



INSTYTUT CHEMICZNEJ
PRZERÓBKI WĘGLA



1955-2016

Modelowanie procesu
amoniakalnego
oczyszczania gazu
koksowniczego za pomocą
programu komputerowego
CHEMCAD

H.Fitko, T.Szczypiński

Plan prezentacji:

- Symulacja komputerowa
- Obliczenia symulacyjne
- Program komputerowy CHEMCAD
- Amoniakalna metoda oczyszczania gazu koksowniczego.
- Model symulacyjny metody amoniakalnej
- Przykładowe wyniki symulacji komputerowej

Symulacja komputerowa to badanie procesu przez eksperymentowanie z modelem komputerowym tego procesu, którego obliczenia imitują działanie systemu. Celem symulacji komputerowych jest zebranie danych o zachowaniu się systemu symulowanego, przy zmianie parametrów technologicznych zewnętrznych i wewnętrznych.

Symulacje komputerową stosuje się gdy:

- ▶ potrzebne jest badanie zachowania się nieistniejących systemów (np. projektowanych),
- ▶ badanie zachowania się istniejących systemów, na których przeprowadzenie rzeczywistych eksperymentów jest kosztowne i trudne lub wręcz niemożliwe ze względów technologicznych, pomiarowych,
- ▶ rozwiązanie analityczne równań opisujących model systemu jest trudne lub niemożliwe.

Typy obliczeń symulacyjnych

Wyróżnia się trzy typy obliczeń wykonywanych za pomocą symulatorów procesowych:

- ▶ **obliczenia symulacyjne** przeprowadza się w sytuacji gdy znane są założenia techniczne urządzeń, z których składa się instalacja oraz znane są stosowane surowce i otrzymywane produkty a celem symulacji jest uzgodnienie parametrów strumieni wewnętrznych (łączy i recykli) oraz strumieni zewnętrznych (surowce i produkty),
- ▶ **obliczenia projektujące** prowadzi się w celu optymalnego dobrania charakterystyk procesu. Ilość uzgodnionych strumieni musi w tym przypadku być większa niż w obliczeniach symulacyjnych,
- ▶ **obliczenia identyfikacyjne** prowadzi się w celu wyznaczenia nieznanymi indywidualnych parametrów dla określonej budowy i wielkości urządzenia. Parametrami tymi mogą być m.in. współczynniki wymiany ciepła.

Pakiet programów CHEMCAD firmy Chemstations Inc. (USA) należy do nowoczesnych programów stosowanych w Komputerowo Wspomaganej Inżynierii Procesowej



Moduły CHEMCADA

- ▶ **CC - STEADY STATE**, główny moduł CHEMCADA. Służy do projektowania, wyznaczania szybkości i optymalizacji procesów w warunkach równowagowych.
- ▶ **CC - DYNAMICS**, służy do projektowania i wyznaczania szybkości procesów zmiennych w czasie (dynamicznych). Moduł ten jest całkowicie zintegrowany z pozostałymi elementami CHEMCADA, co pozwala na łatwe przełączanie z warunków dynamicznych na równowagowe, i na odwrót.
- ▶ **CC - BATCH**, przeznaczony do projektowania, wyznaczania szybkości i optymalizacji kolumny destylacyjnej periodycznej.
- ▶ **CC - THERM**, do symulacji pojedynczych wymienników ciepła płaszczowych, płytowych i typu „rura w rurze”.
- ▶ **CC - SAFETY – NET**, służy do symulacji sieci przesyłowych (rur), systemów bezpieczeństwa pracujących zarówno w trybie równowagowym jak i dynamicznym.
- ▶ **CC- FLASH**, zawiera bazy danych fizykochemicznych substancji i równowag fazowych oraz pozwala na estymacje właściwości fizykochemicznych układów i ich regresje.

