



Aspen Plus -prosessisimulointiohjelmiston soveltuvuus opetuskäyttöön

Lassi Huovila

OPINNÄYTETYÖ
Toukokuu 2023

Biotuote- ja prosessitekniikka

TIIVISTELMÄ

Tampereen ammattikorkeakoulu
Biotuote- ja prosessitekniikan tutkinto-ohjelma

HUOVILA, LASSI:
Aspen Plus -prosessisimulointiohjelmiston soveltuvuus opetuskäyttöön

Opinnäytetyö 41 sivua, joista liitteitä 16 sivua
Toukokuu 2023

Opinnäytetyö tehtiin Tampereen ammattikorkeakoulun Biotuotetekniikan tutkinto-ohjelmalle. Opinnäytetyön tarkoituksena oli tutkia Aspen Plus -prosessisimulointiohjelmiston soveltuvuutta opetuskäyttöön. Tällä hetkellä Biotuotetekniikan tutkinto-ohjelmassa opetetaan prosessisimulointia CHEMCAD-ohjelmistolla Tehdassuunnittelu ja prosessien mallintaminen -opintojaksolla. Työn kokeellinen osuus on suoritettu Tampereen teknillisellä yliopistolla, jossa on käyttöoikeudet Aspen Plus -ohjelmistolle.

Opinnäytetyössä tutkittiin erilaisia prosessisimulointiin liittyviä tehtäviä Tehdassuunnittelu ja prosessien mallintaminen -opintojaksolta sekä Neea Hasan ”CHEMCAD-simulointiohjelmiston hyödyntäminen” opinnäytetyössä laadittuja tehtäviä Aineensiirto ja kemialliset yksikköprosessit -opintojaksolle. Opinnäytetyön tuloksena viisi CHEMCAD-tehtävää toteutettiin Aspen Plus -ohjelmistolla, joista kolme tehtävää on suunniteltu Tehdassuunnittelu ja prosessien mallintaminen -opintojaksolle ja kaksi Aineensiirto ja kemialliset yksikköprosessit -opintojaksolle. Tehtävien avulla perehdytään Aspen Plus -ohjelmiston käyttöön, minkä lisäksi ohjelmiston avulla tuetaan teorian ja käytännön prosessien välistä yhteyttä. Jokaisessa tehtävässä esiintyy olennaisia prosessisimulointiin kuuluvia asioita, mutta niissä on tuotu esille erilaisia Aspen Plus -ohjelmiston ominaisuuksia. Opinnäytetyössä on myös tarkasteltu jatkokehitysmahdollisuuksia Aspen Plus -ohjelmistolle. Näitä ovat kiintoaineprosessien simuloinnit ja kumeeni prosessin simulointi, joita voitaisiin hyödyntää muillakin opintojaksoilla.

Opinnäytetyön tuloksena syntyneiden tehtävien myötä Tampereen ammattikorkeakoulun Biotuotetekniikan tutkinto-ohjelma saa hyvän mahdollisuuden hyödyntää nykyaikaisen prosessisimulointiohjelmiston käyttöä opetuksessa. Aspen Plus -ohjelmistoa käytetään useissa suunnittelutoimistoissa lukuisilla teollisuudenaloilla, esimerkiksi kemianteollisuudessa.

Asiasanat: prosessisimulointiohjelmisto, käyttöönotto, suunnittelu

ABSTRACT

Tampereen ammattikorkeakoulu
Tampere University of Applied Sciences
Degree Programme in Bioproduct and Process Engineering

HUOVILA, LASSI:
The Suitability of Aspen Plus Process Simulation Software for Teaching

Bachelor's thesis 41 pages, appendices 16 pages
May 2023

The thesis was commissioned by Tampere University of Applied Sciences degree program in Bioproduct Engineering. The purpose of the thesis was to explore the suitability of Aspen Plus process simulation software for teaching. Process simulation is taught at Bioproduct Engineering using the CHEMCAD software in the plant design and process modeling course. The experimental parts of the work were completed at Tampere University of Technology.

The thesis examined tasks related to process simulation from the plant design and process modeling course, as well as Neea Hasa's "Utilisation of CHEMCAD Simulation Software" thesis. As a result of this study, five exercises were made for the Aspen Plus software. Three of these exercises were planned for the plant design and process modeling course and two exercises were planned for the mass transfer and chemical unity processes course. Both courses belong to the bioproduct Engineering degree program. The exercises serve as instructions for the Aspen plus software, which in addition supports the connection between theory and practical processes with the help of the software. Future development possibilities for the Aspen Plus software were also explored in the thesis. These include the simulations of solid matter processes and the simulation of the cumene process, which could also be used in other courses.

The results of this study provide the Bioproduct Engineering degree programme with a good opportunity to utilize the use of modern process simulation software in teaching. Aspen Plus software is used in several engineering offices in many industries such as the chemical industry.

Key words: process simulation software, introduction, design

SISÄLLYS

1	JOHDANTO	6
2	PROSESSISIMULOINTIOHJELMISTOT	7
	2.1 Prosessisimulointiohjelmistojen käyttö	7
	2.2 Aspen Plus -simulointiohjelmisto	7
	2.3 CHEMCAD-simulointiohjelmisto	8
3	ASPEN PLUS -OHJELMISTON KÄYTTÖÖNOTTO	9
	3.1 Aspen Plus -ohjelmistoon tutustuminen	9
	3.2 Aspen Plus -ohjelmiston hyödyntäminen opintojaksoilla	12
4	ASPEN PLUS HARJOITUSTEHTÄVÄT	13
	4.1 Isobutaanin polttaminen vajaalla ilmamäärällä	13
	4.2 Hiilivetyseoksen tislauk	16
	4.3 Lämmönvaihtimen mitoitus	17
	4.4 Shortcut-kolonnin mitoitus	18
	4.5 Aineiden ominaisuudet	21
5	ASPEN PLUS-OHJELMISTON HYÖDYNTÄMISMAHDOLLISUUDET 22	
	5.1 Aspen Plus -ohjelmiston hyödyntämismahdollisuudet	22
	5.2 Kiintoaineprosessien simulointi	22
	5.3 Kumeeniprosessi	23
6	POHDINTA	24
	LÄHTEET	25
	LIITTEET	26
	Liite 1. Isobutaanin polttaminen vajaalla ilmamäärällä	26
	Liite 2. Hiilivetyseoksen tislauk	31
	Liite 3. Lämmönvaihtimen mitoitus	34
	Liite 4. Shortcut-kolonnin mitoitus	37
	Liite 5. Aineiden ominaisuudet	41

ERITYISSANASTO

CAS-numero	Kemikaalien tunnistenumerojärjestelmän numerosarja, jolla helpotetaan kemikaalitietojen hakemista
Lämmönvaihdin	Laite, jolla siirretään lämpöenergiaa nesteiden välillä
Prosessikaavio	Kuvaus prosessista ja sen vaiheista
Reaktori	Laite, jolla suoritetaan kemiallisia reaktioita
Kolonni	Laite, jonka avulla erotetaan aineet toisistaan
Yksikköoperaatio	Kemianteollisuudessa osaprosessi kokonaisprosessista

1 JOHDANTO

Prosessisimulointiohjelmat toimivat työvälineinä prosessisuunnittelussa, joita käytetään suunnittelutoimistoissa lukuisilla teollisuuden aloilla, kuten kemianteollisuudessa. Prosessisimulointiohjelmistojen käyttö on yleistynyt valtavasti sen tuomien hyötyjen vuoksi. Prosessisimuloinnilla säästetään suunnittelussa aikaa ja kustannuksia. Prosessisimuloinnilla vähennetään prosessisuunnittelussa virheitä ja vaarallisia kokeellisia testejä. Näiden asioiden perusteella suunnittelutoimistot pyrkivät mainostamaan kemianalan yrityksille käyttämiään simulointiohjelmistoja. Yksi paljon maailmalla käytetty prosessisimulointiohjelma on Aspen Plus.

Tämän opinnäytetyön tarkoituksena on tutkia Aspen Plus -prosessisimulointiohjelmiston soveltuvuutta opetuskäyttöön. Opinnäytetyön tilaajana toimi Tampereen ammattikorkeakoulun Biotuotetekniikan tutkinto-ohjelma. Tällä hetkellä Biotuotetekniikan tutkinto-ohjelmassa opetetaan prosessisimulointia CHEMCAD-ohjelmistolla Tehdassuunnittelu ja prosessien mallintaminen -opintojaksolla.

Opinnäytetyön kokeelliset osuudet ovat suoritettu Tampereen teknillisellä yliopistolla, jossa on käyttöoikeudet Aspen Plus -ohjelmistolle. Opinnäytetyön tuloksena viisi CHEMCAD-tehtävää toteutettiin Aspen Plus -ohjelmistolla, joista kolme tehtävää on suunniteltu Tehdassuunnittelu ja prosessien mallintaminen -opintojaksolle ja kaksi Aineensiirto ja kemialliset yksikköprosessit -opintojaksolle. Tehtävät ovat peräisin näiltä opintojaksoilta, sekä työssä on tutkittu Neea Hasan ”CHEMCAD-simulointiohjelmiston hyödyntäminen” -opinnäytetyössä laadittuja tehtäviä ja niiden soveltuvuutta Aspen Plus -ohjelmistolle. Opinnäytetyössä on myös tarkasteltu jatkokehitysmahdollisuuksia Aspen Plus -ohjelmistolla.

2 PROSESSISIMULOINTIOHJELMISTOT

2.1 Prosessisimulointiohjelmistojen käyttö

Tieteellinen kehitys on vaikuttanut maailmaan positiivisella tavalla, kuten elintason nousuun, lääketieteen kehittymiseen ja monimutkaisten teollisten prosessien kehittymiseen. Monia erilaisia prosesseja voidaan mallintaa digitaalisessa ympäristössä prosessisimulointiohjelmistojen avulla. Prosessisimulointiohjelmistoja käytetään prosessisuunnittelussa, joiden pääkäyttäjinä toimivat insinöörit lukuisilla tekniikan aloilla. (AspenTech 2023.)

Prosessisimulointiohjelmistojen avulla prosessisuunnittelu on nopeaa ja turvallista. Prosessisimulointiohjelmisto tarvitsee vain simuloitavan prosessin tiedot digitaalisen mallin luomiseksi, esimerkiksi luettelon prosessissa käytettävistä kemikaaleista ja prosessissa käytettävistä laitteista. Nykyaikaisilla ohjelmistoilla saadaan luotua selkeitä visuaalisia esityksiä simuloitavista prosesseista. (AspenTech 2023.)

2.2 Aspen Plus -simulointiohjelmisto

Aspen Plus on yhdysvaltalaisen yrityksen AspenTechin tekemä prosessisimulointiohjelmisto. Yritys on perustettu vuonna 1981 ja se on syntynyt Massachusetts Institute of Technologyn (MIT) ja Yhdysvaltain energiaministeriön yhteisestä tutkimusprojektista. Tätä projektia kutsutaan Advanced System for Process Engineering, josta tulee lyhenne ASPEN. AspenTechin ensimmäinen tuote Aspen Plus on julkaistu vuonna 1982. (Aspentech 2023.)

Ensimmäinen versio Aspen Plus -ohjelmistosta keskittyy ainoastaan kemiantekniikan prosessien simulointiin, mutta nykypäivänä ohjelmistolla voidaan simuloida laajasti erityyppisiä prosesseja, esimerkiksi kiintoaineprosesseja. Aspen Plus -ohjelmistoa voidaan hyödyntää esimerkiksi jalostamoissa, kemikaalien ja lääk-

keiden valmistuksessa, jäteveden käsittelyssä sekä sellun ja paperin tuotannossa. Tässä on vain pieni osa toimialoista mihin Aspen Plus -ohjelmistoa voidaan käyttää.

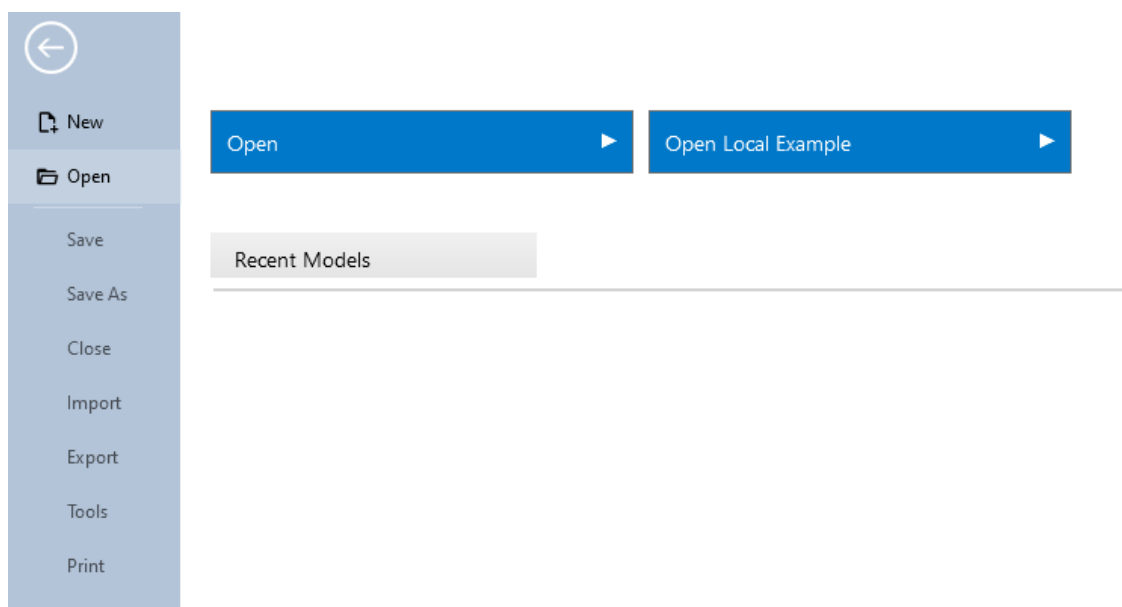
2.3 CHEMCAD-simulointiohjelmisto

CHEMCAD on kemiallisten prosessien simulointiohjelmisto, joka on vuonna 1988 perustetun chemstations yrityksen tuote (Chemstation 2020). Kuten Aspen Plus -ohjelmisto, myös CHEMCAD on paljon maailmalla käytetty ohjelmisto kemianteollisuudessa, mutta sitä mainostetaan myös runsaasti korkeakouluille opetuskäyttöön. Tällä hetkellä Tampereen ammattikorkeakoulun Biotuotetekniikan tutkinto-ohjelmassa on käytössä CHEMCAD.

