@rn+@rel+142-82-5>
- ²⁷ <http://www.ethylbenzene.org/content/appendix1.html>
- ²⁸ Aspen Plus Help → About Balance Results
- ²⁹ McCabe, W. L. *et al.* (2005). *Unit Operations of Chemical Engineering*. 7. utg. McGraw-Hill. s.707
- ³⁰ Aspen Plus Help → Single-Pass and Multi-Pass Trays
- ³¹ Aspen Plus Help → RadFrac Tray Sizing Results Sheet
- ³² Aspen Plus Help → Fair and Fair72 Jet Flood Correlations
- ³³ Aspen Plus Help → Modes of Operation for Trays
- ³⁴ McCabe, W. L. *et al.* (2005). *Unit Operations of Chemical Engineering*. 7. utg. McGraw-Hill. s.737
- ³⁵ McCabe, W. L. *et al.* (2005). *Unit Operations of Chemical Engineering*. 7. utg. McGraw-Hill. s.682
- ³⁶ AspenTech: Aspen Plus – Getting started modeling petroleum processes, Version V7.1, January 2009. (http://chemelab.ucsd.edu/aspdocs/v7/AspenPlusPetroleumV7_1-Start.pdf)
- ³⁷ http://www.exxonmobil.no/Norway-Norwegian/PA/about_what_refining_process_visbreaker.aspx
- ³⁸ http://www.exxonmobil.no/Norway-Norwegian/PA/about_what_refining_process_petroplant.aspx
- ³⁹ <http://snl.no/oljeraffinering>
- ⁴⁰ http://www.exxonmobil.no/Norway-Norwegian/PA/about_what_refining_process_heavydistillates.aspx
- ⁴¹ <http://www.statoil.com/en/OurOperations/TradingProducts/CrudeOil/Crudeoilassays/Pages/Statfjord.aspx>
- ⁴² Ingnatowitz, E. (2002). *Prosesskjemi*. 2. utg. Gyldendal. s. 332
- ⁴³ Ingnatowitz, E. (2002). *Prosesskjemi*. 2. utg. Gyldendal. s. 330
- ⁴⁴ Ingnatowitz, E. (2002). *Prosesskjemi*. 2. utg. Gyldendal. s. 319
- ⁴⁵ Aspen Plus Help → GRAYSON/ GRAYSON2
- ⁴⁶ AspenTech: Aspen Plus – Getting started modeling petroleum processes, Version V7.1, January 2009, s 47-48
- ⁴⁷ Ingnatowitz, E. (2002). *Prosesskjemi*. 2. utg. Gyldendal. s. 333
- ⁴⁸ AspenTech: Aspen Plus – Getting started modeling petroleum processes, Version V7.1, January 2009, s 48-50
- ⁴⁹ AspenTech: Aspen Plus – Getting started modeling petroleum processes, Version V7.1, January 2009, s 50
- ⁵⁰ AspenTech: Aspen Plus – Getting started modeling petroleum processes, Version V7.1, January 2009, s 50-52
- ⁵¹ AspenTech: Aspen Plus – Getting started modeling petroleum processes, Version V7.1, January 2009, s 52-53

⁵² Ingnatowitz, E. (2002). *Prosesskjemi*. 2. utg. Gyldendal. s. 325

⁵³ <http://www.koch-glitsch.com/Document%20Library/FLEXITRAY.pdf>

⁵⁴ <http://www.koch-glitsch.com/Document%20Library/SUPERFRAC.pdf>

7. Vedlegg

Vedlegg 1 Håndberegning av binær destillasjon, utført i kurset TMPP251 ved UMB

Oppgave 3

En binær blanding av n-heptan og etylbenzen skal separeres ved destillasjon under atmosferestrykk. Fødingen på 200 mol/h inneholder 42 mol% heptan og kommer inn i kolonnen som væske på kokepunkt. Destillatet skal inneholde 97 mol% heptan, mens bunnproduktet består av 99 mol% etylbenzen.

Kolonnen er en hullplate-kolonne med totalkonsensator (med væske på kokepunkt som utgang), indirekte oppvarming og platevirkningsgrad 0,70.

- Bestem minimalt tilbakeløpsforhold R_{\min} .
- Bruk vedlagte likevektsdiagram (vedlegg 1) til å bestemme antall teoretiske trinn og antall plater i forsterker og i avdriver når vi har et tilbakeløpsforhold på 1,8. På hvilken plate skal fødingen føres inn?
- Finn mengde destillat, bunnprodukt og interne damp- og væskestrømmer i kolonnen.

