



Tervezés AspenTech programokkal bioetanol gyártás és biofinomítás témaiban

Dr. Fehér Csaba

Budapesti Műszaki és Gazdaság tudományi Egyetem
Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer tudományi Tanszék

Budapest, 2019



1

Előadásanyag, számonkérés



- Előadás dia a honlapon elérhető lesz, felkészülést segítő kérdések (friss)
- Első előadás: anyag ismertetés, második előadás: konzultációs óra, feladatok, felkészítő kérdések átbeszélése
- zh: 5 kérdés (10 pont), melyre rövid válaszokat várok, lehet benne egyszerű számpélda is



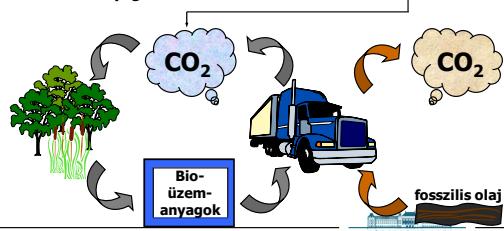
2



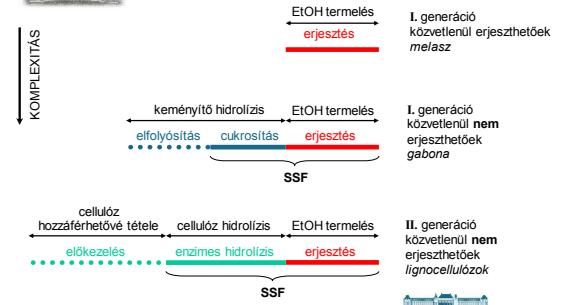
Alkoholgyártás, upstream műveletek, áttekintés

Bioetanol, CO₂ körforgás

A legnagyobb mennyiségen termelődő üvegházhatású gáz a szén-dioxid, ami bio- és fosszilis üzemanyagokból is keletkezik, de a bio-üzemanyagok esetében a szén-dioxid ciklus zárt.



Alkoholgyártás, upstream műveletek, áttekintés

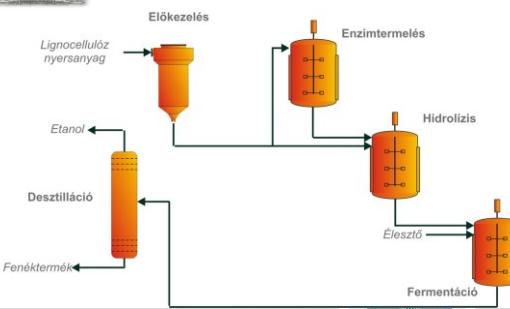


4



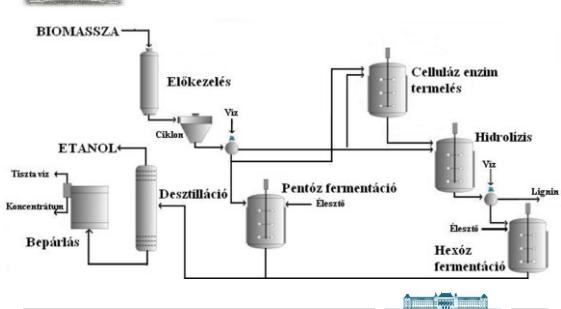
Alkoholgyártás, upstream műveletek, áttekintés

Első generációs folyamat, melléktermékek, biofinomítás



Alkoholgyártás, upstream műveletek, áttekintés

Első generációs folyamat, melléktermékek, biofinomítás



5



- Most of the chemical products used in the industry are derived from fossil resources.
- The replacement of fossil resources in the production of chemicals can be solved only by biomass utilization.

Biofinomítás
is defined by the IEA Bioenergy Task 42 (International Energy Agency, 2009) as the sustainable processing of biomass into a wide spectrum of bio-based products (food, feed, chemicals and/or materials) and bioenergy (biofuels, power and/or heat). Biorefinery is a facility (or a cluster of facilities) that integrates biomass conversion processes and equipment to produce transportation biofuels, power, chemicals and materials from biomass.

Biomass:
organic materials produced by the growth of microorganisms, plants and animals.

BIOrefinery:
utilize BIOMass by using green (sustainable?) technologies. (biotechnology)

- Feedstocks, processes, platforms and building block chemicals, products

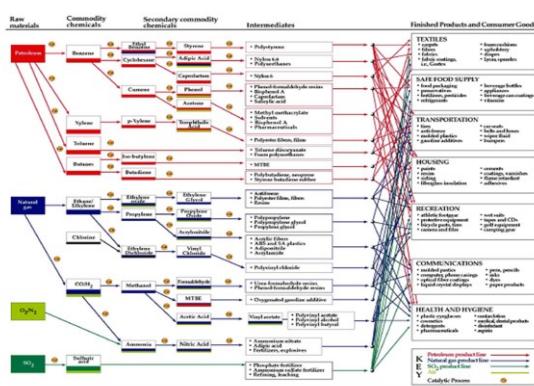


Figure 2 – An Example of a Flow-Chart for Products from Petroleum-based Feedstocks

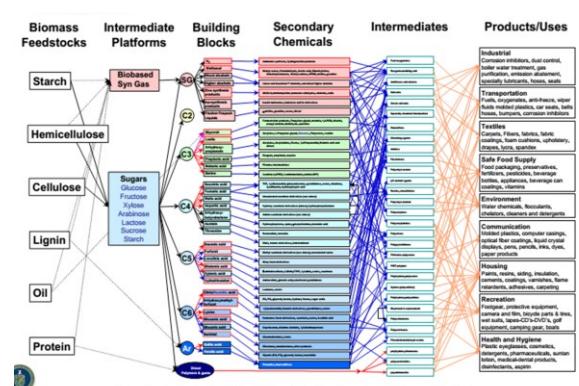
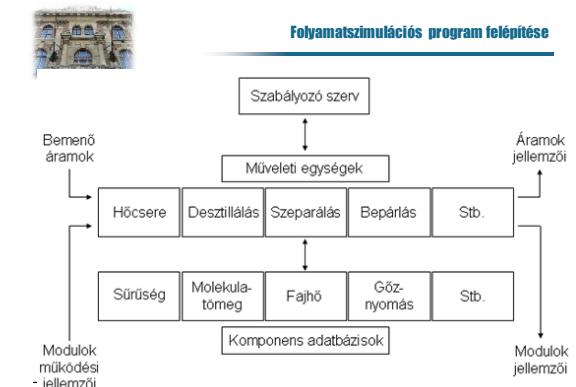
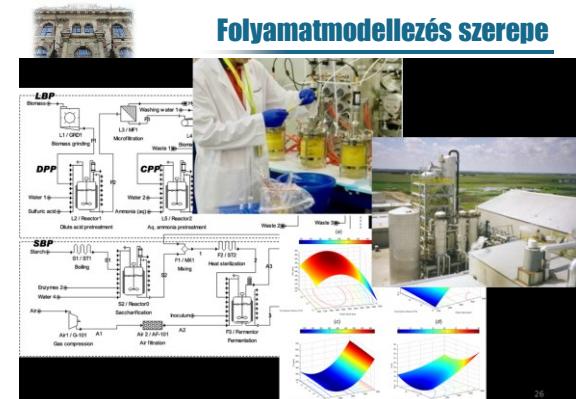
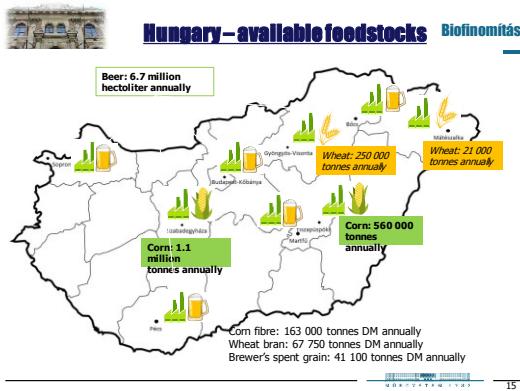
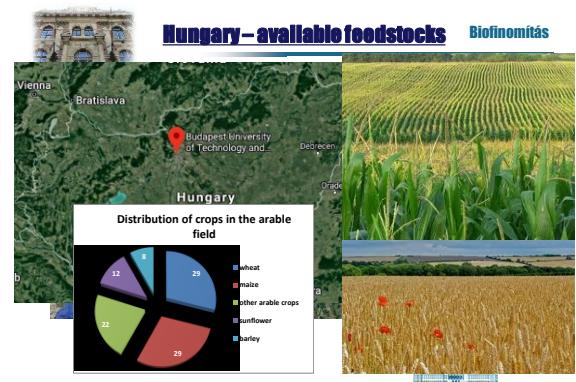
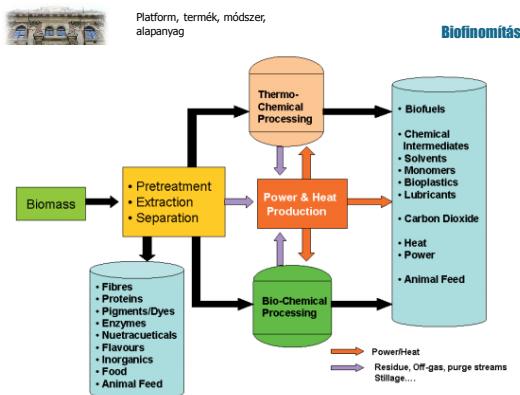


Figure 3 – Analogous Model of a Biobased Product Flow-chart for Biomass Feedstocks





Mit várhatunk egy technológiai-gazdaságossági tanulmánytól?

- ÖSSZEHASONLÍTHATÓ ESETEK
- Energiuirendszer, energiahétkönyvság
- Gazdaságossági paraméterek:
 - éves költségek, bevétel, profit
 - előállítási költség adott termékre
 - megtérülési idő

A gazdaságossági rész sokkal bizonytalannabb, mint a technológiai



Mi szükséges egy jó technológiai-gazdaságossági tanulmányhoz?

- Megbízható kísérleti eredmények
- Ökölszabályok alkalmazása
- Konzervatív feltételezések



19



Miért fontos a folyamattervezés?

