

Aceton abszorpciójának számítógépes modellezése

1. Elméleti összefoglalás

A vegyészmérnök feladata, adott célkitűzésnek megfelelően, a vegyipari folyamatok és berendezések tervezése. Valós berendezések üzemeltetését számításokon alapuló tervezés előzi meg, ami a kémiai és fizikai folyamatok matematikai modellekkel történő leírását jelenti.

A műveleti egységek viselkedésének leírásakor esetenként lehetőség adódik egyszerűsítő vagy közelítő számítások, pl. Short-Cut számítások alkalmazására, de ezek az eljárások összetett rendszereknél, ill. nagyobb pontosságot igénylő tervezésnél nem alkalmazhatóak. Többkomponensű rektifikáló folyamat tervezésénél például a MESH egyenletek alapján $N(2C+3)$ nemlineáris egyenlet megoldására van szükség ugyanennyi ismeretlennel (N a tányérok száma, C a komponensek száma). Ez természetesen a számítógép és a megfelelő numerikus módszerek segítségével ma már rutin feladat, amit professzionális szimulátorok biztosítanak a mérnökök számára.

1.1. ChemCad bemutatása

A ChemCad szoftver egy grafikus felülettel rendelkező folyamatszimulátor, mely felhasználó barát módon támogatja a vegyiparban gyakori műveleti egységek és ezek összekapcsolásával alkotott összetett rendszerek modellezését.

A szoftver támogatja a különböző típusú hőcserélők (hőtan), elválasztási műveletek (desztilláció, abszorpció, azaz anyagátadási folyamatok), csővezetékben történő áramlás (hidrodinamika), ill. kémiai reaktorok (reakciókinetika) számítását.

A szimulátor képes a folyamatok stacioner (*steady state*) és dinamikus viselkedésének leírására is. A laborgyakorlat során csak *steady state* modellezést alkalmazunk.

A szoftver a műveleti egységekben lejátszódó folyamatok számítása során beépített adatbázisára támaszkodik.

A komponens adatbázis számos vegyület alapvető kémiai és fizikai paramétereit tartalmazza, mint forráspont, olvadáspont, kritikus hőmérséklet és nyomás, sűrűség, stb. A paraméterek hőfok és nyomásfüggését empirikus egyenletek segítségével számolja.

A komponensek és elegyek termodinamikai viselkedését különböző modellegyenletek segítségével számolja. A fázisegyensúly leírása a legkorszerűbb állapotegyenletek és aktivitási modellek segítségével lehetséges. Ezek az egyenletek alkalmasak az elegyek nemideális viselkedésének (pl. azeotropia) leírására is.

A hőtani viselkedés leírására különböző ún. entalpia modellek állnak rendelkezésre.

A fent említett modell egyenletek megoldásához komponens-specifikus paraméterek szükségesek, melyek szintén az adatbázisban találhatóak.

Az elegyet alkotó komponensektől és az üzemi körülményektől függően különböző modell egyenletek írják le a valóságot megfelelő pontossággal. Az adott tervezési feladatnál alkalmas modellek kiválasztása mérnöki megfontolást igényel.

A szoftver támogatja a berendezések méretezését is. Amennyiben egy berendezés geometriai méretei ismertek, a szoftver beruházási költségeket is tud becsülni, ezzel támogatva a gazdaságossági optimalizálást.

Elválasztási műveletek számításánál a ChemCad lehetővé teszi az egyszerűsítő számítások, short cut számítások kivitelezését, de részletes, ún. szigorú számítások (a MESH egyenletek minden tényérra történő kiszámítása) elvégzésére is van lehetőség.

2. A mérés leírása

A mérés során a hallgatók megismerkednek a ChemCad szoftver felépítésével, elsajátítják annak működtetéséhez szükséges alapvető ismereteket, majd önálló munka keretében vizsgálják acetongőz levegőből történő vizes abszorpcióját.

Az abszorpció elméleti háttere megtalálható a praktikum [1] 8.5. fejezetében. A modellezett oszlop nem egyezik meg a praktikumban bemutatott készülékkel.

Az aceton abszorpcióját a hallgatók az ún. SCDS kolonnával modellezik. Az SCDS kolonna rigorózus számítási algoritmust követő modul, amely a gőz-folyadék egyensúlyt minden tényérra kiszámítja. A modell egyaránt használható desztilláció, abszorpció, sztrippelés számítására. A modell öt bemenő áramot és négy kimenő áramot, öt oldalsó áramot és végtelen számú tényérszámot tud kezelni.

A fázisegyensúly számítása a mérés során a UNIQUAC modell segítségével történik.

A vizsgálandó berendezés éves összköltségének meghatározása egy egyszerű modell segítségével történik, amely az üzemeltetési költségek közül az abszorbens mennyiségét, a beruházási költségeknél a kolonna árát veszi figyelembe. Ez alapján az éves összköltség (*Total annual cost, TAC*) a következő egyenletekkel számolható.

$$TAC = \sum P_i \quad (1)$$

$$P_u = \dot{m}_w \cdot p_w \quad (2)$$

$$P_i = \frac{TIC}{T} \quad (3)$$

ahol,

P_i az éves összköltség összetevői [\$/év]

P_u üzemeltetési költségek [\$/év]

\dot{m}_w abszorbens tömegárama [tonna/év]

p_w abszorbens fajlagos ára [\$/tonna]

P_i beruházási költségek [\$/év]

TIC abszorber beruházási költsége (*Total installed cost*) [\$/év]

T berendezés életideje, 10 év.

A mérés során szükséges számításokhoz javasolt az Excel használata.