3 ASPEN PLUS -OHJELMISTON KÄYTTÖNOTTO

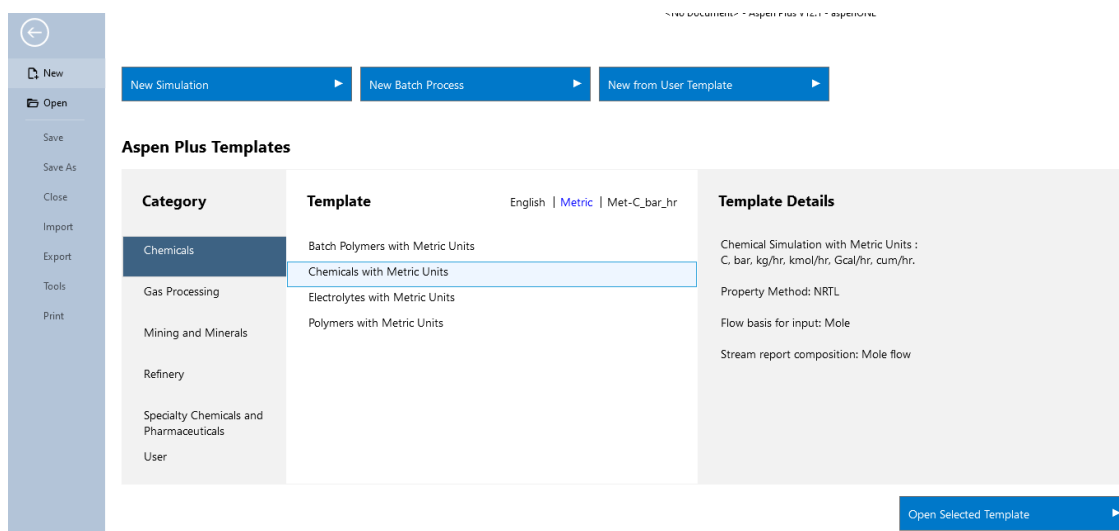
3.1 Aspen Plus -ohjelmistoon tutustuminen

Aspen Plus -ohjelmistosta on olemassa lukuisia ohjeita eri versioista, jotka ovat monien satojen sivujen pituisia PDF-tiedostoja. Tämän tyyppisten ohjemateriaalien läpikäyminen on todella työlästä, joten ohjelmiston käyttöön on perehdytty tässä työssä käyttämällä Aspen Plus -ohjelmistoa ja tekemällä harjoitustehtäviä. Käytössä on Aspen Plus versio 12.1. Aloitusvalikosta kuvassa 1 voidaan valita simulointitiedostoja tai luoda uusi simulointi kohdasta New.



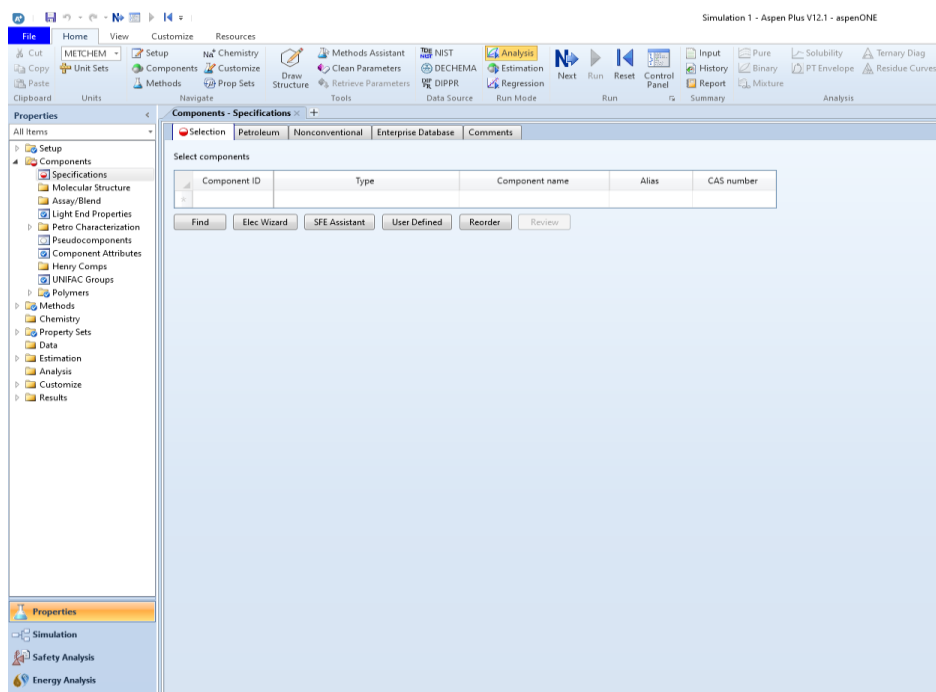
KUVA 1. Aloitusvalikko (Huovila 2023).

Luodessa uutta simulointimallia, voidaan aluksi valita simulointiin sopiva kategoria kuvassa 2. Valittavana on kemikaalit, kaasuprosessit, louhinta ja mineraalit, jalostamo, erikoiskemikaalit ja lääkkeet, sekä käyttäjän itse tekemä yksinkertaisempi malli. Riippuen siitä minkä kaltaista simulointia ollaan suorittamassa, kannattaa kategoria valita simulointia kuvaavalla tavalla. Jokainen kategoria ehdottaa siihen sopivia malleja, jotka sisältävät niihin suositeltavia yksiköitä ja menetelmiä. Näitä pystyy myös muokkaamaan myöhemmin simuloinnin aikana. Open Selected Template -kohdasta saadaan luotua valittu simulointimalli.



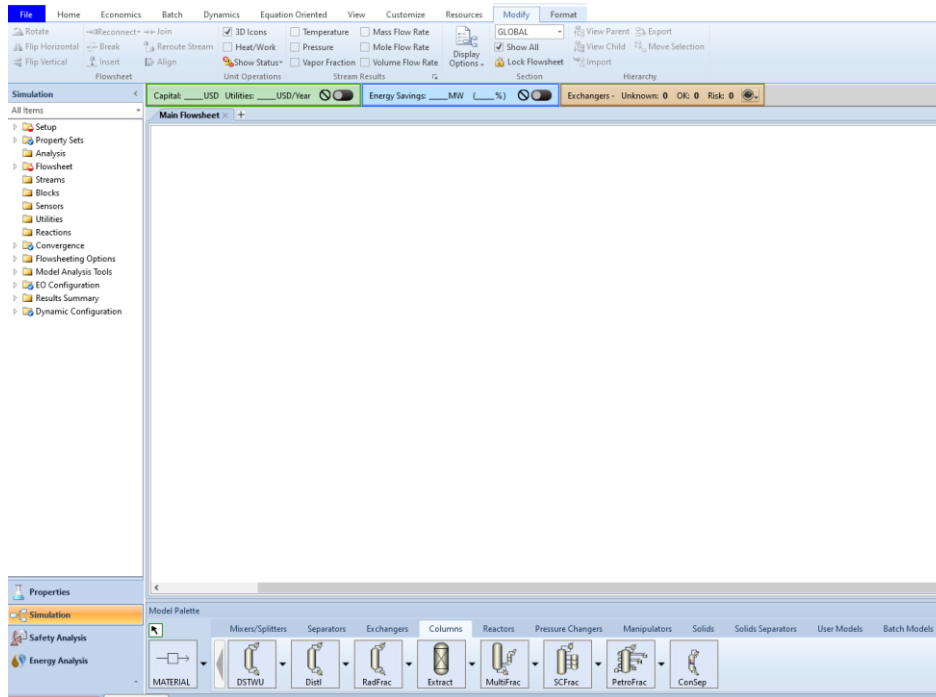
KUVA 2. Simulointimallin valitseminen (Huovila 2023).

Aspen Plus avaa kuvan 3 mukaisen näkymän eli ominaisuudet-osion. Simulointiin voidaan syöttää tietoja halutussa järjestyksessä, mutta simulointi onnistuu myös kätevästi Next toiminnolla, joka ohjaa käyttäjää luonnollisessa järjestyksessä läpi simuloinnin. Next toiminnon avulla ohjelma ilmoittaa, mikäli olennainen tieto jää puuttumaan edellisestä kohdasta. All items ikkunasta pakollisia tietoja vaativat kohdat ovat merkattu punaisella. Alussa ominaisuudet-osiossa voidaankin valita simuloinnille halutut komponentit.



KUVA 3. Ominaisuudet-osio (Huovila 2023)

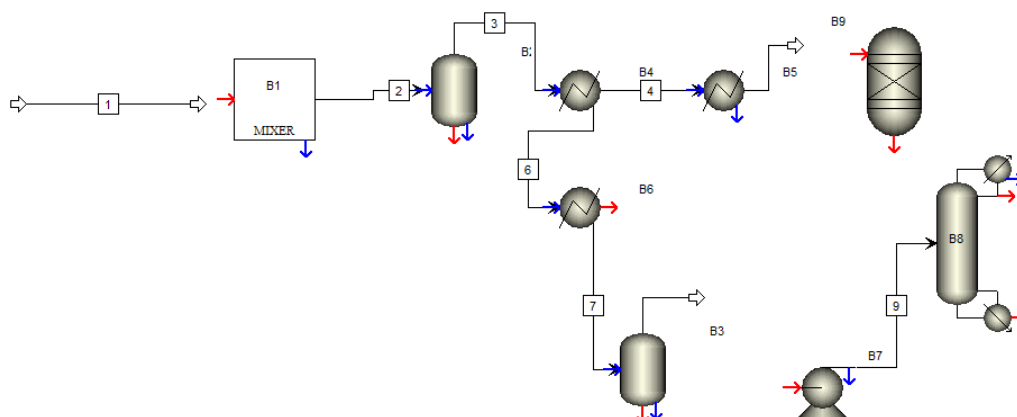
Kuvassa 4 on esiteltynä simulointiosio. Myös simulointiosiossa All items -ikkunassa on merkitty punaisella tietoja vaativat kohdat. Kuvan 4 alareunassa on valintaikkuna lukuisille laitteille sekä virtauksille. Prosessikaavio piirretään valitsemalla halutut laitteet sekä virtaukset. Näitä voidaan lisätä painamalla hiiren vasenta näppäintä halutun symbolin päällä ja uudestaan painamalla hiiren vasenta näppäintä kohdassa, johon laite sijoitetaan. Syöte- että ulostulovirtauksia voi raa-hata niille merkityille paikoille.



KUVA 4. Simulointiosio (Huovila 2023)

Kuviossa 1 on esimerkki prosessikaaviosta, jossa punaisella merkatut nuolet vaativat syötevirran tai ulostulovirran. Kuvion 1 esimerkkiä tutkitaan tarkemmin työn myöhäisemmässä vaiheessa. Sinisellä merkatut kohdat ovat lisämäärityksiä, joita ei vaadita simuloinnin suorittamisessa. Kuvion 1 prosessikaaviossa ei ole yhdistetty kaikkia virtauksia lopullisesti, jotta prosessikaaviosta voidaan nähdä mahdolliset liitännät. Kun prosessikaavio on valmis, voidaan syötevirroille sekä laitteille määrittää ominaisuudet Next toiminnolla. Toiminnon saa näkyviin home välilehdestä ja tämän avulla ohjelma käy syötevirtojen sekä laitteiden ominaisuudet läpi yksi kerrallaan. Virtauksille ja laitteille voidaan tehdä muutoksia jälkikäteen. Kun nämä kaikki vaiheet ovat suoritettu, ohjelma pyytää suorittamaan simuloinnin ajon. Kun simulaatio on ajettu, voidaan raporttia, tuloksia, laitteita ja syöte- että ulostulovirtauksia tarkastella niiden omilta välilehdiltä, joita ohjelma

kerää työskentelyosion yläreunaan. Näitä voidaan tutkia myös All items ikkunasta, jossa voidaan havaita mahdolliset virheet virtauksissa ja laitteissa.



KUVIO 1. Esimerkki prosessikaaviosta.