- Kísérleteket az egyes lépésekre végezzük, azonban fontos a lépések közötti lehetséges kölcsönhatások (integráció) vizsgálata is

• vízvisszaforgatás
• ezzel a vízigény csökkenthető

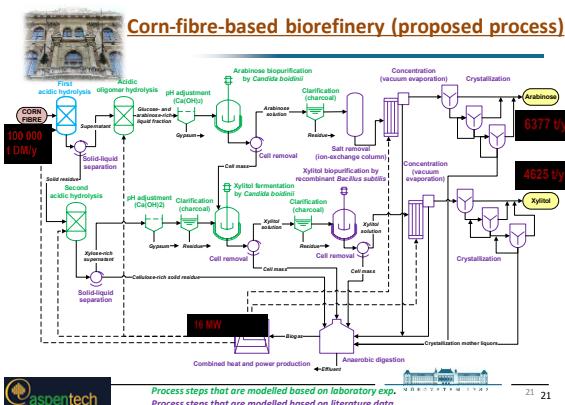
• hőintegráció
• egy anyagáram fűtése úgy történik, hogy közben egy másik anyagáram hűl, így a hőigény csökkenthető

• Komplex folyamatoknál nagyon sokféle elrendezés (folyamatkonfiguráció) képzelhető el, ezért célszerű folyamattervező szoftver használata

• A technológiai modell az alapja a gazdaságossági számításoknak is



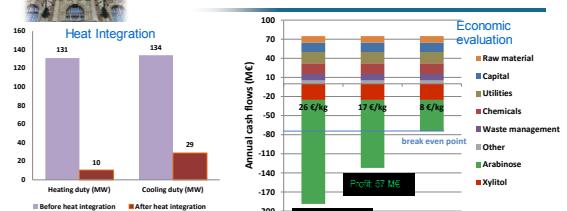
20



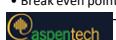
21



Techno-economic evaluation



- Process simulation: Aspen Plus V8.0, Heat integration: Aspen Energy Analyzer V8.0, Economic evaluation: Aspen Process Economic Analyzer V8.0 (Aspen Tech, Cambridge) and vendor quotation.
- After heat integration the proposed biorefinery process can satisfy its own heat demand.
- Assumed prices: corn fibre: 100 €/tonne DM, xylose: 6 000 €/tonne.
- Break even point requires an arabinose price of 8 €/kg.



22

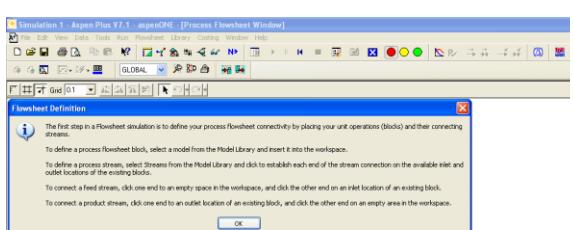
Aspen Plus

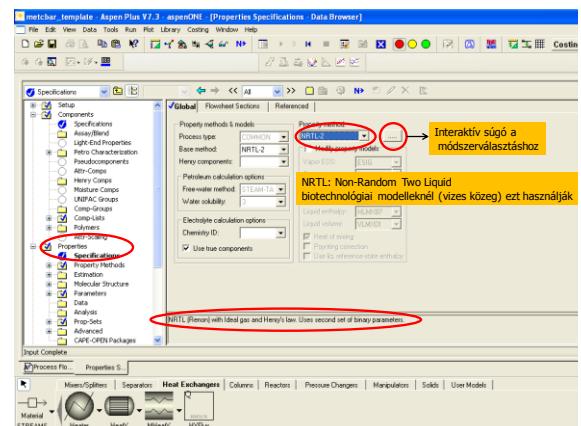
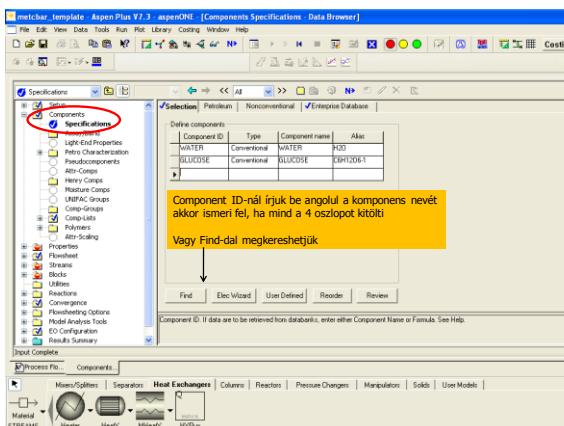
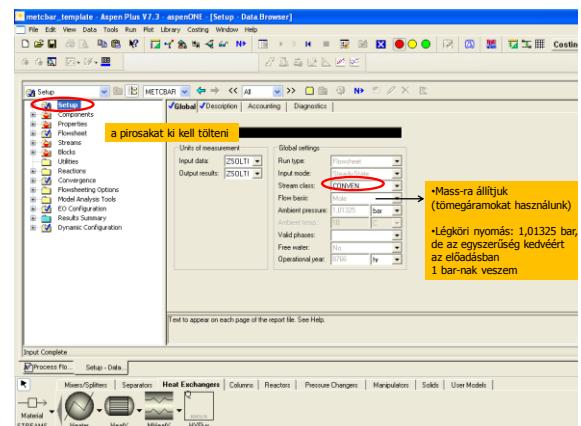
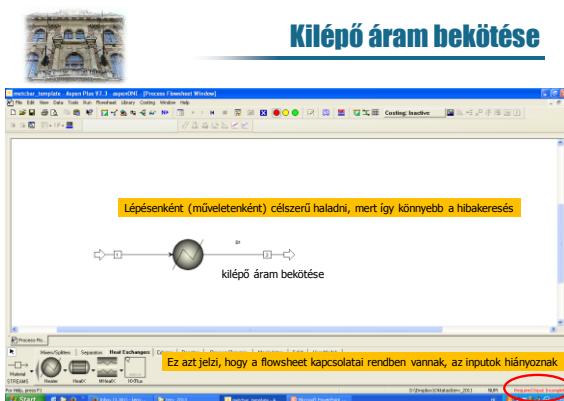
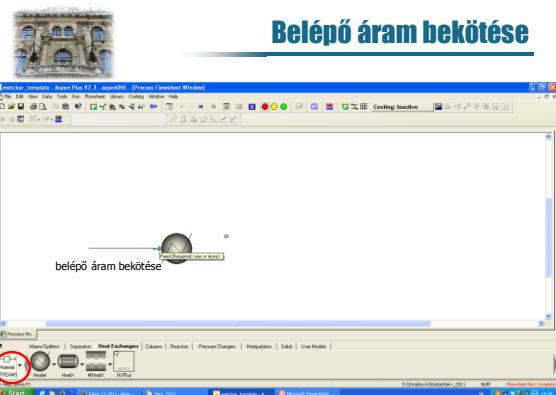
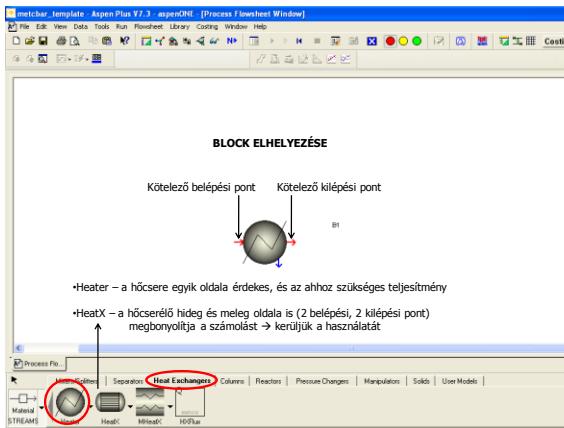
áramok - streams

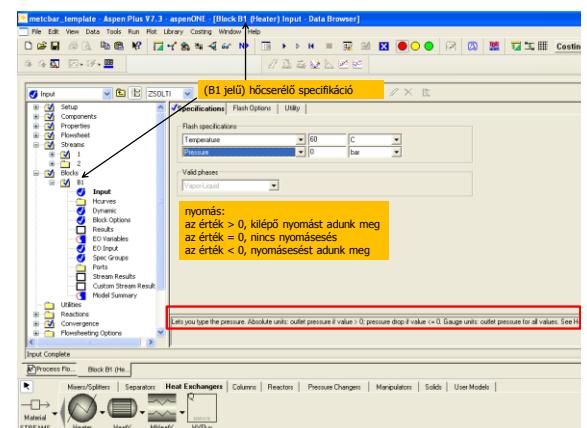
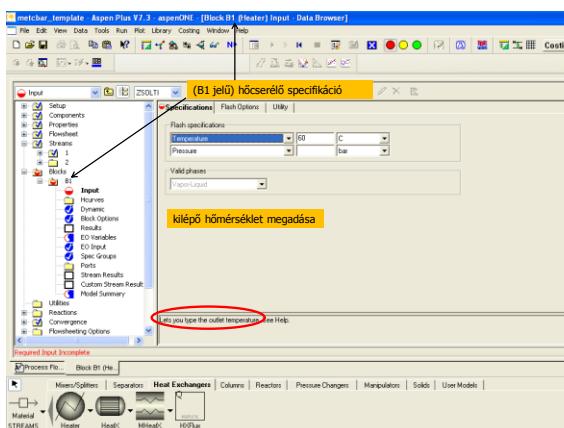
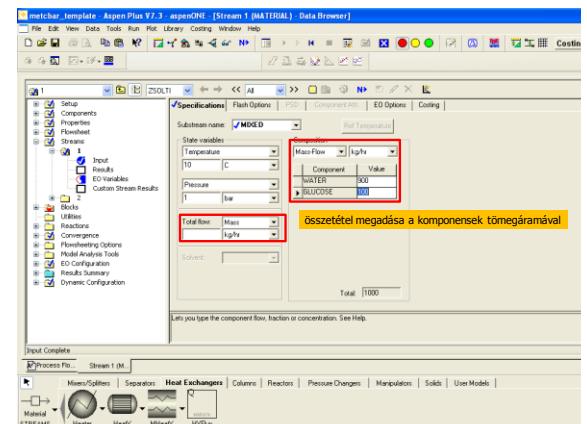
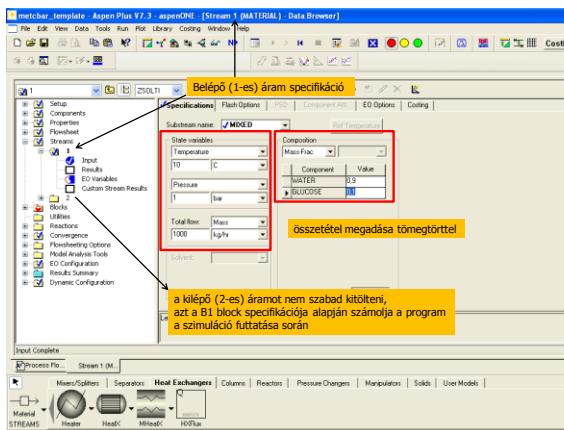
műveleti egységek modelljei = block