3. Mérési feladatok

3.1. A szimulátor kezelésének alapvető elemei

Nyisson új tervezői felületet, állítsa be a megfelelő mértékegységeket. (*Format/Engineering Units*)

Válassza ki a levegő/aceton/víz rendszer modellezéséhez szükséges komponenseket a komponens-adatbázisból. (*Thermophysical/Select Components*)

Válassza ki a megfelelő fázisegyensúly- (*K-value*) és entalpia modellt (**UNIQUAC** és **Latent Heat**). (*Thermophysical/Thermodynamic Settings*)

A *Help* menüben keressen rá a két modellre, és ismerkedjen meg működésükkel és a használatukra vonatkozó megköötésekkel.

Keresse ki a szoftver adatbázisából az acetona vonatkozó adatokat. (*Thermophysical/Component Database/View-Edit Components//Print Component Data*).

Feladat: Keresse ki a vegyület

- molekulatömegét,
- kritikus hőmérsékletét és nyomását
- a sűrűségszámításhoz használható együtthatókat.

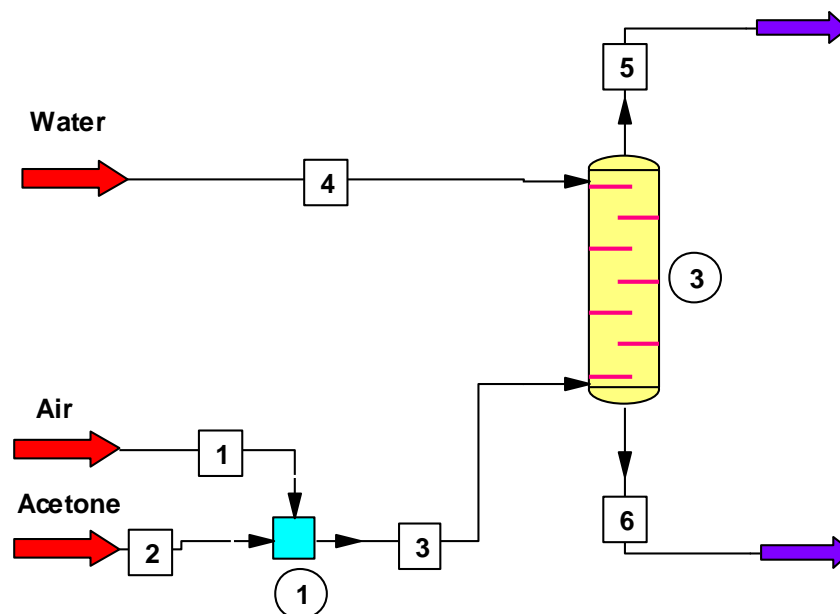
Számítsa ki az acetona sűrűségét normál körülmények esetén az a *Help* „Library Equations” szócikkei közül

Építse fel az acetona abszorpció modellezéséhez szükséges folyamatábrát: válassza ki a megfelelő műveleti egységeket a palettáról, és helyezze el őket a tervezési felületen (lásd 1. ábra).

Az abszorpció kolonnát SCDS#17 kolonnával modellezze (*No condenser* és *No reboiler* specifikációkkal). Az 1. ábrán látható *Mixer* (kék négyzet) egység alkalmazása opcionális.

Ismerkedjen meg a műveleti egységek adatlapjaival, adja meg a szimulációhoz szükséges adatokat (zöld színnel kiemelt mezők).

A költségbecslés menetét a mérésvezető részletesen bemutatja.



1. ábra. Az acetona abszorpció folyamatábrája

3.2. Acetona abszorpciójának vizsgálata

A mérés célja 200 m³/h 20°C-os (1 bar) acetonnal szennyezett levegőáram megtisztítása folyamatos üzemű vizes abszorpcióval úgy, hogy a tisztított levegőben az acetona koncentrációja ne haladja meg a 150 mg/m³-es határértéket. A szennyezett levegőben az acetona árama 10 kg/h. A berendezés méretezésénél és az üzemi paraméterek meghatározásánál cél az éves összköltség minimalizálása (10 éves amortizációval számolva).

Rendelkezésre álló adatok:

- abszorbens: 10°C-os víz ($c_p=4,2$ kJ/kgK, ára: 0,5 \$/t)
- abszorpciós oszlop anyaga 0.5 cm vastag acél ($\rho=7800$ kg/m³); install factor: 3.
- tányératmérő és tányértávolság: 30 cm

Vizsgálja az abszorpció költséghatékonyságát az 1. táblázat kitöltésével:

- számítsa ki a tisztított gáz acetontartalmát, ill. a költségeket rögzített tányérszám mellett (6 tányér)
- Állapítsa meg, mekkora minimális vízáram kell 9-4 tányérszámok mellett (a vízáramot 50 kg/h lépésekben változtassa).

1. táblázat

Vízáram [kg/h]	Tányérszám [db]	Tisztított gáz acetontartalma [mg/m ³]	P_u \$/év	P_1 \$/év	TAC \$/év
300	6				
400	6				
.	.				
.	.				
800	6				
<hr/>					
	9				
	8				
	7				
	6				
	5				
	4				

Válassza ki az optimálisnak ítélt vízáram – tányérszám párosítást. Indokolja döntését.

4. Beadandó

A 3.1. pontban lévő kérdésekre adott válaszok és az 1. táblázat kitöltve, a kiválasztott optimális üzemi paraméterek, a döntés indoklása.

5. Irodalom

[1] Tanszéki munkaközösség: Vegyipari félüzemi praktikum (65029). Műegyetem kiadó 2000.

A jegyzetet készítette:

Benkő Tamás

Ellenőrizte:

Deák András

Koczka Katalin