3.2 Aspen Plus -ohjelmiston hyödyntäminen opintojaksolla

Tämän opinnäytetyön tarkoituksena on tutkia Aspen Plus -ohjelmiston soveltuvuutta Biotuotetekniikan tutkinto-ohjelman opintojaksolle. Tällä hetkellä prosessisimulointia opetetaan vain yhdellä opintojaksolla, joten työssä tutkitaan mahdollisuuksia laajentaa prosessisimuloinnin opetusta. Tutkimus on suoritettu erilaisilla harjoitustehtävillä, joita on toteutettu tässä työssä Aspen Plus -ohjelmistolla. Tehtäviä on valittu Tehdassuunnittelu ja prosessien mallintaminen -opintojaksolta, sekä Neea Hasan "CHEMCAD-simulointiohjelmiston hyödyntäminen" -opinnäytetyössä laadituista tehtävistä. Harjoitustehtävillä on tarkoitus opettaa Aspen Plus -ohjelmiston käyttöä, mutta samalla se toimii teoria opintojen tukena.

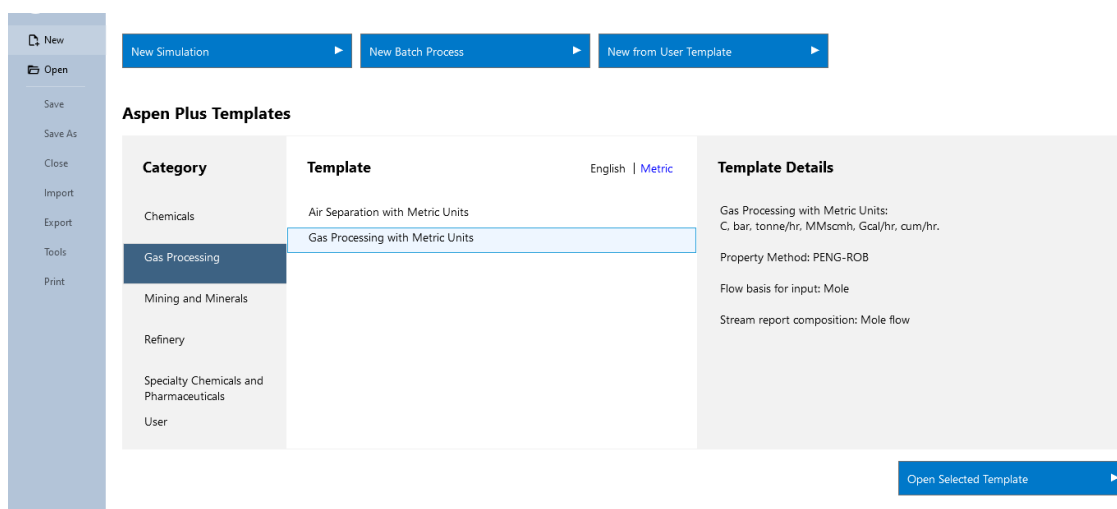
Opinnäytetyön kokeellinen osuus on suoritettu Tampereen teknillisellä yliopistolla. Harjoitustehtävät on pyritty valitsemaan niin että kolme tehtävää olisi Tehdassuunnittelu ja prosessien mallintaminen -opintojaksolle ja kaksi tehtävää Aineensiirto ja kemialliset yksikköprosessit -opintojaksolle. Lisäksi työssä tutkitaan Aspen Plus -ohjelmiston soveltuvuutta muillekin opintojaksolle kuten Prosessitekniikan laboratorio työt -opintojaksolle. Seuraavassa osiossa esitellään harjoitustehtävät, joiden avulla opastetaan Aspen Plus -ohjelmiston käyttöä ja tuodaan esille ohjelmiston erilaisia toimintoja.

4 ASPEN PLUS HARJOITUSTEHTÄVÄT

4.1 Isobutaanin polttaminen vajaalla ilmamäärällä

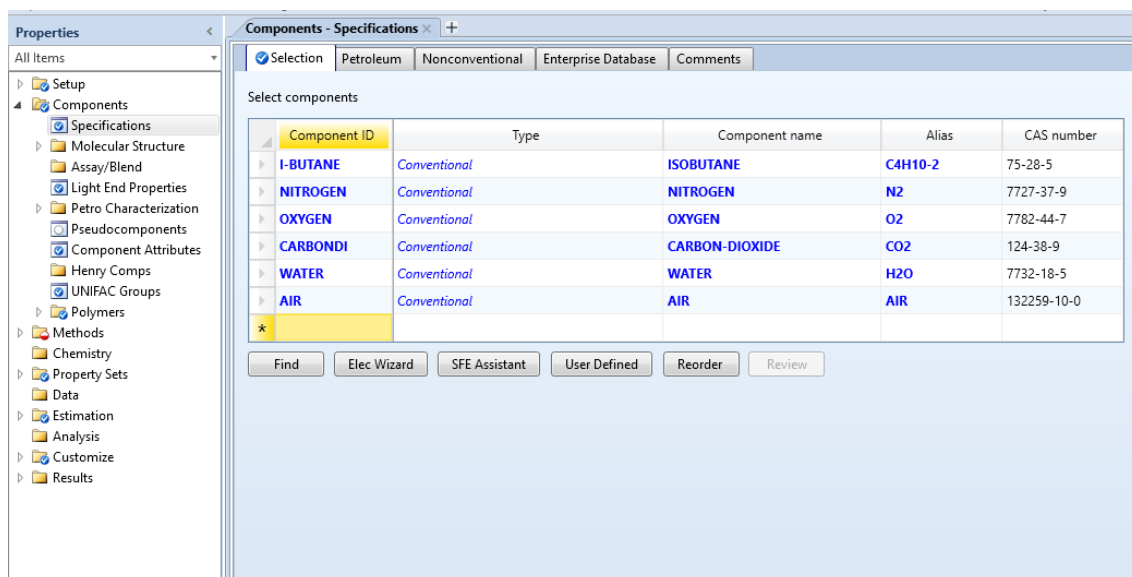
Isobutaanin polttaminen -tehtävässä tutustutaan Aspen Plusin avulla palamisreaktioon ja reaktortyyppin valintaan. Tehtävä on käytössä tehdassuunnittelu ja prosessien mallintamisen opintojaksolla. Tässä tehtävässä I-butaania poltetaan reaktorissa siten, että poistuvan kaasuseoksen lämpötila on 1300°C. Tehtävässä oletetaan ilman koostumuksen olevan 21 til-% O₂ eli happea ja 79 til-% N₂ eli typpeä. Tehtävässä olisi tarkoitus selvittää kuinka suuri on hapen ainevirta reaktoriin. (Rättyä, 2022)

Ensin valitaan simuloinnille sopiva malli. Tässä tapauksessa voidaan mallina käyttää kaasuprosessia metrisillä yksiköillä kuvassa 6.



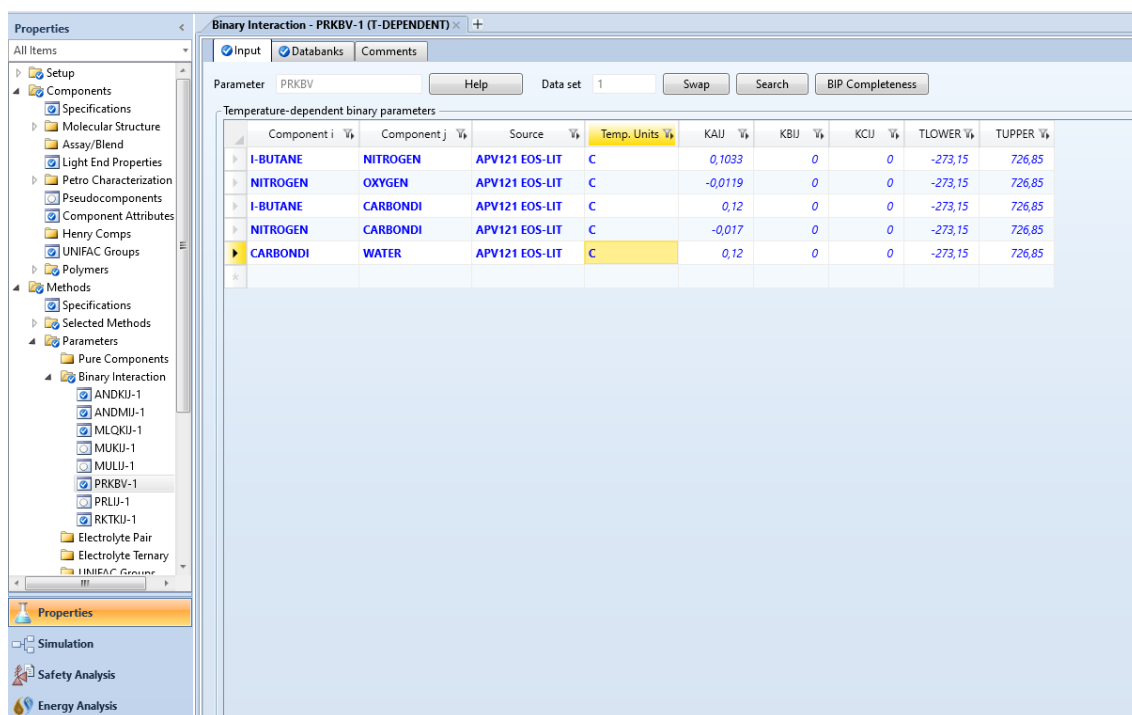
KUVA 6. Isobutaanin polttaminen simulointimalli (Liite 1)

Seuraavaksi valitaan kaikki komponentit, joita käytetään simuloinnissa kuvassa 7. Komponentteja pystyy hakemaan nimellä, kemiallisella kaavalla tai cas-numerolla. Helpoiten tämä onnistuu, kun kirjoitetaan halutun komponentin nimi ja painetaan Enter-näppäintä. Tällöin ohjelma antaa kyseisestä komponentista tiedot automaattisesti, joista voidaan varmistaa, että valittuna on oikea komponentti. Komponentit täytyy myös nimetä, ennen kuin ominaisuudet-osuutta jatketaan. Jatketaan painamalla Next. Mikäli jokin olennainen tieto puuttuu, ohjelma ilmoittaa sen ja palaa edelliseen osioon.



KUVA 7. Isobutaanin polttaminen -tehtävässä käytettävät komponentit (Liite 1)

Seuraavassa osiossa komponenteille määritetään lämpötilayksiköt kuvassa 8. Käytetään lämpötilayksikköinä celsiusta.



KUVA 8. Yksiköt komponenteille (Liite 1)

Viimeistellään ominaisuudet-osuus painamalla Next ja ajetaan property analysis painamalla ok kuvassa 9.

Binary Interaction - PRKBV-1 (T-DEPENDENT)

Parameter: PRKBV Help Data set: 1 Swap Search BIP Completeness

Temperature-dependent binary parameters

Component i	Component j	Source	Temp. Units	KAIJ	KBIJ	KCIJ	TLOWER	TUPPER
I-BUTANE	NITROGEN	APV121 EOS-LIT	C	0,1033	0	0	-273,15	726,85
NITROGEN	OXYGEN	APV121 EOS-LIT	C	-0,0119	0	0	-273,15	726,85
I-BUTANE	CARBONDI	APV121 EOS-LIT	C	0,12	0	0	-273,15	726,85
NITROGEN	CARBONDI	APV121 EOS-LIT	C	-0,017	0	0	-273,15	726,85
CARBONDI	WATER	APV121 EOS-LIT	C	0,12	0	0	-273,15	726,85

Properties Input Complete

Next step:

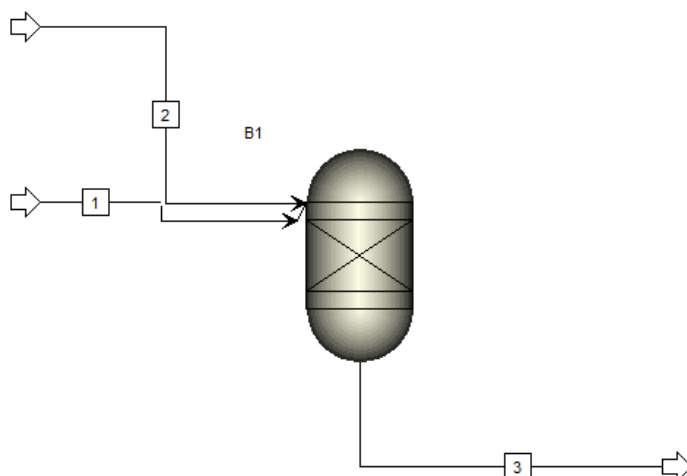
- Run Property Analysis / Setup
- Modify required property specifications
- Enter property parameters
- Enter experimental data
- Go to Simulation environment

OK Cancel

Don't show this message again

KUVA 9. Run Property Analysis (Liite 1)

Kun ominaisuudet-osuus ja property analysis on suoritettu, voidaan siirtyä simulointiosioon. Luodaan kuvion 2 mukainen prosessikaavio. Prosessikaavion luomisen voi tehdä halutussa järjestyksessä. Valitaan ensimmäiseksi tehtävään sopiva reaktori. Käytetään yksinkertaistettua stoikiometristä reaktoria.