Zastosowanie symulatora

Symulator procesowy CHEMCAD można stosować zarówno w odniesieniu do nieskomplikowanych procesów nieciągłych jak i do wielkich chemicznych procesów technologicznych pracujących w sposób ciągły uwzględniających następujące operacje:

- destylacja/ekstrakcja (tryb ciągły i nieciągły),
- reakcje chemiczne (tryb ciągły i nieciągły),
- procesy elektrolityczne,
- obliczenia własności termicznych i fizycznych,
- obliczenia równowag para/ciecz /ciecz,
- skalowanie aparatury,
- wymiana ciepła,
- obliczenia dotyczące ochrony środowiska,
- analiza ryzyka (bezpieczeństwa),
- sporządzanie kosztorysów, wycena urządzeń i instalacji.

KOLUMNA ABSORPCYJNA

Parametry ogólne

SCDS Distillation Column -

General Specifications Convergence Cost Estimation 1 Cost Estimation 2

General Model Parameters ID: 5

Condenser type 0 Total or none

Subcooled delta T C

Top pressure kPa

Cond press drop kPa

Colm press drop kPa

Reflux pump press. kPa

Bottom pump press. kPa

No. of stages

Feed stages:

Feed stage for stream 89

Feed stage for stream 90

Feed stage for stream 92

Feed stage for stream 9

Simulation model
Regular VLE model
Regular VLE model
Packed column mass transfer
Tray column mass transfer

Check here for reactive Ambient Heat Transfer/HiDi

Heat transfer area/stage m²

Heat transfer coeff. (U) W/m²K

Ambient temperature C or HiDic Colm ID

Optional three phase control:

Use local three phase model

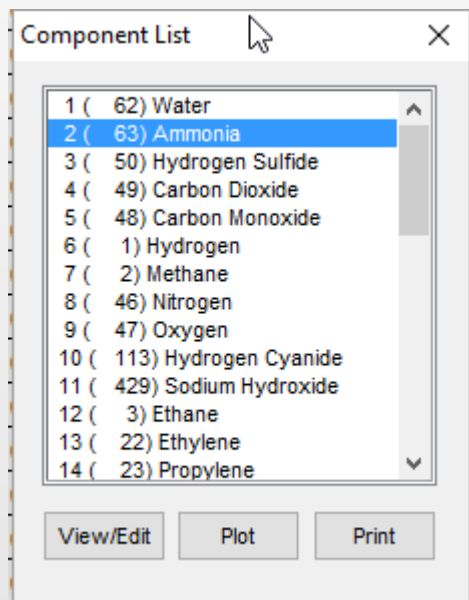
Three phase stage from

Three phase stage to

Help Cancel OK

KOLUMNA ABSORPCYJNA

Dane fizykochemiczne



- Basic Data -

Ammonia Component ID: 63

Molecular weight	17.031	
Critical T	132.5	C
Critical P	11278.5	kPa
Critical V	0.07247	m ³ /kmol
Acentric factor	0.252	
Normal boiling point	-33.43	C
Melting point	-77.74	C
Heat of Fusion	332.16	kJ/kg
Solubility parameter	29217	(J/m ³) ^{**0.5}
Dipole moment	4.9034e-030	C.m
Radius of Gyration	8.533e-011	m

Enter either ideal gas or solid data

	Ideal Gas		Solid	
Heat of formation	-2694.97	kJ/kg		kJ/kg
Gibbs of formation	-963.009	kJ/kg		kJ/kg

Help Cancel OK

WYMIENNIKI CIEPŁA

Charakterystyka

- Heat Exchanger (HTXR) -

Specifications | Misc. Settings | Cost Estimations

Simulation mode:
Utility option:
1 Shell & tube simulation
2 Shell & tube fouling factor rating
4 Plate exchanger fouling factor rating
5 Double pipe simulation
6 Double pipe fouling factor rating

Pressure drop: (default = 0)
Stream 4: kPa
Stream 57: kPa

Enter one specification

Temperature stream 27	<input type="text"/>	C
Temperature stream 58	<input type="text"/>	C
Vapor fraction stream 27	<input type="text"/>	
Vapor fraction stream 58	<input type="text"/>	
Subcooling stream 27	<input type="text"/>	C
Subcooling stream 58	<input type="text"/>	C
Superheat stream 27	<input type="text"/>	C
Superheat stream 58	<input type="text"/>	C
Heat duty (specified)	<input type="text"/>	MW

Delta temperature specifications:

Minimum delta temperature	<input type="text" value="4"/>	C
Hot outlet - cold inlet	<input type="text"/>	C
Hot inlet - cold outlet	<input type="text"/>	C
Stream 27 - stream 58	<input type="text"/>	C
Stream 27 - stream 4	<input type="text"/>	C
Stream 58 - stream 57	<input type="text"/>	C

Heat transfer coefficient and area specification:

Specifying both U and A counts as a single thermal specification.