next gomb – végigvezet az inputokon

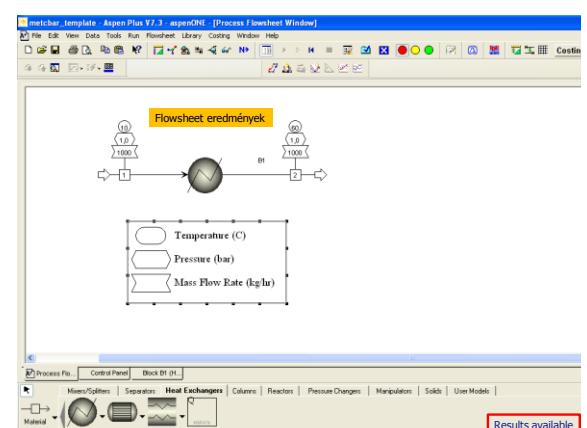
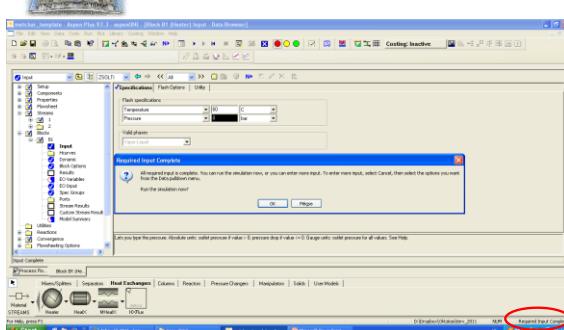
folyamatábra = flowsheet

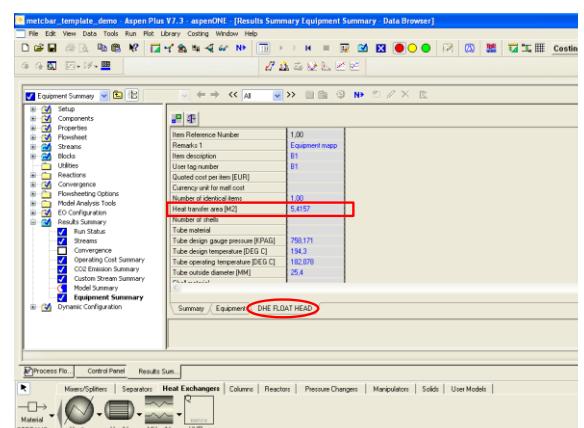
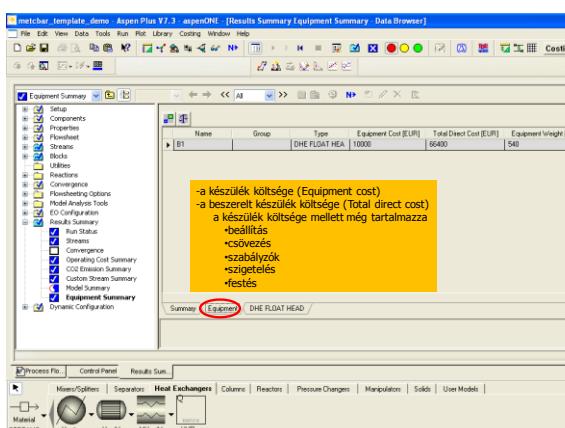
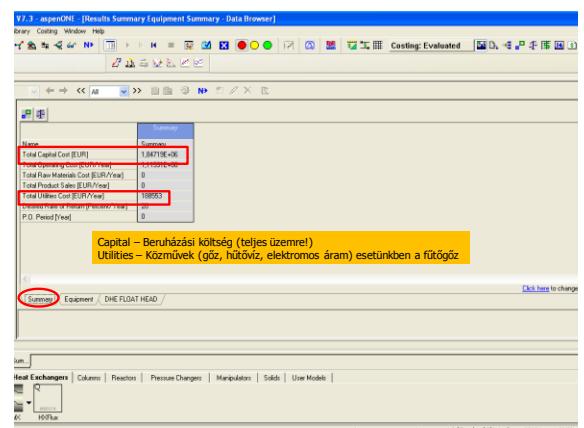
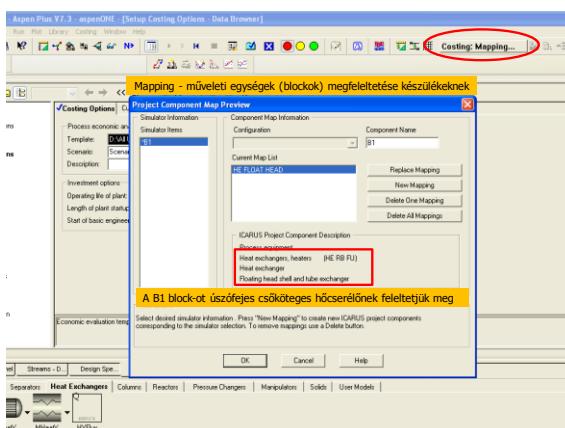
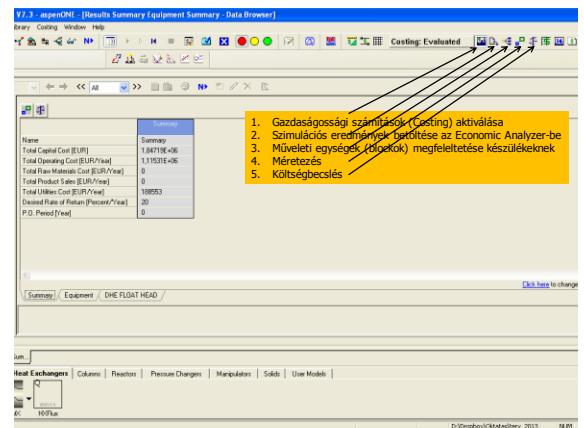
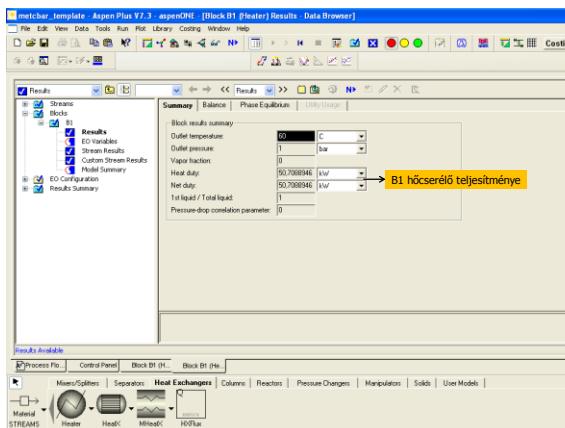






Futtatható a szimuláció





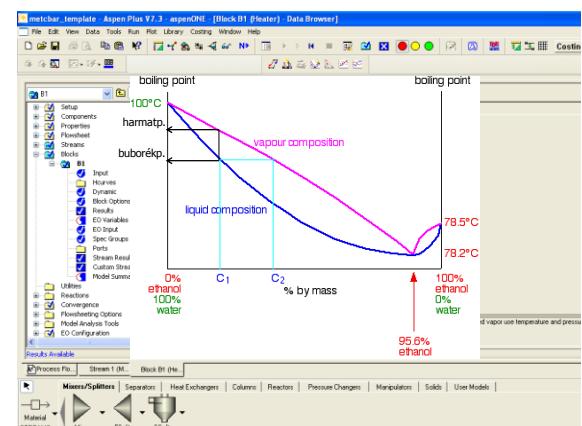
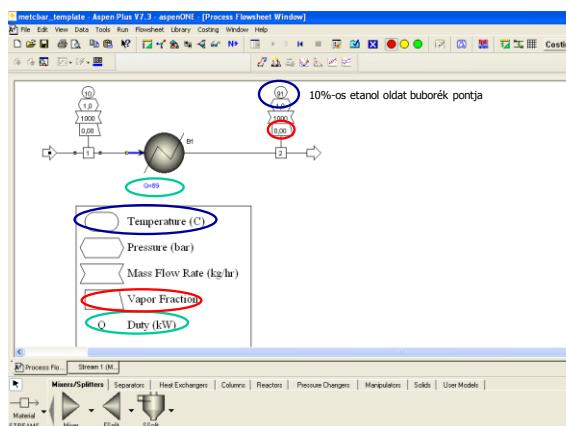
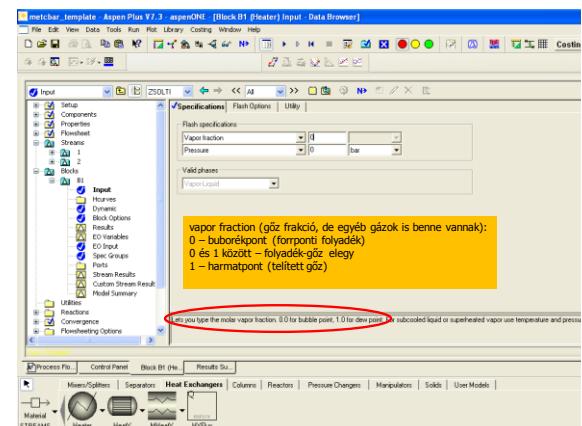
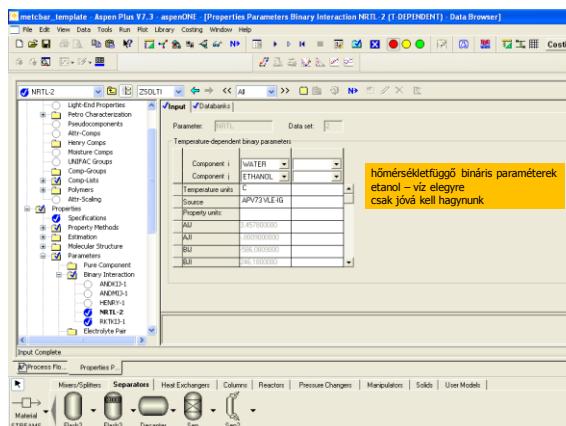
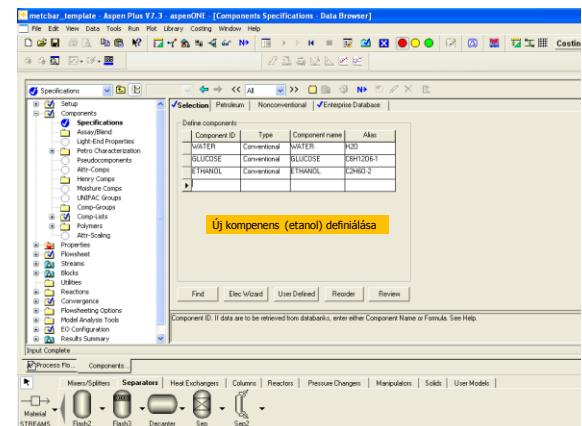