KUVIO 2. Isobutaanin polttaminen prosessikaavio (Liite 1)

Kun prosessikaavio on valmis, voidaan määrittää syötevirrat sekä reaktorin tiedot. Olennaista on tietää tehtävän kaikki lähtötiedot, jotka on esitetty liitteessä 1. Lähtötietojen perusteella saadaan määritettyä oikeat syötevirrat, joihin sisältyy

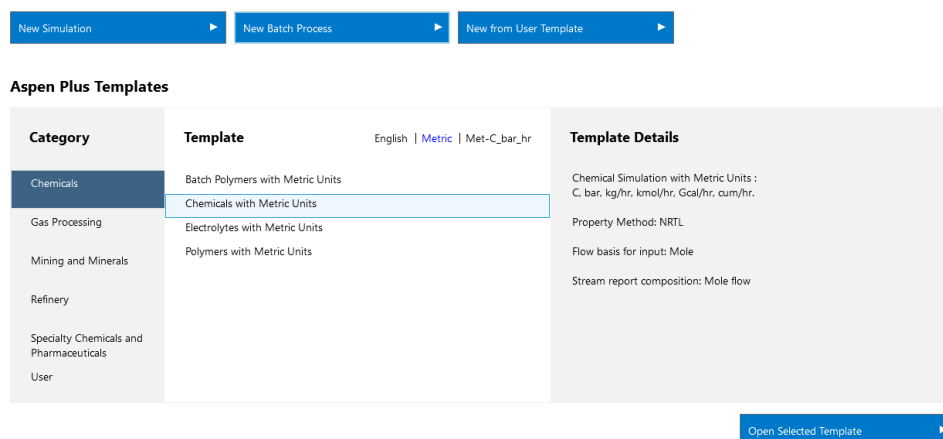
komponentit, määrät, lämpötilat ja paineet. Reaktoriin syötettävissä tiedoissa keskitytään reaktioyhtälön tasapainottamiseen, joka suoritetaan stoikiometrisillä kertoimilla. Täten ohjelmalle kerrotaan mitä reaktiossa syntyy ja mitä kulutetaan. Aihetta käsitellään biotuotetekniikan tutkinto-ohjelman aiemmilla opintojaksoilla, ennen tehdassuunnittelu ja prosessien mallintamisen -opintojaksoa. Tehtävän loppuun suorittaminen ja tulokset on esitetty liitteessä 1.

4.2 Hiilivetyseoksen tislaus

Hiilivetyseoksen tislaus on toinen tehtävistä, joka on mukana tehdassuunnittelu ja prosessien mallintamisen opintojaksolla. Tehtävässä hiilivetyseos tislataan kahteen jakeeseen tisleeksi ja pohjatuotteeksi. (Rättyä 2022) Liitteessä 2 on kuvattu tehtävän lähtötiedot.

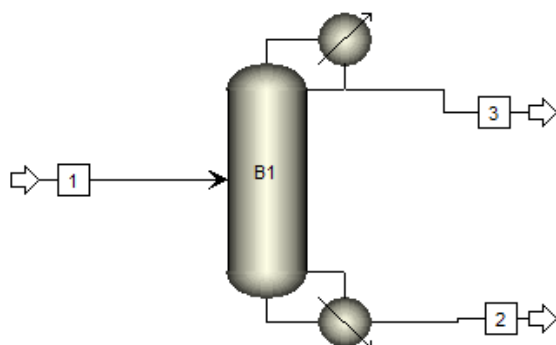
Tehtävässä on tarkoitus tutustua Aspen Plusin -ohjelmiston kolonnin määritettäviin ominaisuuksiin. Näitä ovat esimerkiksi kolonnin paine, minimipohjaluku ja syöttöpohja. Näihin vaikuttaa olennaisesti kolonnin palautussuhde r/r_{\min} eli reflux ratio. Tehtävänannossa on ilmoitettu kolonniin syöte, sekä mitä pitäisi jäädä tisleeseen ja mitä pohjatuotteeseen. Näiden tietojen avulla saadaan määritettyä tarvittavat ominaisuudet kolonnille.

Tehtävä voidaan aloittaa valitsemalla sitä kuvaava malli. Tässä tapauksessa voidaan käyttää kategoriana kemikaaleja metrisillä yksiköillä kuvassa 10.



KUVA 10. Hiilivetyseoksen tislaus simulointimalli. (Liite 2)

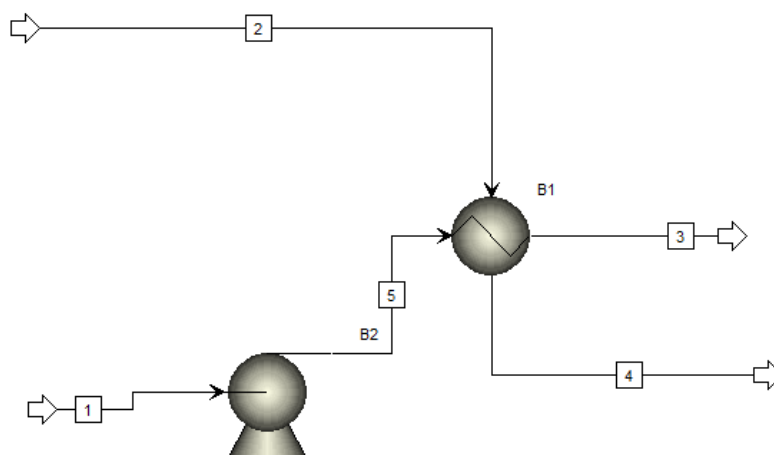
Vastaavasti kuten edellisessä tehtävässä, voidaan kerätä simulointia varten tarvittavat komponentit ja suorittaa ominaisuudet-osio. Tehtävässä vaaditaan tarkkuutta ja tehtävänannon huolellista läpikäyntiä. Kuvion 3 prosessikaaviossa on esitettynä tehtävässä käytetty kolonni.



KUVIO 3. Hiilivetyseoksen tislauksen prosessikaavio (Liite 2)

4.3 Lämmönvaihtimen mitoitus

Lämmönvaihtimen mitoitus -tehtävä on alun perin CHEMCAD Basic workshop-työpajan tarjonnasta, jota on aikaisemmin tutkinut Hasa opinnäytetyössään CHEMCAD-simulointiohjelmiston hyödyntäminen (Hasa 2021, 15). Tämän tehtävän tarkoituksena on tutkia vastaavan lämmönvaihtimen mitoittamista Aspen Plus -ohjelmistolla. Tässä työssä päästään jo haastavampaan prosessikaavioon kuviossa 4, jossa on viisi virtausta, pumppu sekä lämmönvaihdin.

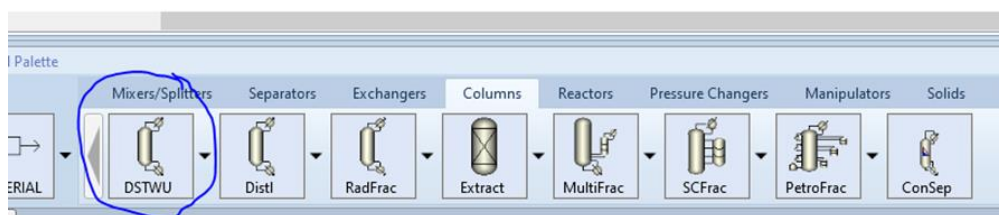
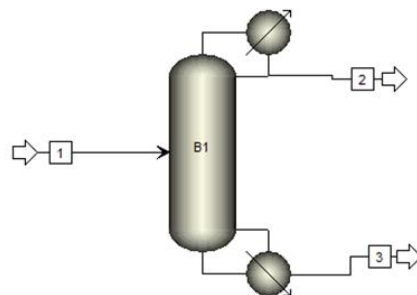


KUVIO 4. Lämmönvaihtimen mitoitus prosessikaavio (Liite 3)

Koska tehtävässä on useampia virtauksia sekä laitteita, se on huomattavasti monivaiheisempi kuin edelliset tehtävät. Lämmönvaihtimen mitoitus -tehtävässä on tarkoituksena tutkia vaadittua lämpötehoa, jolla saataisiin 50 000 kg/h heptaanin prosessivirta 20°C lämmitettyä 80°C (Nor-par, n.d, 15). Tuloksissa voidaan myös tutkia virtauksia sekä muita suureita.

4.4 Shortcut-kolonnin mitoitus

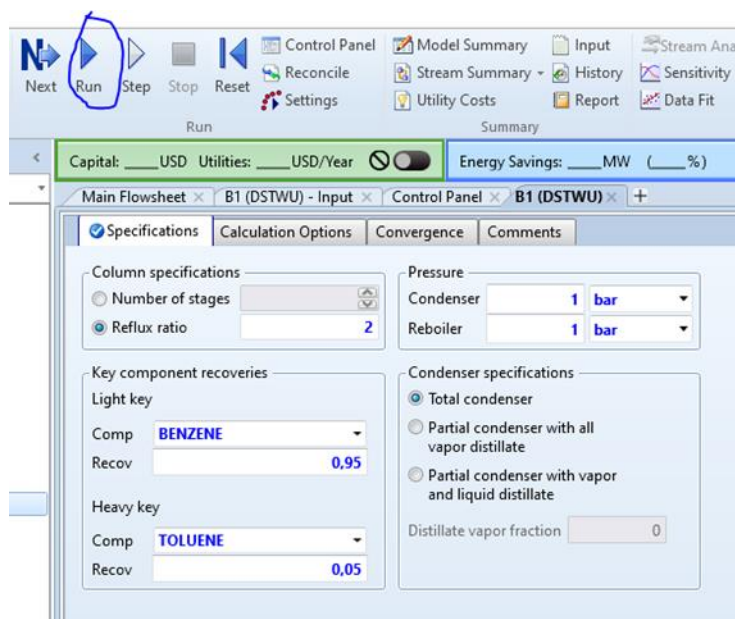
Shortcut-kolonnein mitoitus on toinen tehtävistä, jota on suunniteltu otettavaksi käyttöön Aineensiirto ja kemialliset yksikköprosessit -opintojaksolle. Se on myös toinen tehtävistä, jota Neea Hasa on tutkinut opinnäytetyössään. (Hasa 2021, 19.) Tehtävässä tutkitaan shortcut-kolonnin avulla pohjaluvun ja palautussuhteen välistä yhteyttä Aspen Plussalla. Tehtävässä tuodaan myös esille ohjelman uusia toimintoja, joita voidaan hyödyntää myös muissa tehtävissä. Kuvassa 11 on valittuna simulointiosiossa tehtävässä käytetty shortcut-kolonnein.



KUVA 11. Shortcut-kolonnein (Liite 4)

Kolonnein syötetään bentseeniä 50 mol-% ja tolueniä 50 mol-% 20 °C lämpötilassa ja 1 bar paineessa. r/r_{\min} -arvona käytetään esimerkkinä 2. Tehtävänannossa mainitaan tisleen bentseenin mooliosuuden olevan 0,95, joka on olennai-

nen tieto kolonnin määrittämissä kuvassa 12. Simulointi voidaan jo tässä vaiheessa suorittaa Run toiminnolla. Kuvassa 13 on esitetty ensimmäiset tulokset.

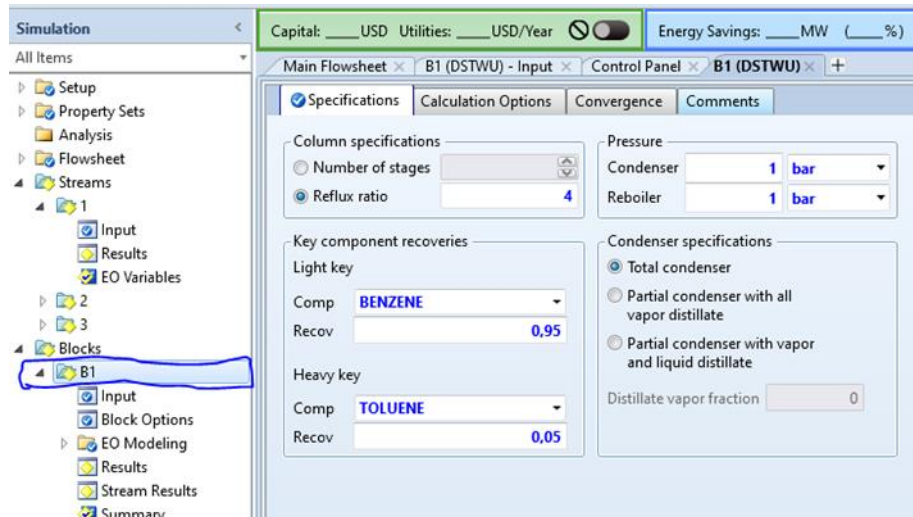


KUVA 12. Shortcut-kolonnin arvot (Liite 4)

DSTWU	
Name	B1
Property method	NRTL
Henry's component list ID	
Electrolyte chemistry ID	
Use true species approach for electrolytes	YES
Free-water phase properties method	STEAM-TA
Water solubility method	3
Number of stages	
Reflux ratio	2
Light key component recovery	0,95
Heavy key component recovery	0,05
Distillate vapor fraction	0
Minimum reflux ratio	0,951548
Actual reflux ratio	2
Minimum number of stages	6,62064
Number of actual stage	9,96196
Feed stage	5,83151
Number of actual stage above feed	4,83151
Distillate temperature [C]	80,7019
Bottom temperature [C]	107,956
Distillate to feed fraction	0,5
Total feed stream CO2e flow [kg/hr]	0

KUVA 13. Tulokset ensimmäisestä ajosta (Liite 4)

Kun simulointi on suoritettu ja tulokset ovat saatavilla, voidaan edellisiä tietoja muuttaa All Items ikkunasta kuvassa 14. Kolonniin voidaan muuttaa palautussuhdetta tai vastaavasti määrittää pohjien lukumäärä, jolloin saadaan tarkka palautussuhde. Tämän jälkeen voidaan simulointi ajaa uudestaan Run toiminnolla. Kuvassa 15 on toisen ajon jälkeiset tulokset.