Heat transfer coefficient (U)	<input type="text"/>	W/m ² -K
Area (per shell)	<input type="text"/>	m ²

Help | Cancel | OK

WYMIENNIKI CIEPŁA

Szacowanie kosztów inwestycyjnych

Heat Exchanger (HTXR) -

Specifications Misc. Settings Cost Estimations

ID: 20

Run the costing report after running the unit

Cost model: Shell and tube

Exchanger type: Fixed head

Evaporator type: Forced circulation

Design pressure: kPa

Install factor:

Material factor:

Pressure factor:

Type factor:

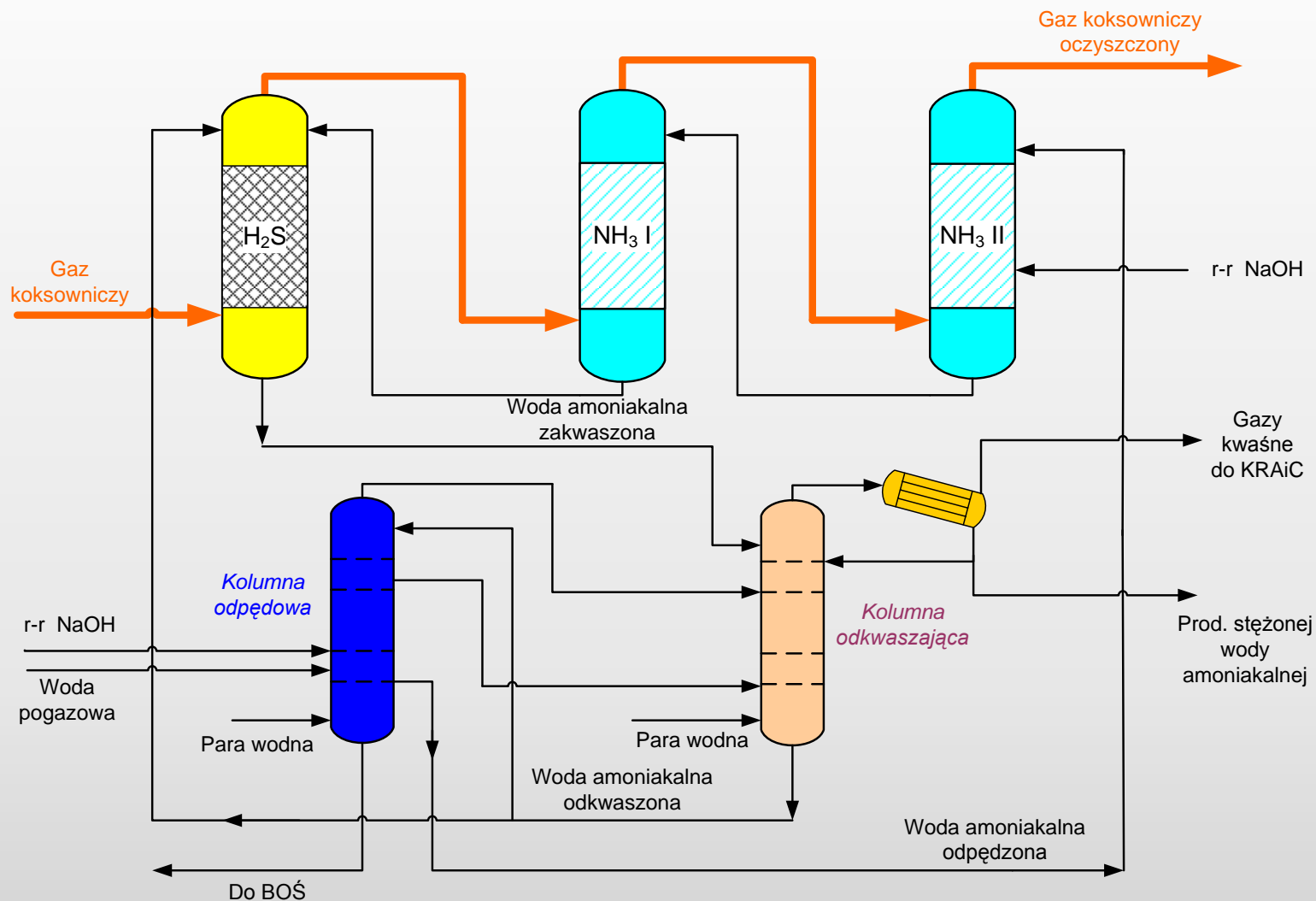
Material selection for this model: Shell and tube
Stainless steel 304