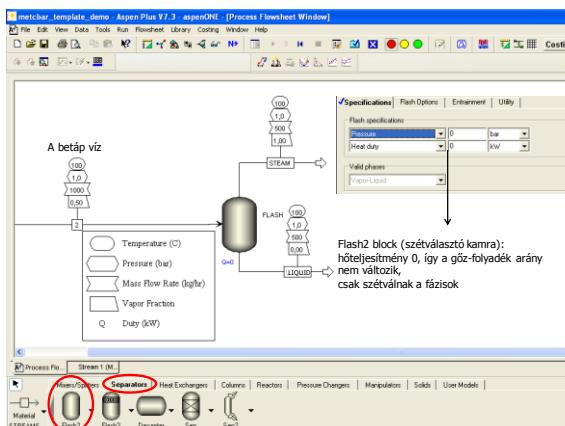
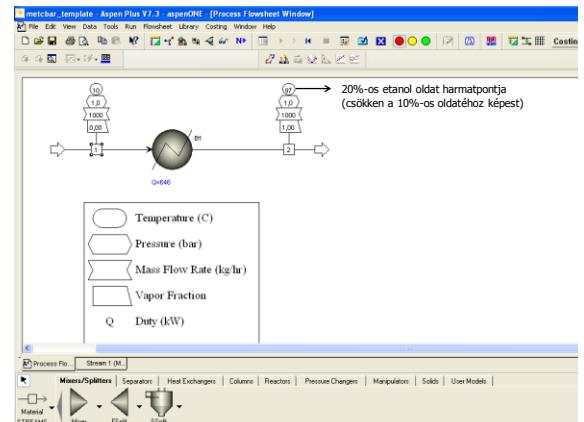
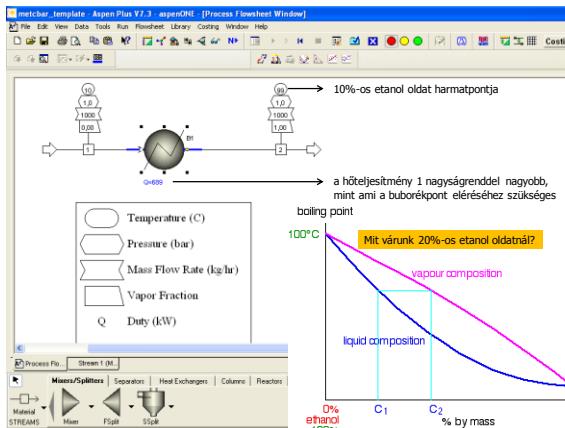
- Mekkora hőcserélő teljesítmény szükséges 1000 kg/h, 10%-os etanol oldat buborékpontra és harmatpontra történő melegítéséhez légiörnyomásón?

- 10% konvencionálisan tömegszázalékot jelent
- buborékpont?
- harmatpont?



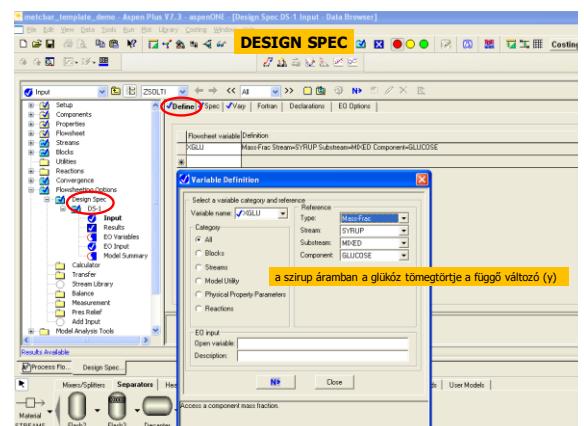
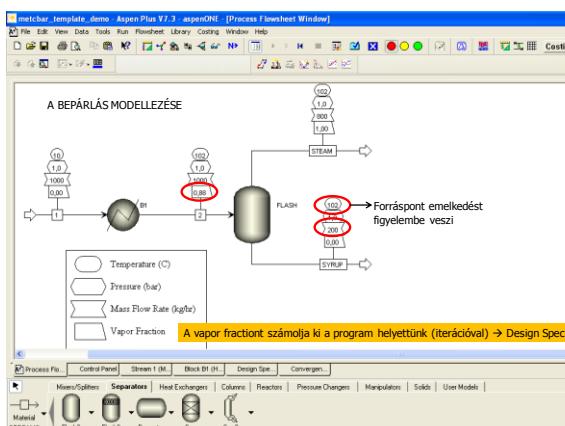
43





Bepárlás

- Bepárlás:**
10°C-os, 1000 kg/h, 10%-os glükóz oldat bepárlása 50%-osra lékgöri nyomásra
- Nincs bepárló block
- Helyette: hőcserélő + flash2 block kombinálása
- Számolás vapor fraction alapján
- 100 kg/h glükóz mellett 100 kg/h víz lesz a szirupban
800 kg/h vizet kell eltárolni a kiindulási 900 kg/h-ból
csak a víz válik gőzzé → $800/900 = 0,88$ a vapor fraction



Specification: Constant, or Fortran expression in terms of Flowsheet variables on Define / Fortran sheets. Right click to select Variable List, then use drag and drop to add to specification.

A B1 hőcsereből a vapor fraction a független változó (x) értéke 0 és 1 között változik az iteráció során

0,8 vapor fraction álltva be a B1-ben, a szimuláció során a Design Spec általában 0,88-ra



Fermentor modellezése – etanolterjesztés

• Reaktor + ...

- Lékgöri nyomáson etanol képződik
- Egy reakció: glükóz \rightarrow 2 etanol + 2 CO₂
- 90% az etanol hozam \rightarrow a glükóz-etanol konverzió 90%
- Exoterm a reakció és állandó hőmérsékletet (30°C) tartunk \rightarrow el kell vonni a hőt hűtővízzel
- Az élesztő tfh. immobilizált (ritka, de van rá példa)

• ... + szeparátor

- A gázlevezetés modellezésére



57

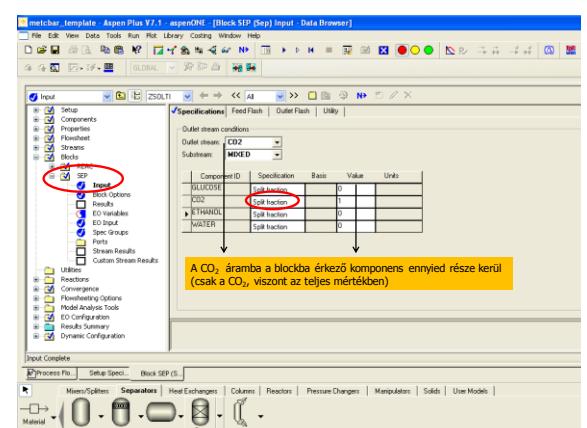
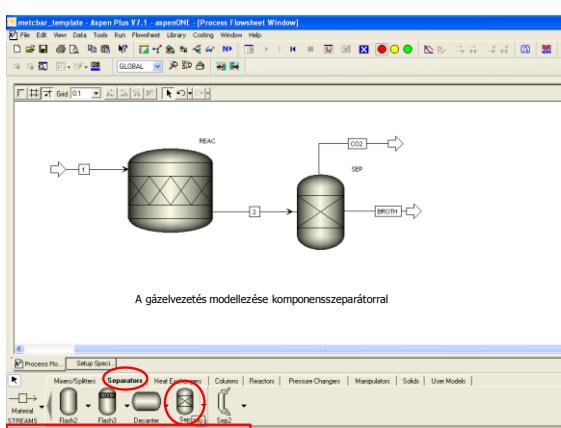
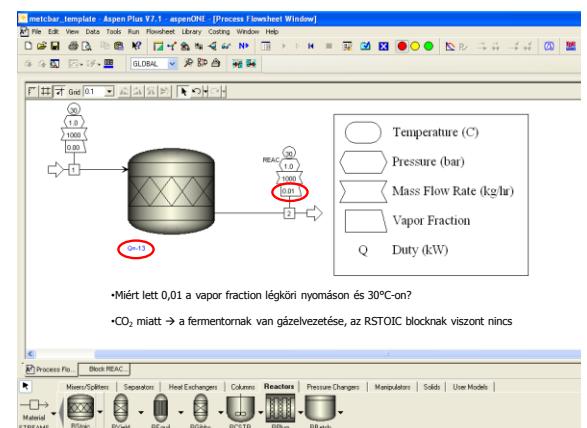
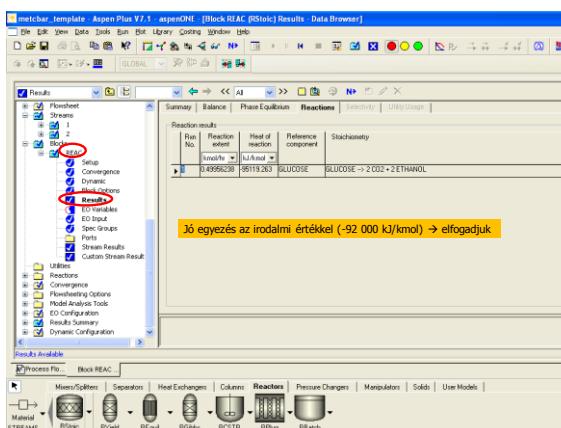
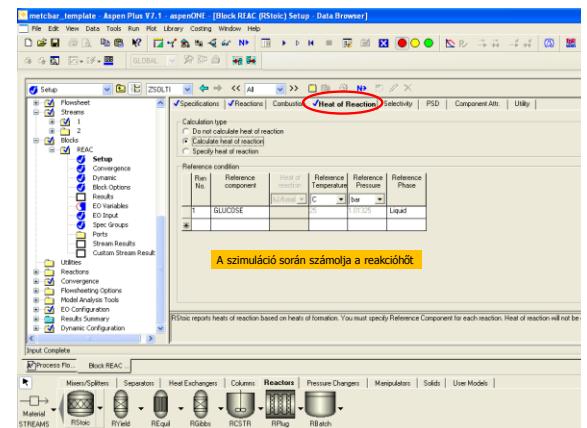
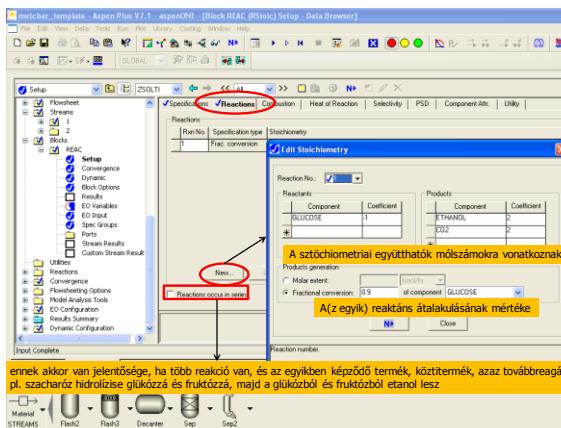
Sztóchiometrikus reaktor, és ismertek a konverziók