Kuva 14. Kolonnin tietojen muuttaminen (Liite 4)

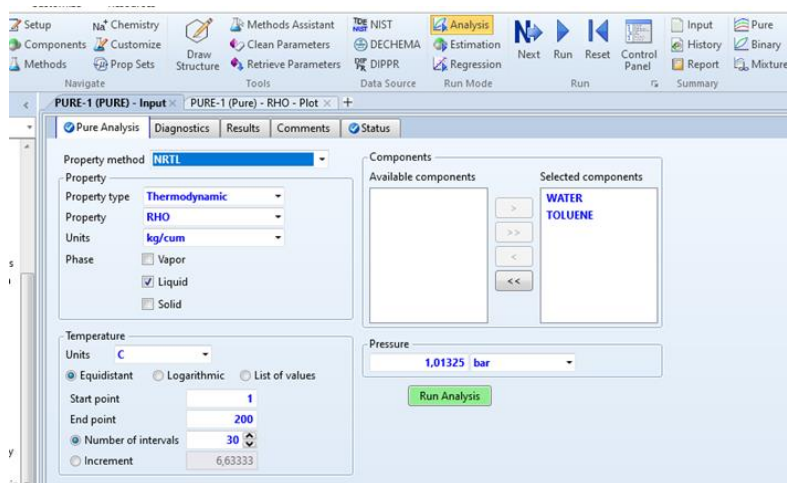
DSTWU	
Name	B1
Property method	NRTL
Henry's component list ID	
Electrolyte chemistry ID	
Use true species approach for electrolytes	YES
Free-water phase properties method	STEAM-TA
Water solubility method	3
Number of stages	
Reflux ratio	4
Light key component recovery	0,95
Heavy key component recovery	0,05
Distillate vapor fraction	0
Minimum reflux ratio	0,951548
Actual reflux ratio	4
Minimum number of stages	6,62064
Number of actual stage	8,18785
Feed stage	4,97107
Number of actual stage above feed	3,97107
Distillate temperature [C]	80,7019
Bottom temperature [C]	107,956
Distillate to feed fraction	0,5
Total feed stream CO2e flow [kg/hr]	0

KUVA 15. Tulokset toisesta ajosta (Liite 4)

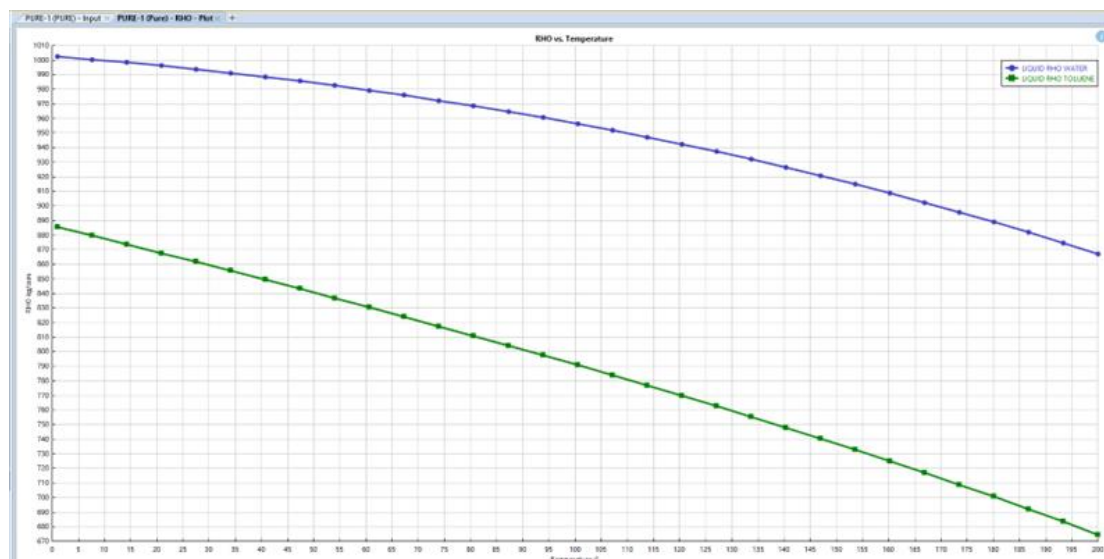
Tuloksista nähdään palautussuhde, tasojen määrä ja syöttöpohja. Tuloksista voidaan myös havaita, että palautussuhteen kasvaessa tasojen määrä vähenee.

4.5 Aineiden ominaisuudet

Aineiden ominaisuudet -tehtävässä tutkitaan Aspen Plus -ohjelmistolla, kuinka voidaan kerätä aineista tietoa ja piirtää kuvaajia. Tehtävässä käytetään aineina vettä ja tolueenia. Kuvassa 16 on esiteltyä Pure Analysis osio, jossa voidaan valita metodeja, yksiköitä ja mitä ominaisuuksia aineista halutaan tutkia. Näillä määrittäyksillä voidaan piirtää kuvaajaan veden ja tolueenin tiheys lämpötilan funktiona kuvassa 17. Kuvaaja saadaan piirrettyä Run Analysis toiminnolla kuvassa 16.



KUVA 16. Pure Analysis osio (Liite 5)



KUVA 17. Kuvaaja veden ja tolueenin tiheys lämpötilan funktiona (Liite 5)

5 ASPEN PLUS-OHJELMISTON HYÖDYNTÄMISMAHDOLLISUUDET

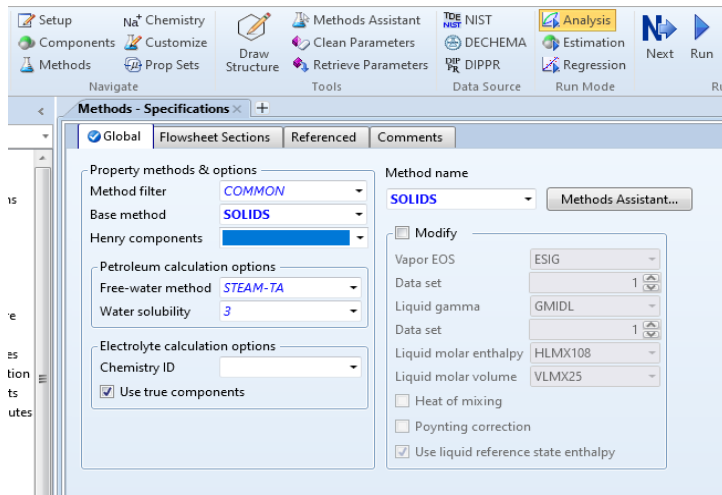
5.1 Aspen Plus -ohjelmiston hyödyntämismahdollisuudet

Opinnäytetyössä on tähän mennessä tutkittu Aspen Plus -ohjelmiston soveltuvuutta Tehdassuunnittelu ja prosessien mallintaminen -opintojaksolle, sekä Ai-neensiirto ja kemialliset yksikköprosessit -opintojaksolle. Aspen Plus -ohjelmalla on mahdollista simuloida suuria prosesseja hyvinkin tarkasti ja opinnäytetyössä on esitelty useita malleja lukuisille prosesseille Aspen Plus -ohjelmiston käyttöön-otto-osiossa. Simulointitehtäviä voidaan kehittää muillekin opintojaksoille ja tämä mahdollistaa hyvän jatkokehitystyön tulevaisuudessa.

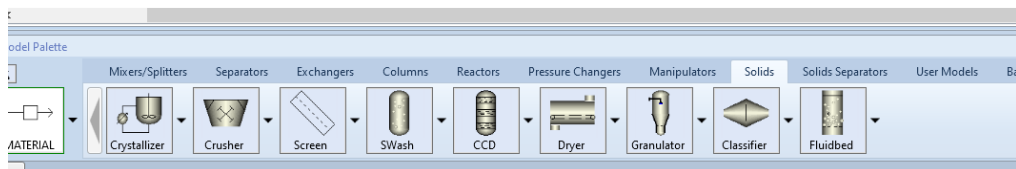
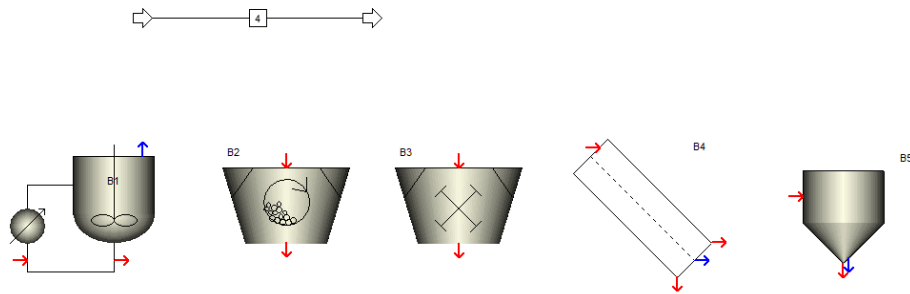
Tässä osiossa on esiteltynä mahdollisuuksia kiintoaineprosessien simuloinneille, joita voitaisiin hyödyntää esimerkiksi prosessitekniikan laboratoriotyöt -opintojak-solla. Lisäksi tutkitaan lyhyesti kumeenin valmistusprosessin simulointimahdolli-suutta Aspen Plus -ohjelmistolla.

5.2 Kiintoaineprosessien simulointi

Aspen Plus -ohjelmistosta löytyy kiintoaineprosesseille oma simulointimalli. Ku-vassa 18 on esitettyä toimiva metodi kiintoaineille. Tarkoituksena ei ole tehdä valmista simulointia, vaan esittää kuinka niitä voitaisiin tehdä ja mitä mahdolli-suuksia Aspen Plus tarjoaa. Kuvassa 19 on esitetty useita kiintoaineiden yksik-köoperaatioita, kuten kiteytin (B1), kuulamyly (B2), vasaramyly (B3), seula (B4) ja sekoitin (B5).



KUVA 18. Metodi kiintoaineille (Huovila 2023)



KUVA 19. Kiintoaineprosessien yksikköoperaatioita (Huovila 2023)

5.3 Kumeeniprosessi

Aspen Plus -ohjelmiston käyttöönotto-osiossa on esitetty kuviossa 1 prosessikaavio kumeenin valmistusprosessista. Prosessikaavioon on kerätty simulointia varten tarvittavat laitteet, mutta sitä ei ole ehditty tutkimaan tässä työssä tarkemmin. Voidaan kuitenkin todeta, että Aspen Plussalla kumeenin valmistusprosessin simulointi on mahdollista, sillä sen suurimpana laitteena on tislauskolonni. Tislauskolonneja on käsitelty harjoitustehtävät-osiossa. Näin ollen tämäkin mahdollistaisi jatkokehitystyön.

6 POHDINTA

Opinnäytetyön tuloksena viisi CHEMCAD-tehtävää toteutettiin Aspen Plus -ohjelmistolla. Kolme näistä harjoitustehtävistä on suunniteltu Tehdassuunnittelu ja prosessien mallintaminen -opintojaksolle ja kaksi Aineensiirto ja kemialliset yksikköprosessit -opintojaksolle. Tämä ei kuitenkaan tarkoita sitä, että tehtäviä tulisi käyttää vain näillä opintojaksoilla. Tehtävien monipuolisuus mahdollistaa niiden soveltuvuuden muillekin opintojaksoille. Työn kokeellisen osuuden perusteella, Aspen Plus -ohjelmisto soveltuisi hyvin opetuskäyttöön. Sillä on kattava tietopankki lukuisista prosesseista sekä aineista. Aspen Plus -ohjelmiston suurimpia hyötyjä opetuskäytössä on sen käyttäjäystävällisyys. Lisäksi ohjelmiston avulla tuetaan teorian ja käytännön prosessien välistä yhteyttä.

Opinnäytetyötä jouduttiin rajaamaan useamman kerran, jotta siitä saatiin johdonmukainen. Ajan puutteen vuoksi työssä ei tutkittu täysin uusia simuloitavia prosesseja, mutta työssä on tarkasteltu Aspen Plus -ohjelmiston jatkokehitysmahdollisuuksia. Prosessitekniikan laboratoriotyöt -opintojaksolla tutkitaan esimerkiksi kiinteiden aineiden jauhamista kuulamylyllä. Työn kokeellisessa osuudessa on esitelty Aspen Plus -ohjelmiston ominaisuuksia liittyen kiintoaineprosessien simulointiin. Työssä tuotiin myös esille kumeeniprosessissa vaadittavaa laitteistoa, joka löytyy ohjelmistosta. Tuloksien myötä Tampereen ammattikorkeakoulun Biotuotetekniikan tutkinto-ohjelma saa hyvän mahdollisuuden hyödyntää nykyaikaista prosessisimulointiohjelmistoa opetuskäytössä.

LÄHTEET

AspenTech. 2023. Process Simulation Software. Verkkosivu. Viitattu 8.5.2023.
<https://www.aspentech.com/en/apm-resources/process-simulation-software>

Aspentech. 2023. Milestones and Innovations. Verkkosivu. Viitattu 9.5.2023.
<https://www.aspentech.com/en/about-aspentech/milestones-and-innovations>

Chemstations. 2020. Why CHEMCAD? Verkkosivu. Viitattu 9.5.2023.
<https://www.chemstations.com/>

Hasa, N. 2021. CHEMCAD-simulointiohjelmiston hyödyntäminen. Tampereen ammattikorkeakoulu. Opinnäytetyö.