Calculated Results:

Basic cost		\$
Total purchase cost		\$
Total installed cost		\$
Utility Cost		\$
Purchase Cost Override		\$

Help Cancel OK

Amoniakalna metoda oczyszczania gazu koksowniczego



Obliczenia symulacyjne - założenia

Do obliczeń przyjęto „Termodynamiczny System Ekspertowy”. System ten na podstawie zadeklarowanych składników oraz warunków procesu sprawdza dostępne dane termodynamiczne i wybiera optymalną metodę rozwiązania problemu bilansowania. Program CHEMCAD zaproponował dla obliczeń równowagi fazowej tzw. metodę „Wody kwaśnej (SOUR).

1. $CO_2 + H_2O \leftrightarrow HCO_3^-$
2. $HCO_3^- \leftrightarrow CO_3^{2-} + H^+$
3. $NH_3 + H^+ \leftrightarrow NH_4^+$
4. $H_2S \leftrightarrow HS^- + H^+$
5. $HS^- \leftrightarrow S^{2-} + H^+$
6. $H_2O \leftrightarrow H^+ + OH^-$

* - uwzględniono dodatkowe reakcje związane z obecnością NaOH w roztworze

L.p.	Nr w bazie danych	Nazwa składnika	Wzór
1	62	Woda	H_2O
2	63	Amoniak	NH_3
3	50	Siarkowodór	H_2S
4	49	Dwutlenek węgla	CO_2
5	113	Cyjanowodór	HCN
6	429	Wodorotlenek sodu	$NaOH$
7	1	Wodór	H_2
8	2	Metan	CH_4
9	46	Azot	N_2
10	47	Tlen	O_2
11	48	Tlenek węgla	CO