For beregningen av kolonnediameter er det i litteraturen under bestemte forutsetninger (som totaltrykk og plateavstand) anbefalt damphastighet

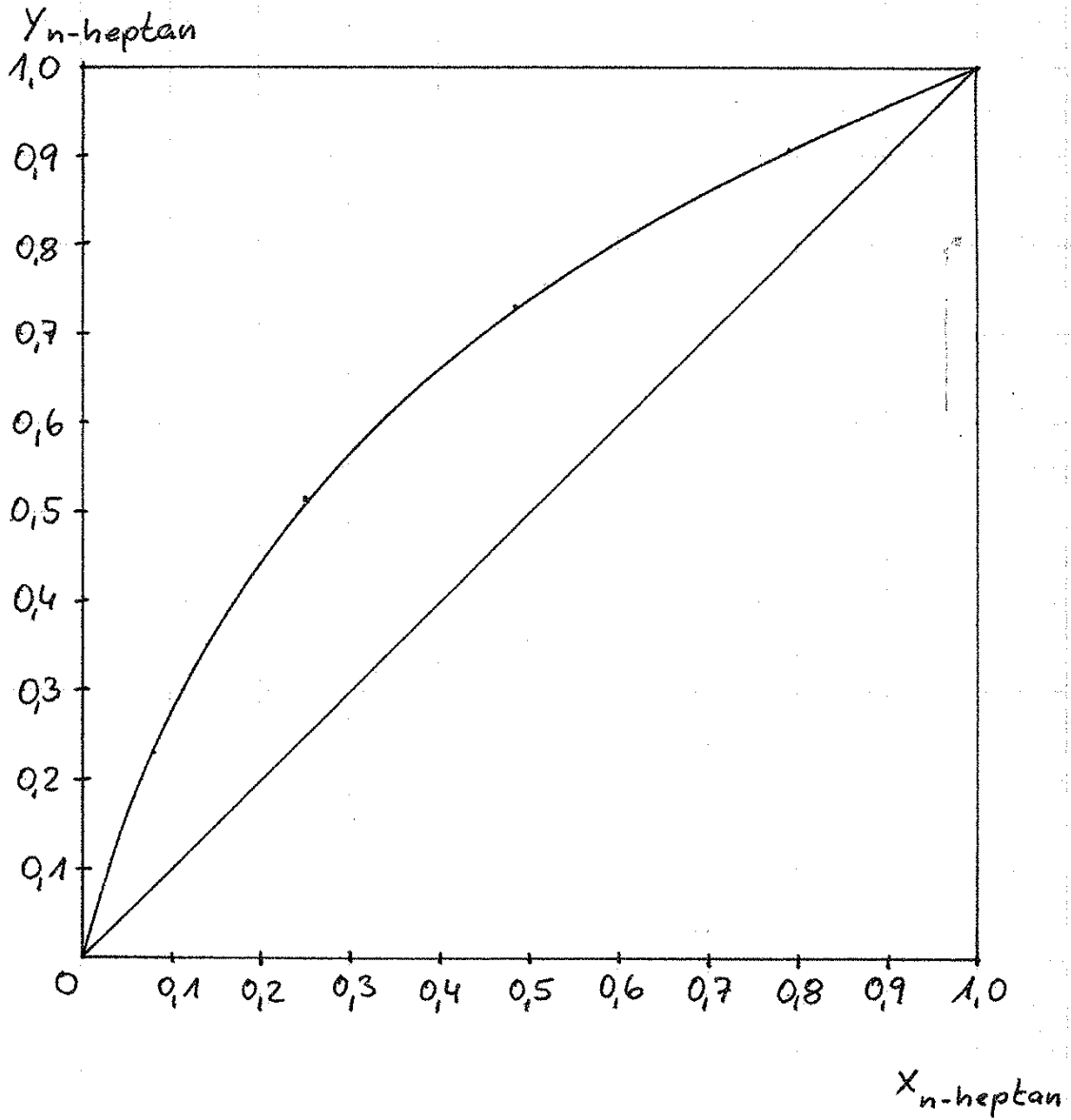
$$v = \frac{2,3}{\sqrt{\rho_v}}$$

ρ_v = tetthet til dampen (kg/m^3)

- Bestem nødvendig kolonnediameter basert på driftsforholdene nederst i kolonnen når en på grunn av væskenedløpet plusser på 5% på nødvendig tverrsnittsareal.
- Hvor stor varmemengde (i kW eller MW) må fjernes i kondensator, og hvor stor effekt (i kW eller MW) må tilføres i kokeren?