Nor-Par a.s, n.d. CHEMCAD Basic Workshop: CHEMCAD TRAINING (BASIC LEVEL.) PDF-tiedosto. Rajoitettu saatavuus.

Rättyä, A. 2022. Tehdassuunnittelu ja prosessien mallintaminen: Simulointitehtävät. Tehdassuunnittelu ja prosessien mallintaminen-opintojakso. Luentomateriaalit Tampereen ammattikorkeakoulun sisäisessä koulutuksessa.

LIITTEET

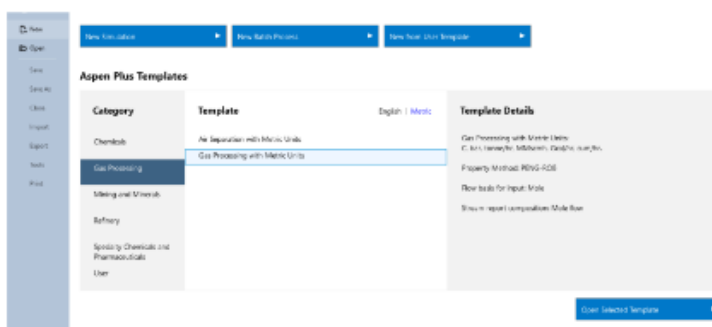
Liite 1. Isobutaanin polttaminen vajaalla ilmamäärällä

1 (5)

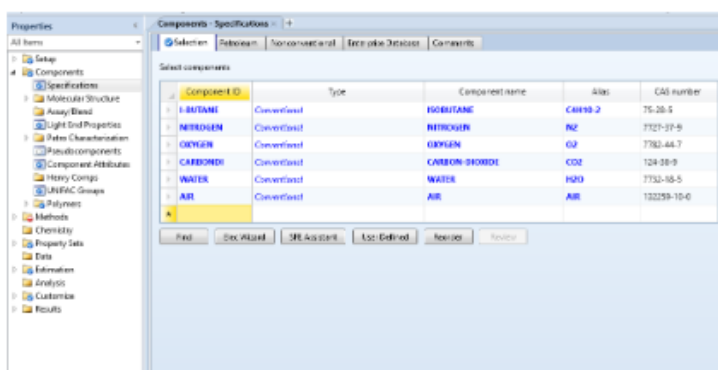
Isobutaanin polttaminen vajaalla ilmamäärällä

I-butaania poltetaan (REAC) vajaalla ilmalla siten, että reaktorista poistuvan kaasuseoksen lämpötila on 1300 °C. Ilman koostumuksen voidaan olettaa olevan 21 til-% O₂ ja 79 til-% N₂, ilman paine on 7 bar ja lämpötila 80 °C. I-butaani on kylläisenä höyrynä paineessa 2 bar. Poistokaasun lämpötila on 1300 °C. Kuinka suuri on hapen ainevirta (kmol/kmol butaania) reaktoriin?

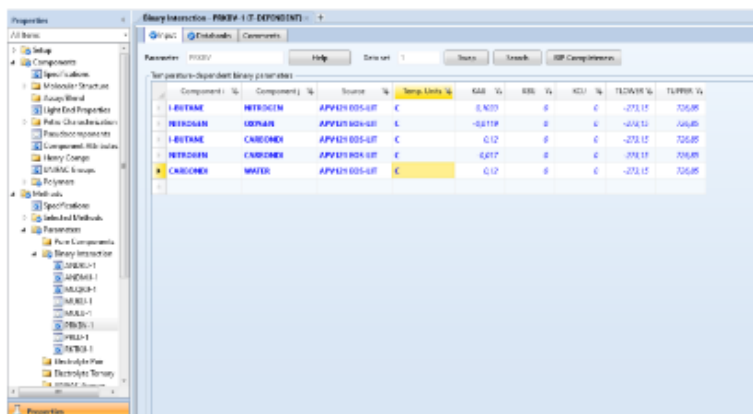
1. Valitaan simuloinnille malliksi kaasuprosessi metrisillä yksiköillä.



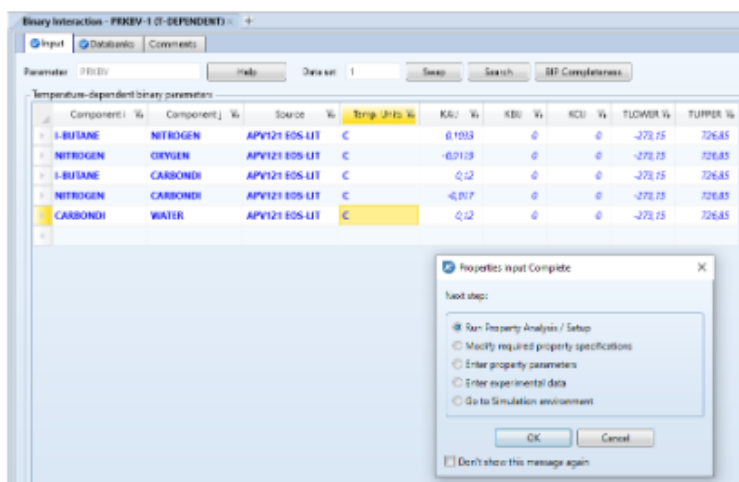
2. Valitaan tarvittavat komponentit ja edetään Next toiminnolla.



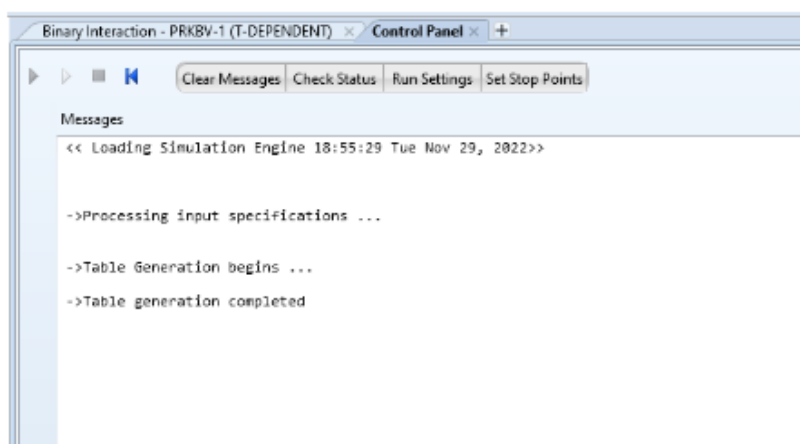
3. Määritetään komponenteille lämpötilayksiköt °C ja edetään Next toiminnolla.



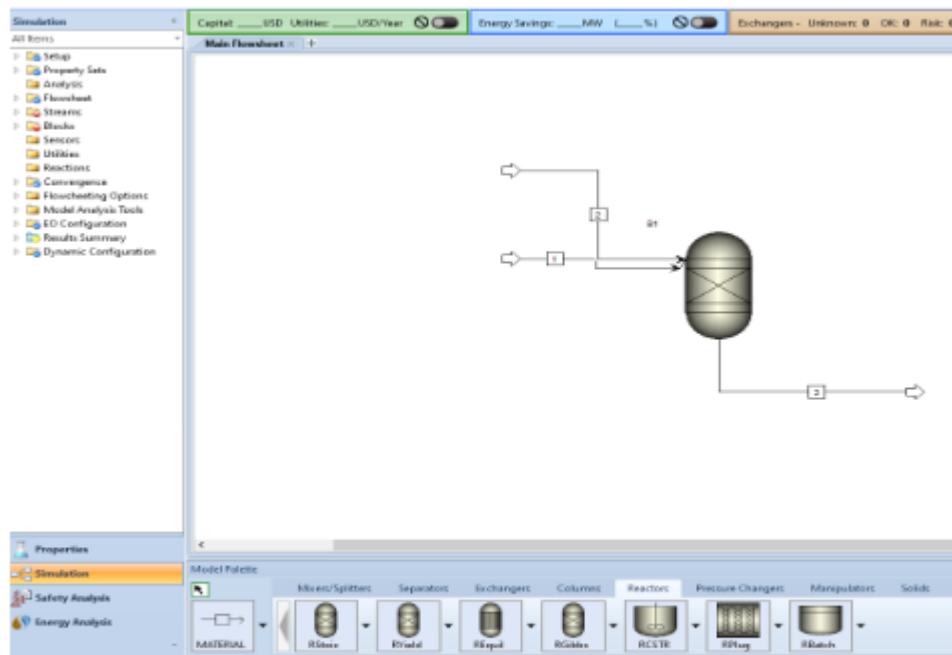
4. Suoritetaan Run Property Analysis.



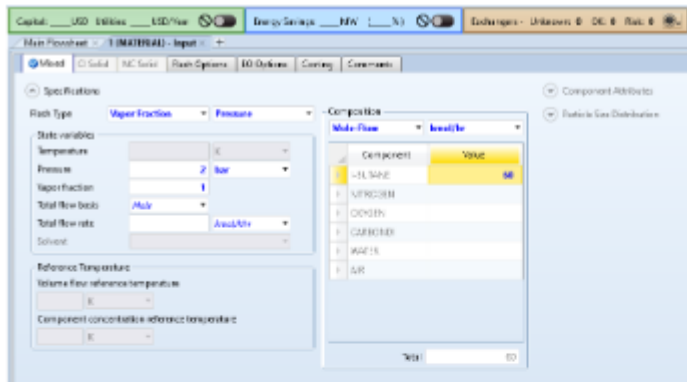
5. Kun Property Analysis on suoritettu, siirrytään simulointi osioon.



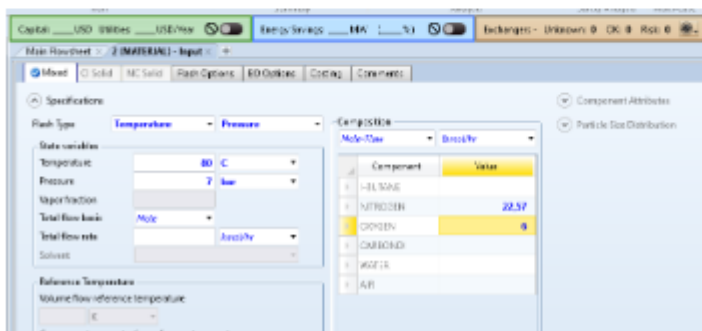
6. Luodaan prosessikaavio ja edetään Next toiminnolla.



7. Syötevirta 1. Annetaan isobutaanille esimerkiksi 60 kmol/hr.

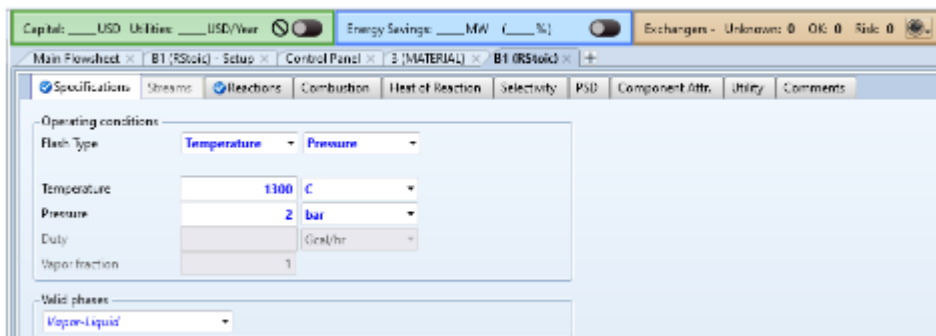


8. Syötevirta 2.

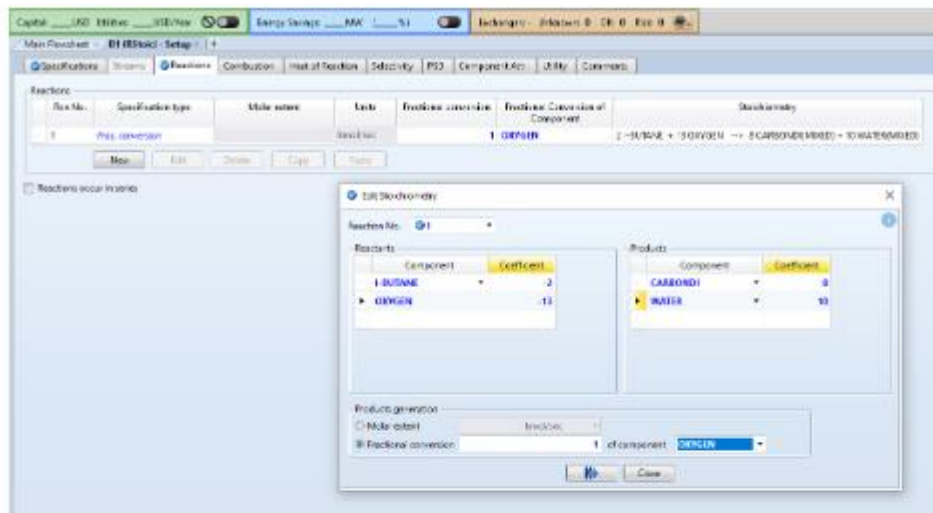


4 (5)

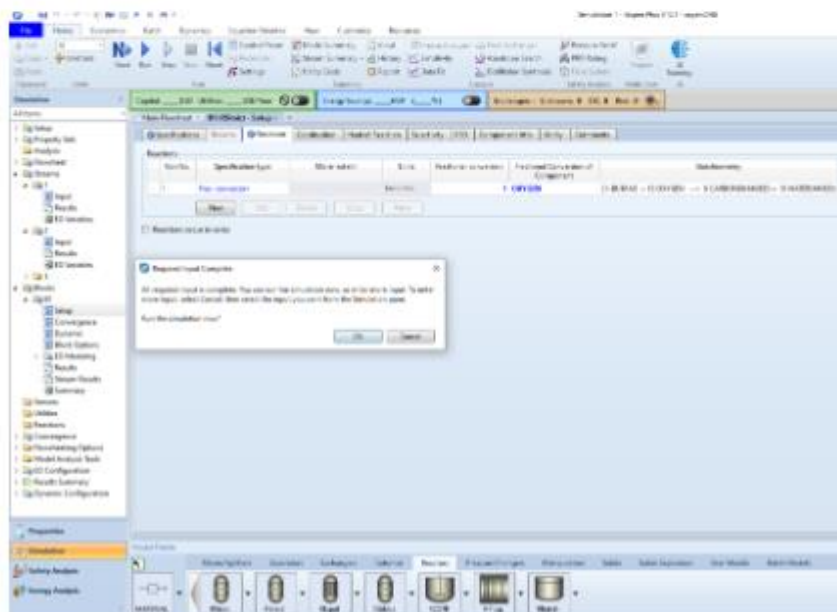
9. Reaktorin määrittäminen 1.