Új komponens (CO₂) definíálása

Specifications

Operating conditions:

- Pressure: 1 bar
- Temperature: 30 °C
- Valid phases: VaporLiquid



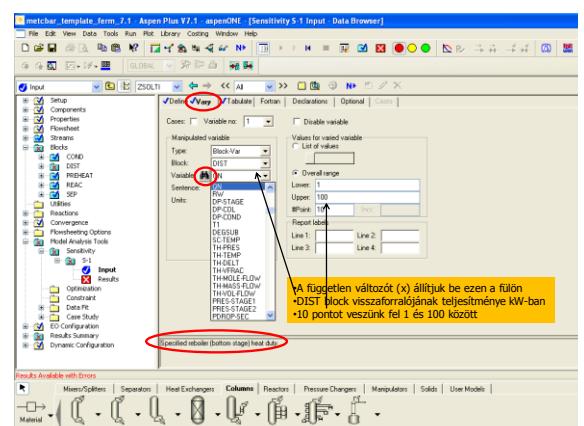
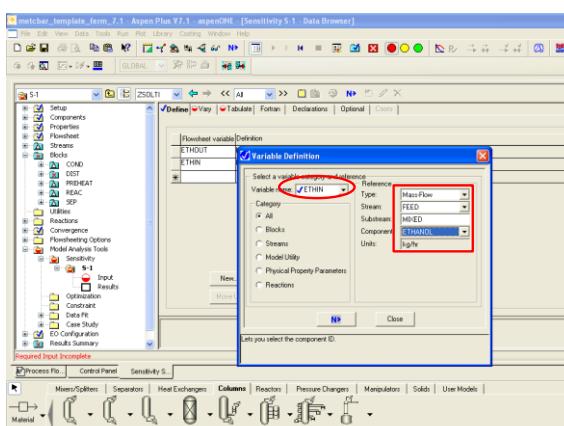
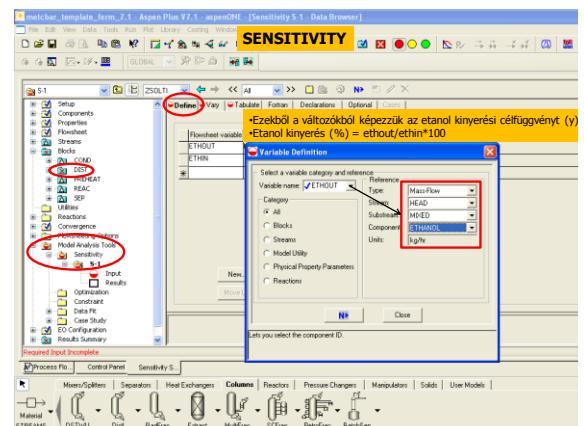
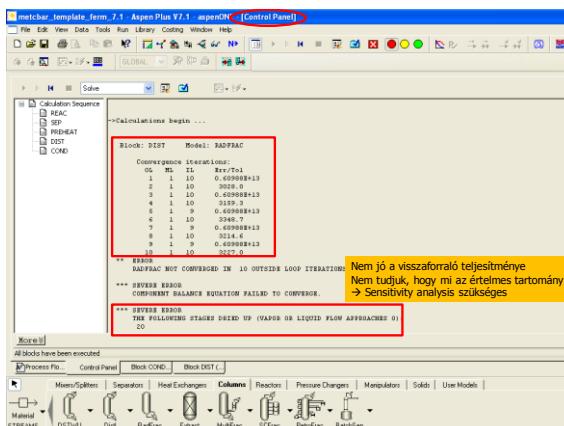
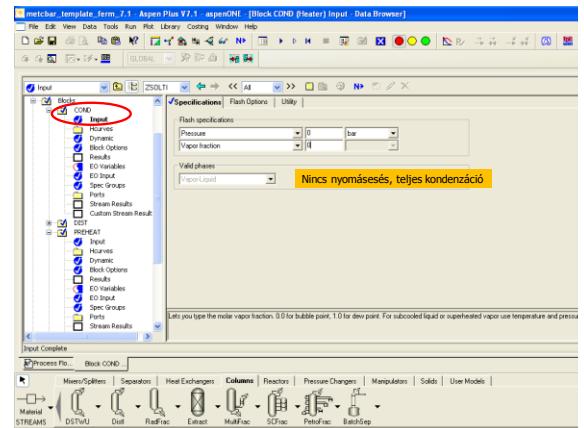
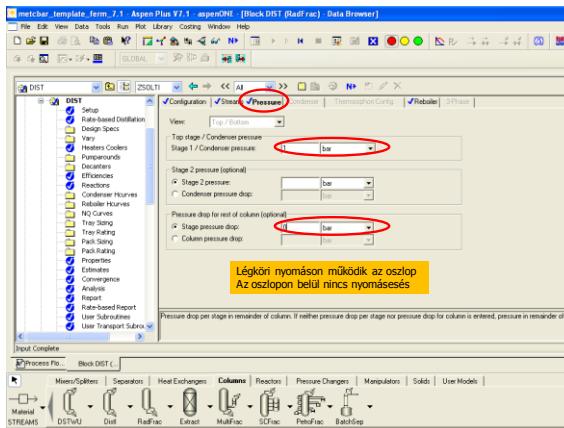
Nyeressz előállítása

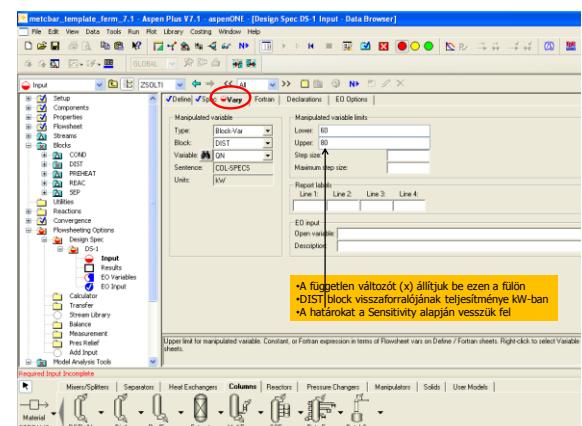
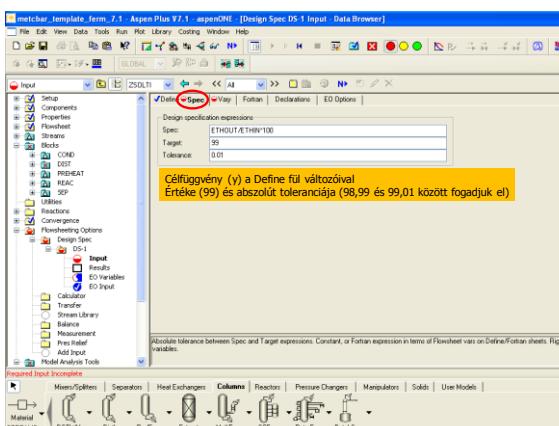
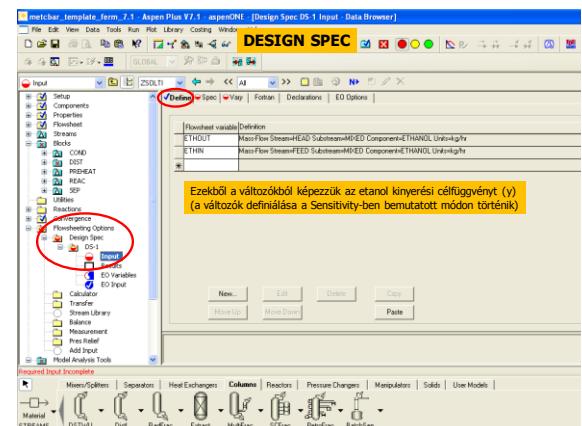
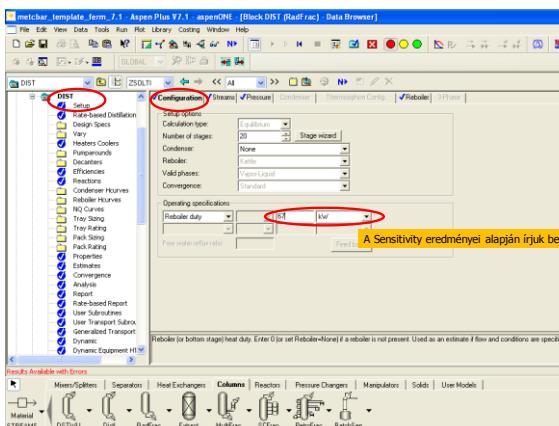
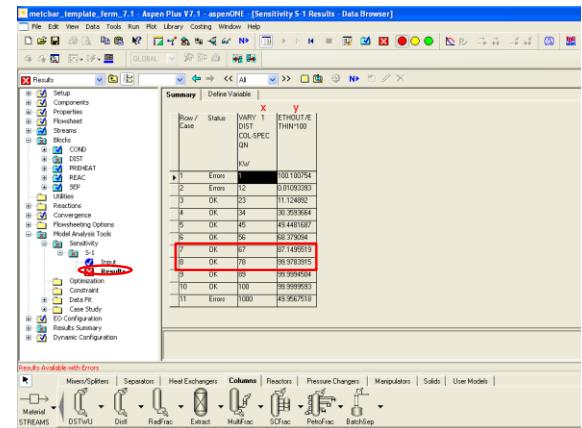
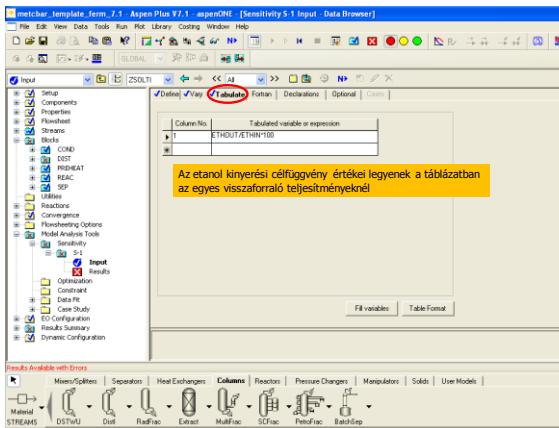