Data	fordampningsentalpi n-heptan	31,85 kJ/mol
	fordampningsentalpi etylbenzen	36,86 kJ/mol

Likevektts kurve
n-heptan / etyl benzen



En binær blanding av n-heptan og etylbenzen skal separeres ved destillasjon under atmosfæretrykk. Fødingen på 200 kmol/h inneholder 42 mol% heptan og kommer inn i kolonnen som væske på kokepunkt. Destillatet skal inneholde 97 mol% heptan, mens bunnproduktet består av 99 mol% etylbenzen.

Kolonnen er en hullplate-kolonne med totalcondensator (med væske på kokepunkt som utgang), indirekte oppvarming og platevirkningsgrad 0,70.

a) Bestem minimalt tilbakeløpsforhold R_{min} .

For R_{min} avleses avskjæring på y-aksen for linjen gjennom skjærepunktet likevektskurve/q-linje $\frac{x_D}{R_{min} + 1} = 0,45 \rightarrow \frac{0,97}{R_{min} + 1} = 0,45 \rightarrow R_{min} = \underline{1,16}$

b) Bruk vedlagte likevektsdiagram (vedlegg 1) til å bestemme antall teoretiske trinn og antall plater i forsterker og i avdriver når vi har et tilbakeløpsforhold på 1,8. På hvilken plate skal fødingen føres inn?

Med $R = 1,8$ blir øvre driftslinjes avskjæring på y-aksen $\frac{x_D}{R + 1} = \frac{0,97}{1,8 + 1} = 0,346$

Opptegning gir: Antall teoretiske trinn i forsterker: $N = \underline{6,7}$

og antall plater i forsterker: $\frac{6,7}{0,70} = 9,6 \rightarrow \underline{10 \text{ plater}}$

Antall teoretiske trinn i avdriver: $N = \underline{6,2}$

og antall plater i avdriver: $\frac{6,2 - 1}{0,70} = 7,4 \rightarrow \underline{8 \text{ plater}}$

Fødingen føres inn på plate nr. 11 ovenfra (mellom plate 10 og 11).

c) Finn mengde destillat, bunnprodukt, interne damp- og væskestrømmer i kolonnen.

heptan-balanse $x_F F = x_D D + x_B B$

totalbalanse $F = D + B \rightarrow B = F - D$

$0,42 \cdot 200 \text{ kmol/h} = 0,97 \cdot D + 0,01 \cdot (200 \text{ kmol/h} - D)$

$D = \underline{85,4 \text{ kmol/h}} \quad B = \underline{114,6 \text{ kmol/h}}$

$L = R \cdot D = 1,8 \cdot 85,4 \text{ kmol/h} = \underline{153,7 \text{ kmol/h}}$

$L' = L + F = (153,7 + 200) \text{ kmol/h} = \underline{353,7 \text{ kmol/h}}$

$V' = L' - B = (353,7 - 114,6) \text{ kmol/h} = \underline{239,1 \text{ kmol/h}}$