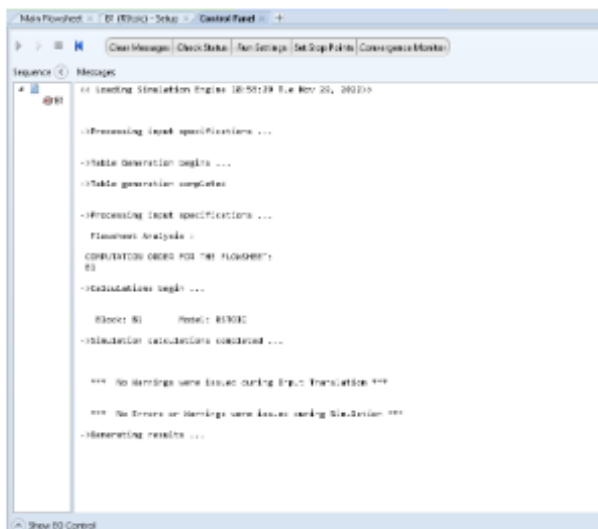
10. Reaktorin määrittäminen 2.



11. Suoritetaan simulointi.



12. Aspen Plus antaa raportin simuloinnista ja ilmoittaa hälytykset sekä virheet.



13. Tulokset.

Material	Heat	Load	Wt.% Curves	Wt.% Curves	Petroleum	Polymers	Solids
	Units						
Phase					Vapor Phase	Vapor Phase	Vapor Phase
Temperature	C	7,28007			80		1300
Pressure	bar	2			7		2
Molar Vapor Fraction		1			1		1
Molar Liquid Fraction		0			0		0
Molar Solid Fraction		0			0		0
Mass Vapor Fraction		1			1		1
Mass Liquid Fraction		0			0		0
Mass Solid Fraction		0			0		0
Molar Enthalpy	cal/mol	-32,7545			0,374052		17,5414
Mass Enthalpy	cal/kg	-563,19			12,086		365,069
Molar Entropy	cal/mol-K	-93,507			-1,0006		-6,87064
Mass Entropy	cal/gm-K	-1,61565			-0,057559		-0,14351
Molar Density	cmol/cm	0,2974826			0,238564		0,0132796
Mass Density	g/cm	5,31734			6,88267		0,732372
Enthalpy Flow	Gcal/hr	-1,95407			0,0107038		1,37793
Average MW		58,1234			28,8504		47,9315
Mole Flows	kmol/hr	60			26,57		89,9346
Mole Fractions							
Mass Flows	kg/hr	3487,4			824,257		4311,66
Mass Fractions							
Volume Flow	cm ³ /hr	853,855			119,758		5887,25
Vapor Phase							

Liite 2. Hiilivetyseoksen tislauk

1 (3)

Rättyä, A. 2022. Tehdassuunnittelu ja prosessien mallintaminen: Simulointitehtävät. Tehdassuunnittelu ja prosessien mallintaminen-opintojako. Luentomateriaalit Tampereen ammattikorkeakoulun sisäisessä koulutuksessa. Kuvakaappaus taulukoista.

Hiilivetyseoksen tislauk

Hiilivetyseos (F) tislataan kahteen jakeeseen; D (distillate) ja B (bottom product). Alla olevassa taulukossa on esitetty kevyemmät hiilivedyt, jotka muodostavat tisleen ja raskaammat hiilivedyt, jotka muodostavat pohjatuotteen. n-C₄ ja i-C₅ ovat avainkomponentteja.

Component	Symbol	f _i mol/s	d _i mol/s	b _i mol/s
Methane	C ₁			
Ethane	C ₂			
Propane	C ₃			
i-Butane	i-C ₄			
n-Butane	n-C ₄	5		---
i-Pentane	i-C ₅	15		---
n-Pentane	n-C ₅	25	24	1
Hexane	C ₆	20	1	19
Heptanes Plus	C ₇₊	35	---	

Syöttö tulee 10 bar paineessa ja 20 °C lämpötilassa. Jäähdytysveden lämpötila on 25 °C, poistolämpötila korkeintaan 45 °C ja $\Delta T_{in} = n \cdot 15$ K. Tehtävässä on tarkoituksena määrittää kolonnista oleellisia tietoja, kuten paine ja minimi pohjaluku r/r_{min} :n ollessa 1,25.

1. Valitaan simuloinnille malliksi kaasuprosessi metrisillä yksiköillä.

New Simulation ▶ New Batch Process ▶ New from User Template ▶

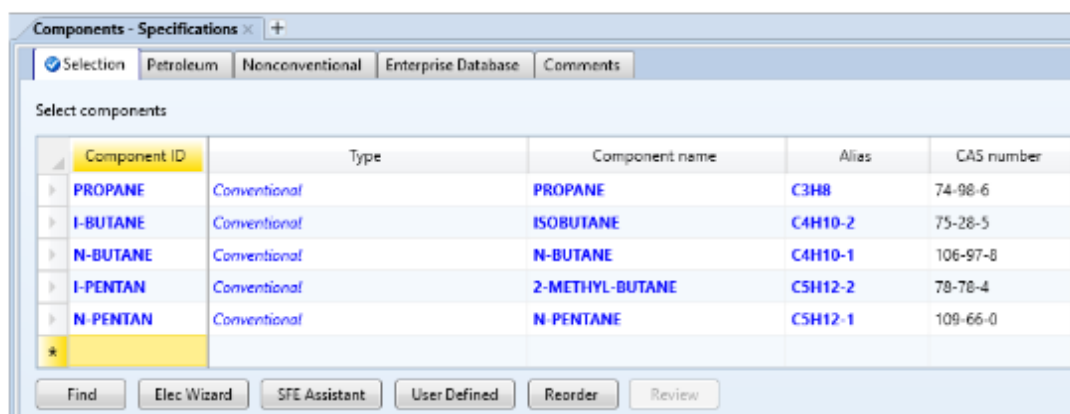
Aspen Plus Templates

Category	Template	English Metric Met-C_bar_hr	Template Details
Chemicals	Batch Polymers with Metric Units		Chemical Simulation with Metric Units : C, bar; kg/hr; kmol/hr; Gal/hr; cum/hr.
	Chemicals with Metric Units		Property Method: NRTL
Gas Processing	Electrolytes with Metric Units		Row basis for input: Mole
Mining and Minerals	Polymers with Metric Units		Stream report composition: Mole flow
Refinery			
Specialty Chemicals and Pharmaceuticals			
User			

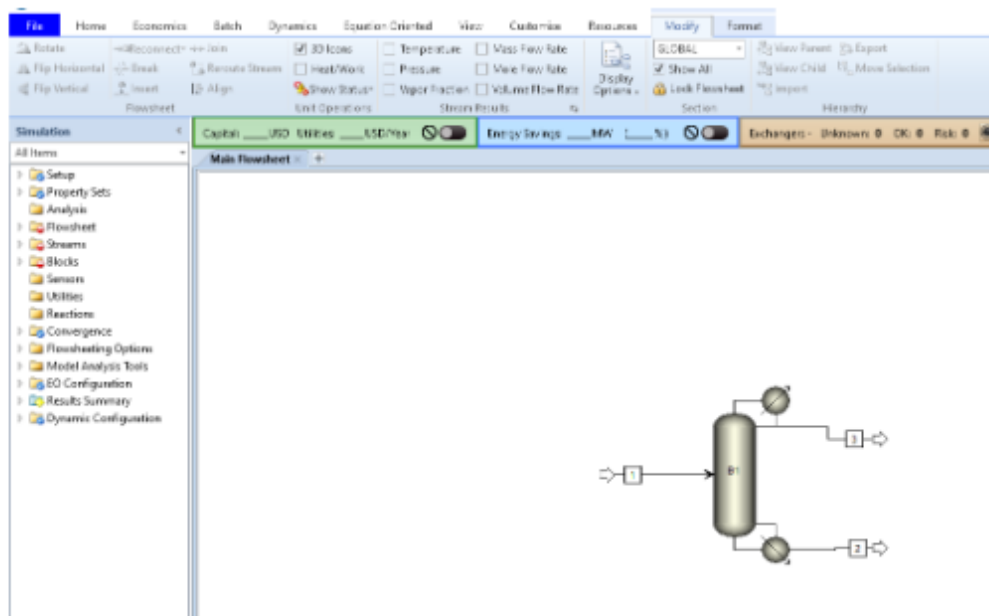
Open Selected Template ▶

2 (3)

2. Valitaan tarvittavat komponentit ja edetään Next toiminnolla.



3. Luodaan prosessikaavio ja edetään Next toiminnolla.



4. Määritetään syötevirran materiaalit

Main Flowsheet × 1 (MATERIAL) - Input × +

Mixed CI Solid NC Solid Flash Options EO Options Costing Comments

Specifications

Flash Type **Temperature** Pressure

State variables

Temperature C

Pressure bar

Vapor fraction

Total flow basis **Mole**

Total flow rate kmol/sec

Solvent

Reference Temperature

Volume flow reference temperature K

Component concentration reference temperature K

Composition

Mole-Flow mol/sec

Component	Value
PROPANE	5
I-BUTANE	15
N-BUTANE	25
I-PENTAN	20
N-PENTAN	35
Total	100

5. Määritetään syötevirran tiedot ja palautussuhde

Main Flowsheet × B1 (DSTWU) - Input × +

Specifications Calculation Options Convergence Comments

Column specifications

Number of stages

Reflux ratio

Pressure

Condenser bar

Reboiler bar

Key component recoveries

Light key

Comp **N-BUTANE**

Recov

Heavy key

Comp **I-PENTAN**

Recov

Condenser specifications

Total condenser

Partial condenser with all vapor distillate

Partial condenser with vapor and liquid distillate

Distillate vapor fraction

6. Tulokset.

Capital: ___ USD Utilities: ___ USD/Year Energy Savings: ___ MW (___%) Exchangers - Unknown: 0 OK: 0 Risk: 0

Main Flowsheet × B2 (DSTWU) - Input × Control Panel × B2 (DSTWU) - Results × +

Summary Balance Reflux Ratio Profile Status

▶ Minimum reflux ratio	0,750301	
▶ Actual reflux ratio	1,25	
▶ Minimum number of stages	6,76636	
▶ Number of actual stages	12,2076	
▶ Feed stage	6,75005	
▶ Number of actual stages above feed	5,75005	
▶ Reboiler heating required	2286,44	Gcal/hr
▶ Condenser cooling required	1771,98	Gcal/hr
▶ Distillate temperature	24,7084	C
▶ Bottom temperature	73,4481	C
▶ Distillate to feed fraction	0,452247	
▶ HETP		

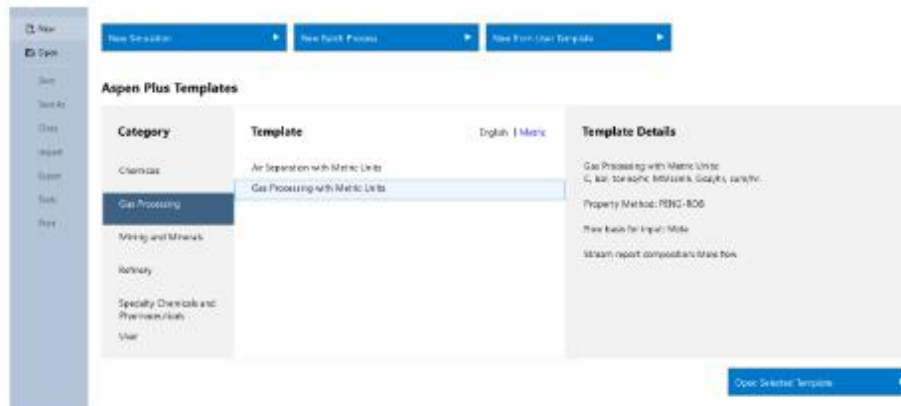
Liite 3. Lämmönvaihtimen mitoitus

1 (3)

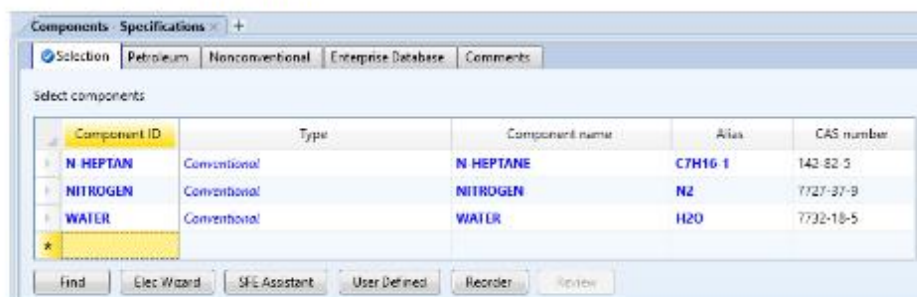
Lämmönvaihtimen suunnittelu

Suunnittele lämmönvaihdin lämmittämään prosessivirtaa, joka on 50 000 kg/h heptaania (jossa on vähän typpeä) 20 °C → 80 °C käyttäen tasalaatuista höyryä.