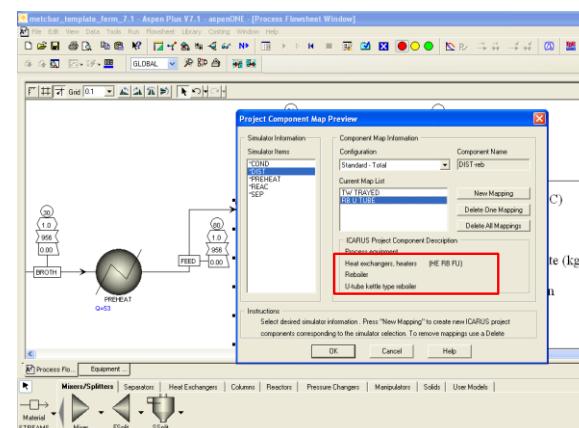
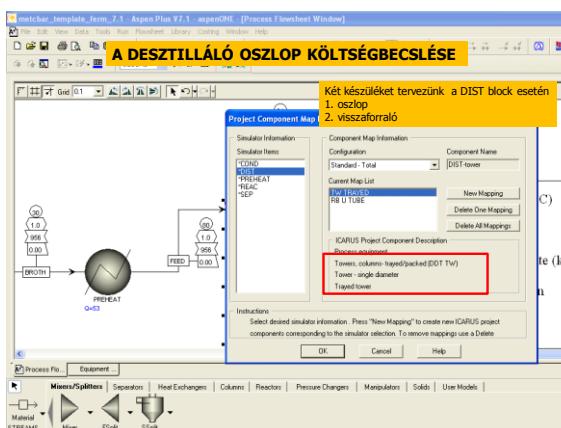
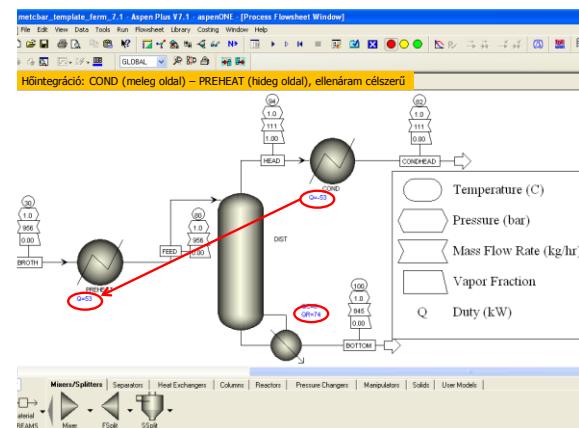
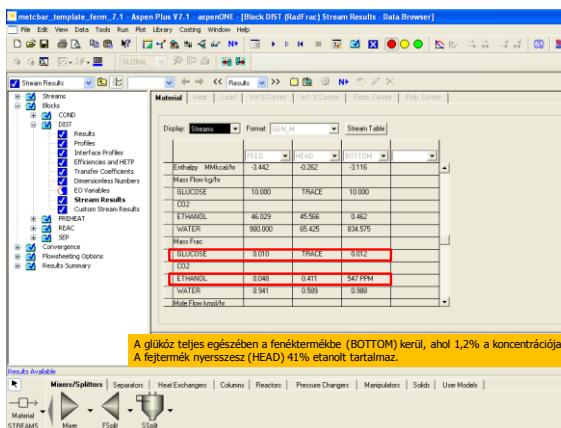
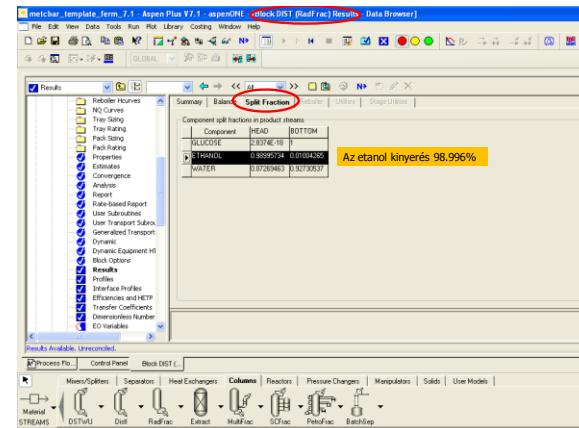
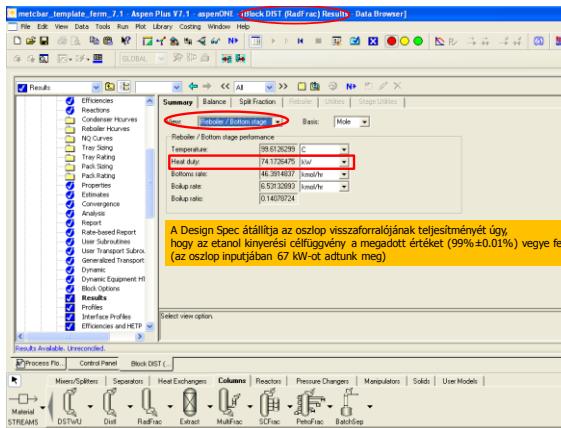
• Desztillációval

- Léhköri nyomásban
 - 20 tányéros oszlop
 - Nincs kondenzátora
 - A 80°C-ra előmelegített fermentí (BROTH) az első tányéra érkezik, és gózt vezetünk el fejterméként, amelyet később külön hőszerekkel kondenzáltatunk
 - Etanol kinyerés: 99%, azaz a kínálási etanol mennyisége 99%-át kapjuk a fejtermék árában
 - Az etanol kinyerést a visszaforraló teljesítményével szabályozzuk
- Érzékenységi vizsgálat (**Sensitivity analysis**) a megfelelő visszaforraló teljesítménytartomány megállapítására
- Design specifikáció a visszaforraló teljesítményérték beállítására

68







metchar_template_ferm_7.1 - Aspen Plus V7.3 - aspenONE - [Results Summary Equipment Summary - Data Browser]

Name	Group	Type	Equipment Cost [EUR]	Total Direct Cost [EUR]	Equipment Weight [KG]
DIST tower	DRB U TUBE / DTw TRAYED		11600	59900	230
DIST tower	73900		227300	6000	

metchar_template_ferm_7.1 - Aspen Plus V7.3 - aspenONE - [Results Summary Equipment Summary - Data Browser]

Name	Group	Item Reference Number	Equipment name	Remarks	Item description	User tag number	Quoted cost per item [EUR]	Currency unit for total cost	Unit of measurement	Heat transfer area [MC]	Number of shells	Tube material	Tube design gauge pressure [Pa]	Tube design gauge pressure [Pa]	Tube operating temperature [DEG C]	Tube operating temperature [DEG C]	Tube outside diameter [MM]
DIST tower	8.00		DIST tower				1.00			11.0000			750.171	114.3	192.678	192.678	94

metchar_template_ferm_7.1 - Aspen Plus V7.3 - aspenONE - [Results Summary Equipment Summary - Data Browser]

Name	Group	Item Reference Number	Equipment name	Remarks	Item description	User tag number	Quoted cost per item [EUR]	Currency unit for total cost	Unit of measurement	Type	Application	Shell material	U-tube length [M]	Vessel tangent to tangent height [M]	Design gauge pressure [Pa]	Unknown device source number (SPUG)
DIST tower	8.00		DIST tower				1.00			DRB U TUBE	DTw TRAYED		10.000	0.000	1000000	1000000

Calculator



• Ismert az $y = f(x)$ összefüggés

• Példa:

fermentáció előtt pH állításhoz kísérletekből ismert, hogy 1 kg tápoldathoz 0,05 kg 10%-os kénsav oldatot kell adni