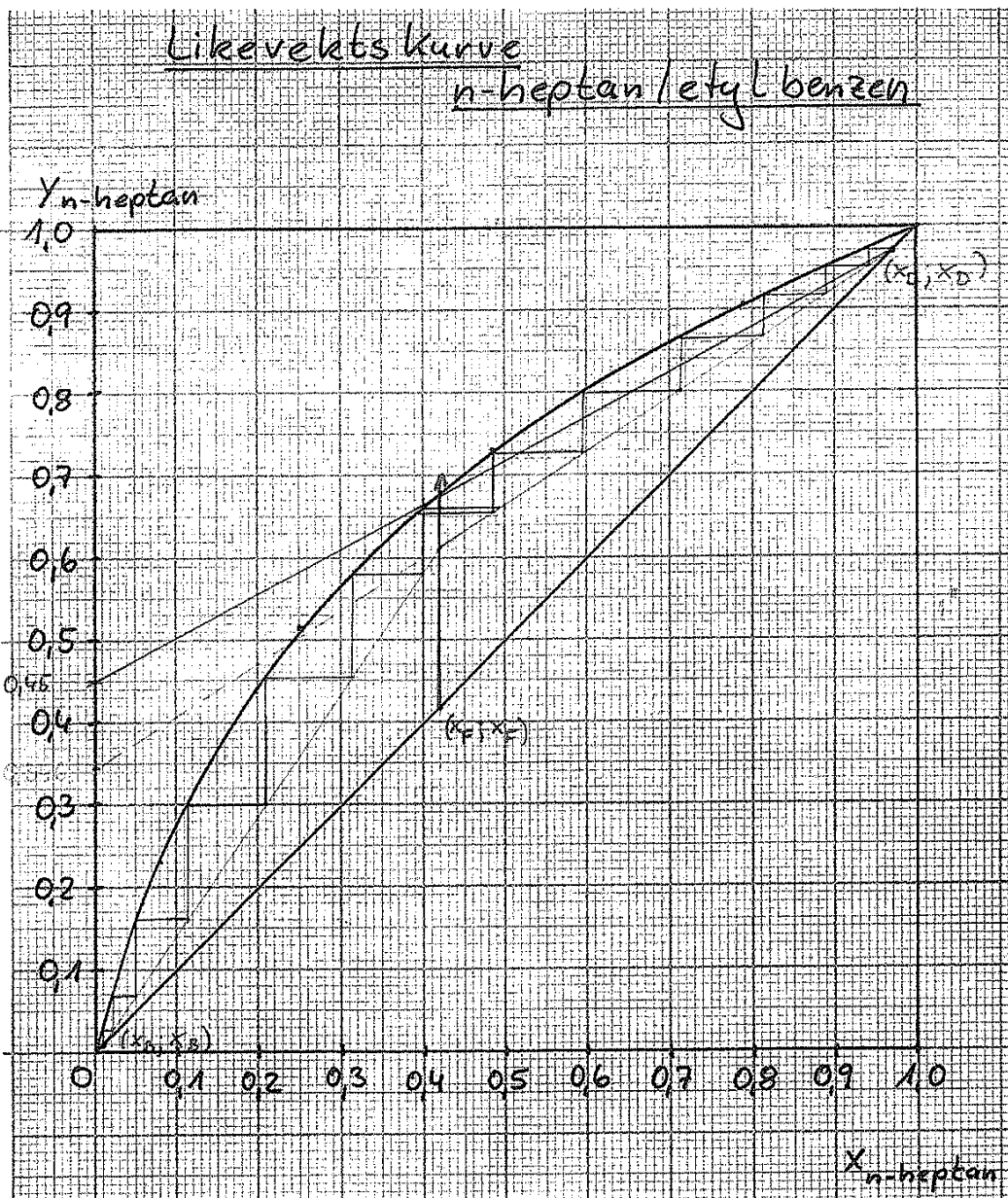
$V = V' = \underline{239,1 \text{ kmol/h}}$

Kontroll: $V - D = (239,1 - 85,4) \text{ kmol/h} = 153,7 \text{ kmol/h} = L \quad \text{ok!}$

For beregningen av kolonnediameter er det i litteraturen under bestemte forutsetninger (som totaltrykk og plateavstand) anbefalt damphastighet

$$v = \frac{2,3}{\sqrt{\rho_v}} \quad i \text{ (m/s)}$$

$\rho_v = \text{tetthet til dampen (kg/m}^3\text{)}$



d) Bestem nødvendig kolonnediameter basert på driftsforholdene nederst i kolonnen når en på grunn av væskenedløpet plusser på 5% på nødvendig tverrsnittsareal.

Nede i kolonnen er det 239,1 kmol/h damp med tetthet

$$\rho_v = \frac{1 \text{ atm} \cdot 106,2 \text{ kg / kmol}}{0,08206 \text{ m}^3 \cdot \text{atm} / (\text{K} \cdot \text{kmol}) \cdot 409 \text{ K}} = 3,16 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$$

(brukte verdier til etylbenzen (fra SI-CD), da bunnproduktet består til 99% av dette)

Damphastighet blir da

$$v = \frac{2,3}{\sqrt{3,16}} = 1,29 \text{ m/s}$$

i en volumstrøm på

$$Q = \frac{n \cdot R \cdot T}{p} = \frac{239,1 \text{ kmol} \cdot 0,08206 \text{ m}^3 \cdot \text{atm} / (\text{K} \cdot \text{kmol}) \cdot 409 \text{ K}}{3600 \text{ s} \cdot 1 \text{ atm}} = 2,23 \text{ m}^3/\text{s}$$

Da blir nødvendig tverrsnittsareal for gass

$$S = 2,23 \text{ m}^3/\text{s} / 1,29 \text{ m/s} = 1,725 \text{ m}^2$$

nødvendig tverrsnittsareal total

$$S = 1,725 \text{ m}^2 \cdot 1,05 = 1,81 \text{ m}^2$$

og kolonnediameter

$$D = \sqrt{\frac{4 \cdot 1,81 \text{ m}^2}{\pi}} \approx \underline{1,5 \text{ m}}$$