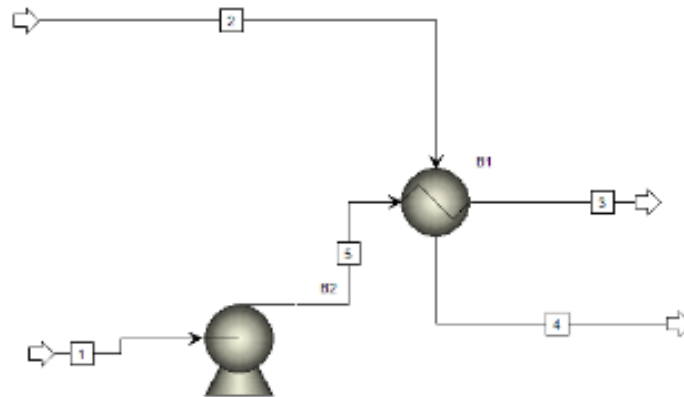
1. valitaan kaasuprosessi malliksi



2. Valitaan komponentit



3. Piirretään prosessikaavio.



4. Syötevirta 1.

Main Flowsheet × 1 (MATERIAL) × +

Mixed | CI Solid | NC Solid | Flash Options | EO Options | Coating | Comments

Specifications

Flash Type: Temperature - Pressure

State variables

Temperature: 20 C

Pressure: 1 bar

Vapor fraction: []

Total flow basis: Mole

Total flow rate: MMicmh

Solvent: []

Reference Temperature

Volume flow reference temperature: C

Component concentration reference temperature: C

Composition

Mass-Flow: kg/hr

Component	Value
N-HEPTAN	50000
NITROGEN	1
WATER	
Total	50001

5. Syötevirta 2.

Main Flowsheet - 2 (MATERIAL) - +

Specifications

Flash Type: **Pressure** - Vapor Fraction

Static variables

Temperature: C

Pressure: 7 bar

Vapor fraction: 1

Total flow basis: **Mole**

Total flow rate: MMol/hr

Solvent:

Reference Temperature

Volume flow reference temperature: C

Component concentration reference temperature: C

Composition

Mass-Flow: kg/hr

Component	Value
N-HEPTAN	
NITROGEN	
WATER	1
Total	1

6. Lämmönvaihtimen määrittys

Main Flowsheet - 3 (HeatX) - Setup - +

Specifications

Model fidelity: Shortcut Detailed

Hot fluid: Shell Tube

Shortcut flow direction: Countercurrent Cocurrent

Multipass, calculate number of shells

Multipass, shells in series: 1

Calculation mode: **Design**

Exchanger specification

Specification: **Hot stream outlet temperature**

Value: 10 C

Exchanger area: sqm

Constant UA: cal/hac-K

Minimum temperature approach: 1 C

7. Pumpun määrittys ja simuloinnin ajaminen

Capital: 920 Utilities: USD/Year Energy Savings: MW (%) Exchanges: Unknown OK Risk

Main Flowsheet - 3 (Pump) - Setup - +

Specifications

Model: Pump Turbine

Pump outlet specification

Discharge pressure: 4 bar

Pressure increase: bar

Pressure ratio:

Power required: kW

Use performance curve to determine discharge conditions

Efficiencies

Pump: 0.7 Drive:

Liite 4. Shortcut-kolonnin mitoitus

1 (4)

Shortcut-kolonneissa tehtävässä tutkitaan pohjaluvun ja palautussuhteen välistä yhteyttä. Kolonneihin syötetään 50 mol-% bentseeniä ja 50 mol-% tolueenia 20 °C lämpötilassa ja 1 bar paineessa. Tisleen bentseenin mooliosuuden halutaan olevan 0,95 ja r/r_{\min} -arvona käytetään 2. Suoritetaan simulointi annetuilla tiedoilla ja muutetaan palautussuhdetta.

1. Simulointimalli

Aspen Plus Templates

Category	Template	English Metric Met-C, bar, hr	Template Details
Chemicals	Batch Polymers with Metric Units		Chemical Simulation with Metric Units : C, bar, kg/hr, kmol/hr, Gal/hr, cum/hr Property Method: NRTL Row basis for input: Mole Stream report composition: Mole flow
	Chemicals with Metric Units		
Gas Processing	Electrolysis with Metric Units		
Mining and Minerals	Polymers with Metric Units		
Refinery			
Specialty Chemicals and Pharmaceuticals			
User			

Down Selected Template

2. Komponentit

Components - Specifications

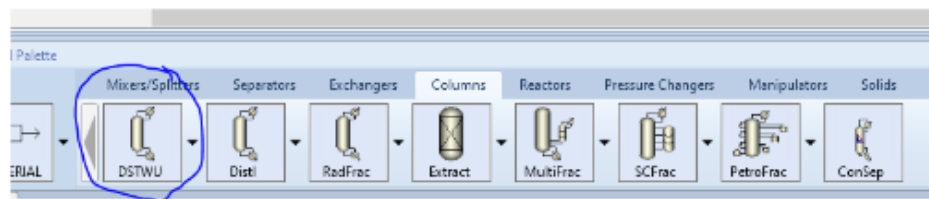
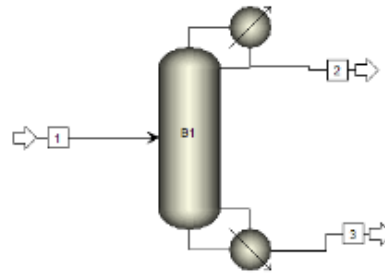
Selection | Petroleum | Nonconventional | Enterprise Database | Comments

Select components

Component ID	Type	Component name	Alias	CAS number
BENZENE	Conventional	BENZENE	C6H6	71-43-2
TOLUENE	Conventional	TOLUENE	C7H8	108-88-3

Find | Elec Wizard | SFE Assistant | User Defined | Recorder | Review

3. Käytetään simuloinnissa shortcut-kolonna



4. Syötevirta

Main Flowsheet x 1 (MATERIAL) - Input x +

Mixed CI Solid NC Solid Flash Options EO Options Costing Comments

Specifications

Flash type: Temperature Pressure

State variables

Temperature: 20 C

Pressure: 1 bar

Vapor fraction: []

Total flow basis: Mole

Total flow rate: [] kmol/hr

Solvent: []

Reference Temperature

Volume flow reference temperature: [] C

Component concentration reference temperature: [] C

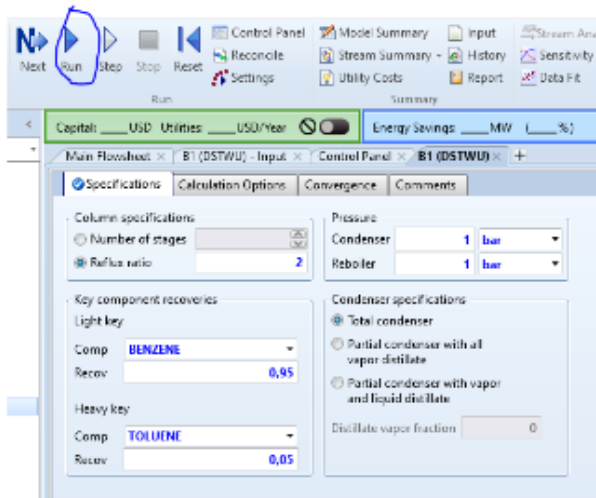
Composition

Mole-Flow mol/hr

Component	Value
BENZENE	50
TOLUENE	50

Total: 100

5. Valitaan kolonnille tehtävämukaiset arvot ja simulointi voidaan suorittaa Run komennolla



6. Tulokset ensimmäisestä ajosta

DSTWU	
Name	B1
Property method	NRTL
Henry's component list ID	
Electrolyte chemistry ID	
Use true species approach for electrolytes	YES
Free-water phase properties method	STEAM-TA
Water solubility method	3
Number of stages	
Reflux ratio	2
Light key component recovery	0,95
Heavy key component recovery	0,05
Distillate vapor fraction	0
Minimum reflux ratio	0,951340
Actual reflux ratio	2
Minimum number of stages	6,62064
Number of actual stage	9,96196
Feed stage	5,03151
Number of actual stage above feed	4,03151
Distillate temperature [C]	80,7019
Bottom temperature [C]	107,956
Distillate to feed fraction	0,5
Total feed stream CO2e flow [kg/hr]	0

7. Muutetaan palautussuhde 4

Simulation: Capital: USD, Utilization: USD/Year, Energy Savings: MW (%).

Main Flowsheet: B1 (DSTWU) - Input, Control Panel: B1 (DSTWU) × +

Specifications: Calculation Options, Convergence, Comments

Column specifications: Number of stages: 4, Reflux ratio: 4

Pressure: Condenser: 1 bar, Reboiler: 1 bar

Key component recoveries: Light key: Benzene, Recovery: 0.95; Heavy key: Toluene, Recovery: 0.05

Condenser specifications: Total condenser, Distillate vapor fraction: 0

8. Uudet tulokset

DSTWU	
Name	B1
Property method	NRTL
Henry's component list ID	
Electrolyte chemistry ID	
Use true species approach for electrolytes	YES
Free-water phase properties method	STEAM-TA
Water solubility method	3
Number of stages	
Reflux ratio	4
Light key component recovery	0,95
Heavy key component recovery	0,05
Distillate vapor fraction	0
Minimum reflux ratio	0,951548
Actual reflux ratio	4
Minimum number of stages	6,62064
Number of actual stage	8,18709
Feed stage	4,97107
Number of actual stage above feed	3,97107
Distillate temperature [C]	80,7019
Bottom temperature [C]	107,956
Distillate to feed fraction	0,5
Total feed stream CO ₂ e flow [kg/hr]	0

9. Muutetaan palautussuhde vielä 6 ja ajetaan viimeiset tulokset

DSTWU	
Name	B1
Property method	NRTL
Henry's component list ID	
Electrolyte chemistry ID	
Use true species approach for electrolytes	YES
Free-water phase properties method	STEAM-TA
Water solubility method	3
Number of stages	
Reflux ratio	6
Light key component recovery	0,95
Heavy key component recovery	0,05
Distillate vapor fraction	0
Minimum reflux ratio	0,951548
Actual reflux ratio	6
Minimum number of stages	6,62064
Number of actual stage	7,59877
Feed stage	4,68537
Number of actual stage above feed	3,68537
Distillate temperature [C]	80,7019
Bottom temperature [C]	107,956
Distillate to feed fraction	0,5
Total feed stream CO ₂ e flow [kg/hr]	0

Liite 5. Aineiden ominaisuudet

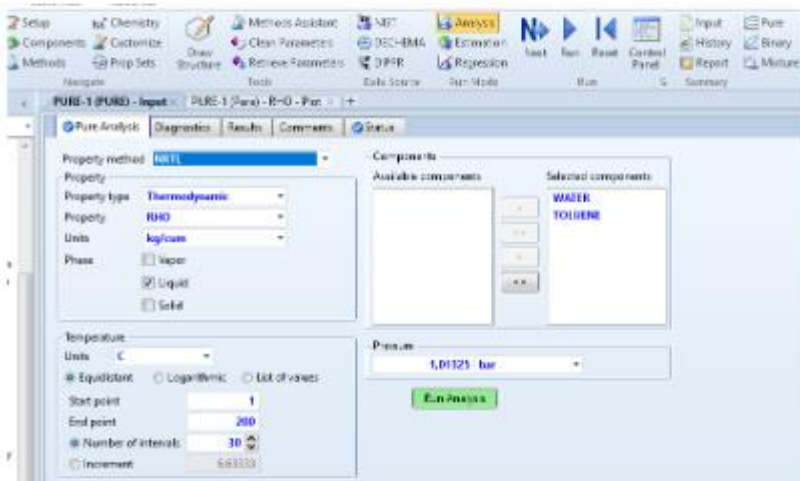
1 (1)

Aineiden ominaisuudet tehtävässä tutkitaan Aspen Plussalla, kuinka voidaan kerätä aineista tietoa ja piirtää kuvaaja. Tehtävässä käytetään aineina vettä ja tolueneita.

1. Valitaan komponentit



2. Siirrytään methods osioon ja käytetään kuvanmukaisia metodeja.



3. Piirretään kuvaaja Pure Analysis toiminnolla.