• y a kénsav oldat tömegárama $\rightarrow \text{H}_2\text{SO}_4$

• x a tápoldat tömegárama $\rightarrow \text{SOLU}$

• összefüggés $y = f(x)$ alakban:

$$\text{H}_2\text{SO}_4 = 0,05 * \text{SOLU}$$



94

metchar_template_ferm_7.1 - Aspen Plus V7.3 - aspenONE - [Process Flowsheet Window]

metchar_template_ferm_7.1 - Aspen Plus V7.3 - aspenONE - [Components Specifications - Data Browser]

Find Compounds

Compounds / Databases

Search criteria

Compound name or alias: begins with contains equals

Compound class: All TD FD K

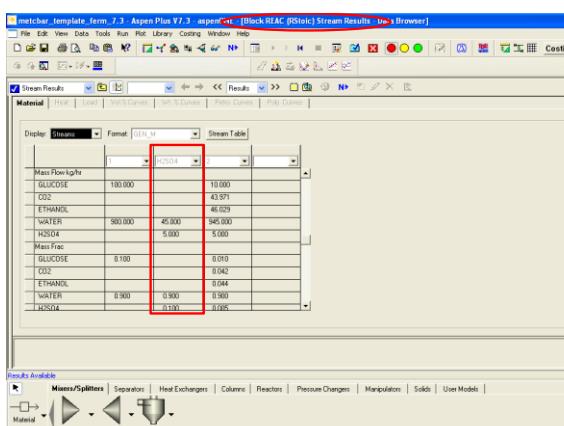
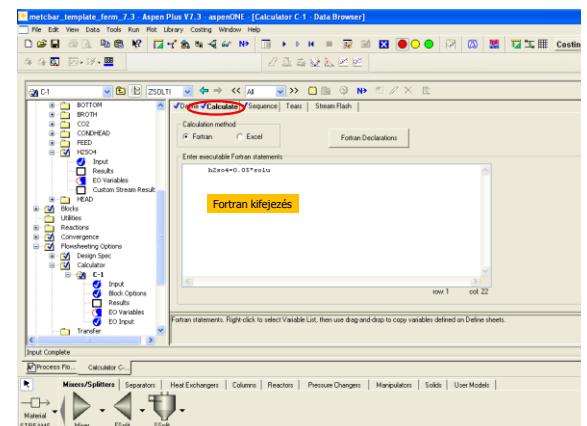
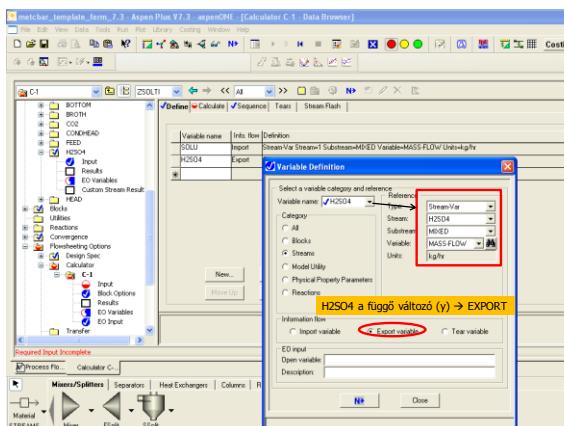
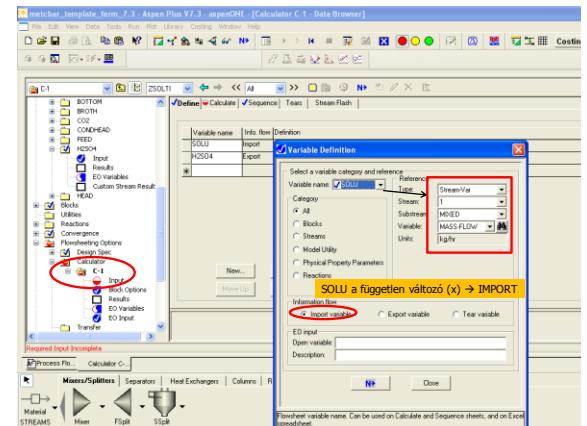
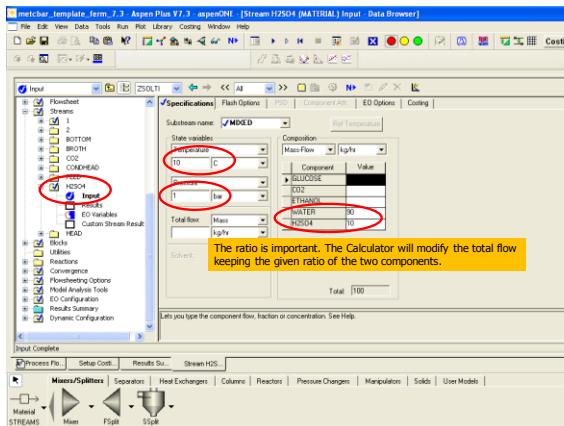
Find now New search Help

kénsav definálása új komponensként

Compounds found matching the specified criteria: 27

Altan	Alternate name	CA.	D.	Compound cl.	Mw	
NITRUMIC ACID	25	Sper nitruc.	7684	APV.	INORGANIC	90.0
CALCIUM SULFATE	24	SULFURIC ACID	7778	APV.	INORGANIC	116.1
SULFURIC C.	302	CHLOROSUL.	7791	APV.	INORGANIC	134.1
FLUOROSULF.	140	FLUOROSULF.	7793	APV.	INORGANIC	100.1
AMMONIUM B.	116	AMMONIUM B.	7803	APV.	INORGANIC	116.1
AMMONIUM B.	115	SULFURIC A.	7803	APV.	INORGANIC	115.1

Add selected compounds



**Hőintegráció,
Aspen Energy Analyzer**

Példa: kurorcadara alapú alkoholgyártás

- amiláz enzimes elfolyósítás 85°C-on
- fermentáció 30°C-on
- fermentlé előmelegítése 80°C-ra
- desztilláció lékgöri nyomáson
 - visszaforraló 100°C-on üzemel
 - fejtermék kondenzációja 91°C → 81°C



Aspen Energy Analyzer V7.3 - aspenONE

HII Project: HPI1

Data

Name	Inlet T [K]	Outlet T [K]	MCp [J/kg°C]	Enthalpy [kJ/kg]	SGEN	RFC [W/m²C]	Flowrate	Effective Cp [J/kgK]	DT Cont.
HEAT1	15.0	65.0	1.154e+00	255.10	—	—	—	—	Global
COLD1	65.0	30.0	1.195e+00	242.5	—	—	—	—	Global
HEAT2	15.0	65.0	1.154e+00	255.10	—	—	—	—	Global
REBOLER	100.0	100.0	2.030e+00	562.9	—	—	—	—	Global
COLD2	95.0	95.0	1.157e+00	450.0	—	—	—	—	Global
"New"	—	—	—	—	—	—	—	—	—

Aspen Plus alapján írjuk be a hőmérsékletet és az entalpiaváltozást

A HTC hőátadási együttható értékét a fluidum jellege alapján választjuk ki

Látni hőközlésnél, ha az Aspen Plusban nem is változik a hőmérséklet, itt 1°C különbséget veszünk

HTC Default Values

- Aromatic Vapor Stream-Anesthete
- Benzene Gasoline
- Coolant for Refining Systems
- Coolant for Refining Systems
- DEFULCO
- Demineralized Water
- Ethanol Anhydrous (MEA or DEA) 10-25% solution
- Fuel Oil
- Gasoline
- Heptane
- High-boiling Hydrocarbons
- Hydrogen Refiner Steam
- Hydrogen
- Kerosene
- Low-boiling Weight Hydrocarbon
- Low-boiling Hydrocarbons
- Lube Oil (Medium Viscosity)
- Lube Oil (Low Viscosity)
- Methanol
- Organic Solvents (Liquid-Liquid)
- Organic Solvents (Non-Chlorinated)
- Organic Solvents (Non-Condensable)
- Stabilized Reformate Vapor
- Water

Data Targets Range Targets Design Options Notes

Filter: 100°C Enter Result Mode Recommend Design Forbidden Matches

Aspen Energy Analyzer V7.3 - aspenONE

HII Project: HPI1

Data

Name	Inlet T [K]	Outlet T [K]	Cost Index	FCF [kW]	SGEN	RFC [W/m²C]	Target Load	Effective Cp [J/kgK]	Target FlowRate	DT Cont.
4-BAR STEAM	144.0	144.0	1.10e+00	6000.00	500.4	113.0	20104.23	—	—	Global

Itt adjuk meg a közműveket: hővíz, fűtőgáz

•belépési és kilepési hőmérséklet

•ára €/kW-ban árindó

Irodalmi forrás alapján állítottam be a gőz árat, mert az alapértelmezett irányelvben a gőz → nem hatékony az integráció, mert olycs a gőz

HTC kiválasztása

Data Targets Range Targets Design Options Notes

Filter: 100°C Enter Result Mode Recommend Design Hot Cold

Aspen Energy Analyzer V7.3 - aspenONE

HII Project: HPI1

Data

Name	a	b	Heat Config						
Heat Exchange Capital Cost Index Parameters	2.971e+04	492.0545	Heat Exchange						
Process Streams	—	—	Plant Life (years)	10.0	ROR	PL			
Utility Streams	—	—	Annualization Factor = (1 + ROR)/100*PL/PL	—	—	—			
"New"	—	—	Operating Cost	0.00100	Hours of Operation	8760.00	Hours/year	—	—
—	—	—	Matches Economic Defaults	—	—	—	—	—	—

a, b együttlől és c kivétekből árakat adunk a hőátadási felületre és a járatok (Shells) számától függ

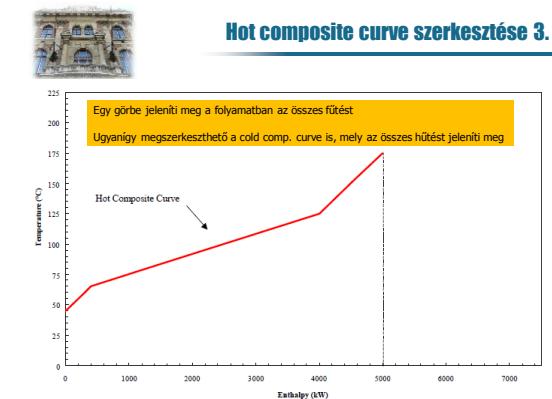
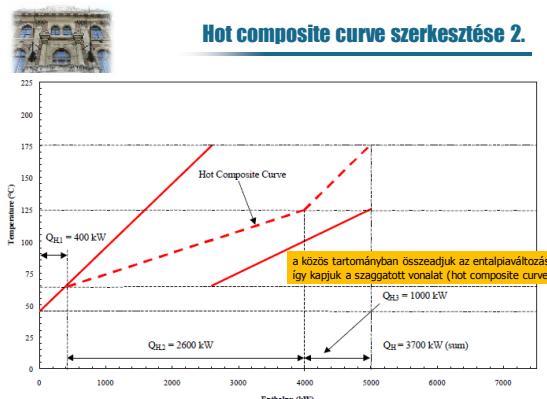
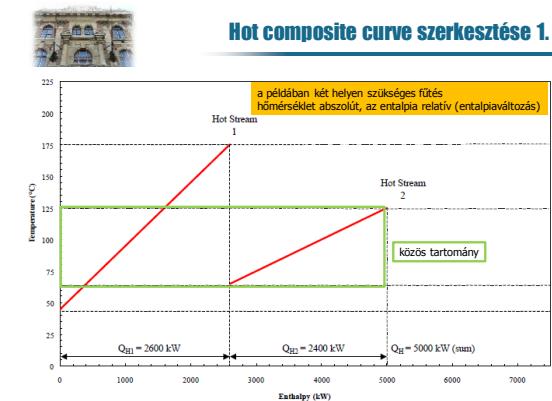
a megtérülési ráta (ROR) és élettartam (PL) értékei nem mérvadóak, azokat úgy állíttattam be, hogy 0,11 legyen az annualizációs faktor

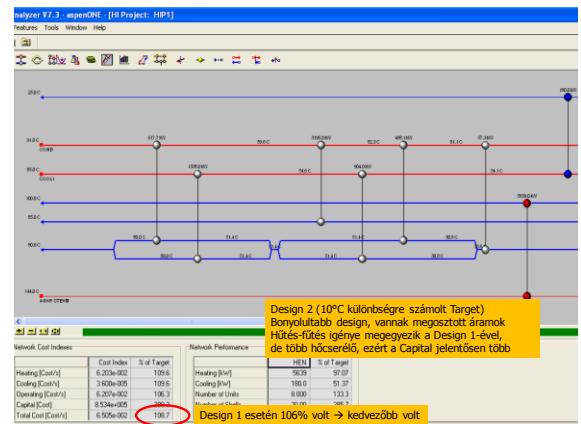
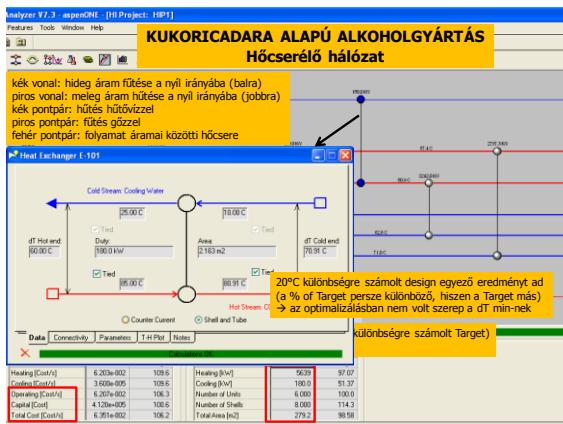
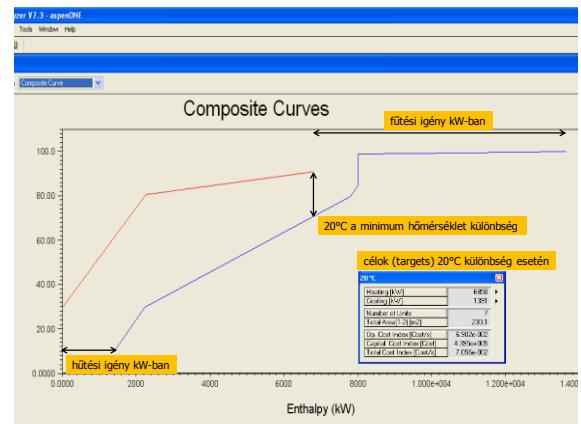
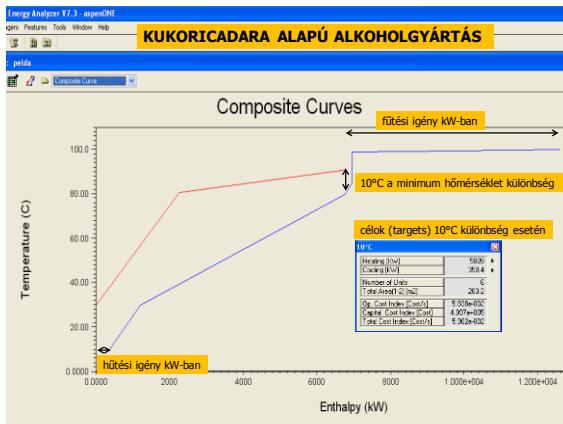
Capital Cost Index (Heat Exch.) = Capital Cost Index (Heat Exch.) * a + b * Heat Exch. Duty

Capital Cost Index (Heat Exch.) = Capital Cost Index (Heat Exch.) * a + b * Heat Exch. Duty + c

Data Targets Range Targets Design Options Notes

Filter: 100°C Enter Result Mode Recommend Design





Méretezés 1.

Az Aspen Plus-ban folyamatos üzemet modellezünk állandósult állapotban

- Szakaszos üzemű berendezések (fermentorok) méretezése manuálisan Excelben
Számlunk kell a holtidővel: két fermentáció között a leengedéshez, tisztításhoz, feltöltéshez, (sterilezéshez) szükséges idő

Az ütemezés alapja a ciklusido = fermentációs idő + holtidő
Erjesztés melaszt alapú etanolgyártásnál: ciklusido 30 h, CIP
Élesztőszaporítás: ciklusido 15 h, steril - nyomásálló tartály
100 m³/h hígított melasz érkezik a fermentációs üzembbe, és tfr. egy etanofermentorból ebből az anyagból maximum 250 m³ telthető
→ 12 etanofermentor szükséges,

és azokat 15 órás eltolással indítva 6 élesztőszaporító fermentor képes ellátni
Oltóágak inkulmarányt:
Élesztőszaporitásnál 7,5-10%

10%-ra példa 1. lépték 1 m³, 2. lépték 10 m³, 3. lépték 100 m³

CIP: Cleaning in place, helyben tisztítás



Méretezés 2.

Fermentorok méretezése

Tartály:

hasznos térfogat 80%

H=D

Csőkígyó:

hőátadási tényező 1 kW/(m²·C)

Keverő:

bekevert teljesítmény: 40 W/m³

Szívattyú:

szívattyúzási idő 1-4 h

Kompresszor:

0,5 VVM (levegő térfogat / fermentor hasznos térfogat / perc)

- Aspen Process Economic Analyzer

az Aspen Plus-ban kapott riport fájl alapján méretezi a készülékeket
desztilláló oszlopok, puffertartályok

WIS: vizben nem oldható szilárdanyag

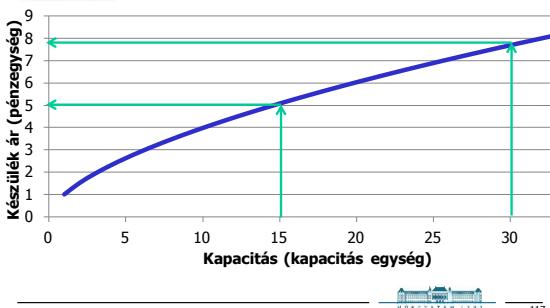


Aspen Economic Analyzer adatlap – Excelben méretezett fermentor

The screenshot shows the Aspen Economic Analyzer V7.1 software interface. A central window displays a table for 'Reactor' configuration, with several cells highlighted in red. The highlighted cells include 'Vessel material' (Stainless steel), 'Vessel diameter' (3000), and 'Design pressure' (0.5). The background shows a navigation bar with various project and analysis tabs.



Méretgazdaságosság



Működési költségek, etanol előállítási költség

- Éves működési költségek
 - nyersanyag, vegyszerek, közművek, egyéb (bérek, biztosítás, karbantartás)
 - egy év alatt fogyasztott mennyiség x ár

• Etanol előállítási költség (€/liter)

$$\frac{\text{Évre vétített tőkeberuházás (álló és forgó)} + \text{Éves működési költség}}{\text{Éves termelt etanolmennyiség}}$$

Éves termelt etanolmennyiség

ha van melléktermékből származó jövedelem, az a számlálóban negatív tagként jelenik meg



Állótőke-beruházás (Fixed Capital Investment)

1. Aspen Icarus / Aspen Economic Analyzer

• Közvetlen költségek

A beszerelt készülék költsége
Üzemcsarnok is benne van

• Közvetett költségek

Mérnöki munka
Építési költségek
Ügyvédi díjak

2. Árajánlat

Etanolyártásnál: abszolútizáló, szűrőprés, száritó, bojler

A kitevő ökölszabály szerint 0,6, de ha több kapacitásra is van ár, illesztéssel számolható

$$\frac{\bar{A}r_2}{\bar{A}r_1} = \left(\frac{\text{Kapacitás}_2}{\text{Kapacitás}_1} \right)^0,6$$

116



Forgótőke-beruházás, Évre vétített tőkeberuházás

Forgótőke (Working Capital Investment) Peters és Timmerhaus ajánlása szerint [1]

- 30 napra elegendő nyersanyag- és vegyszerkészlet
- 30 nap alatt előállított termék
- 30 nap alatt fizetett munkabér
- kimenő számlák értéke 30 napra nézve

Évre vétített tőkeberuházás

- Éves állótőke = állótőke · annualization factor (AF)
 $AF = r/[1-(1+r)^{-n}] = 0,11$
r = kamatláb (7%)
n = beruházás élettartama (15 év)

- Éves forgótőke = forgótőke · kamatláb (7%)

[1] Peters, M.S., Timmerhaus, K.D., *Plant Design and Economics for Chemical Engineers*, McGraw-Hill, New York, (1991)

118

119