Schemat technologiczny w programie CHEMCAD

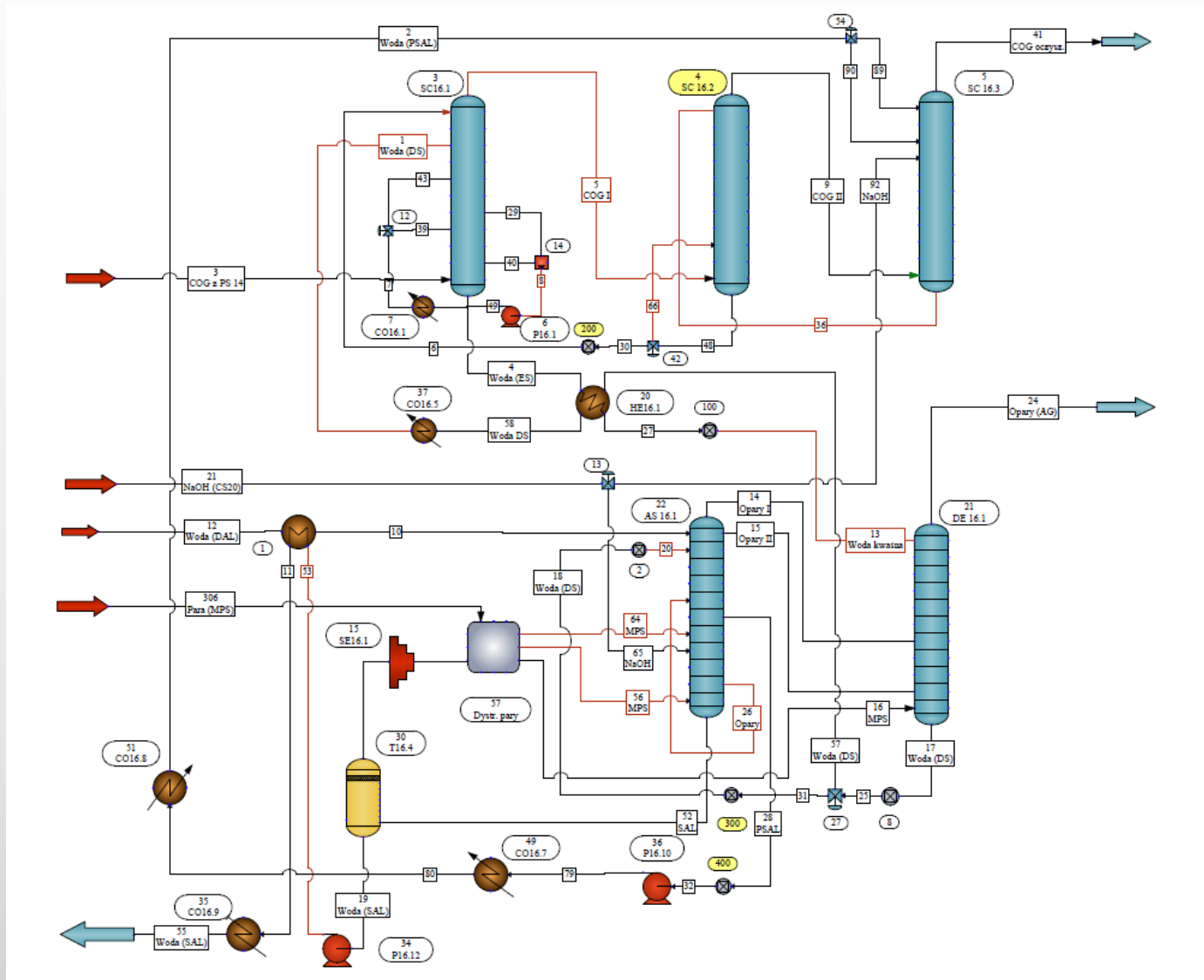
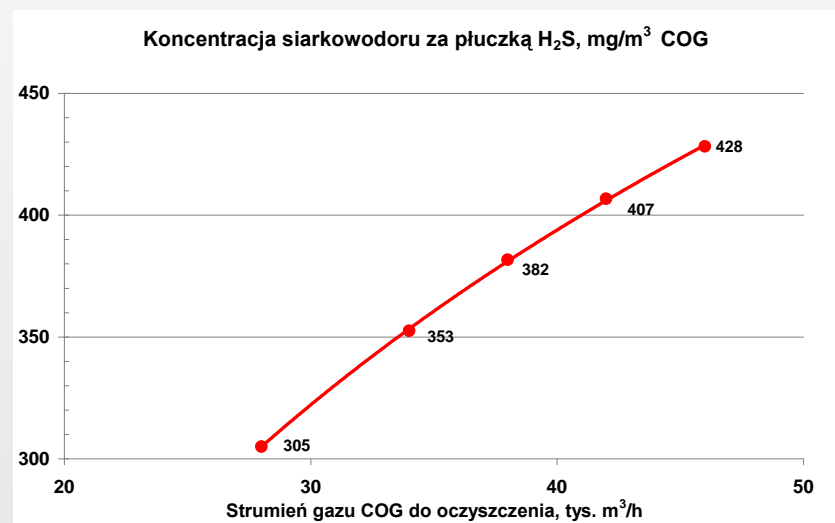
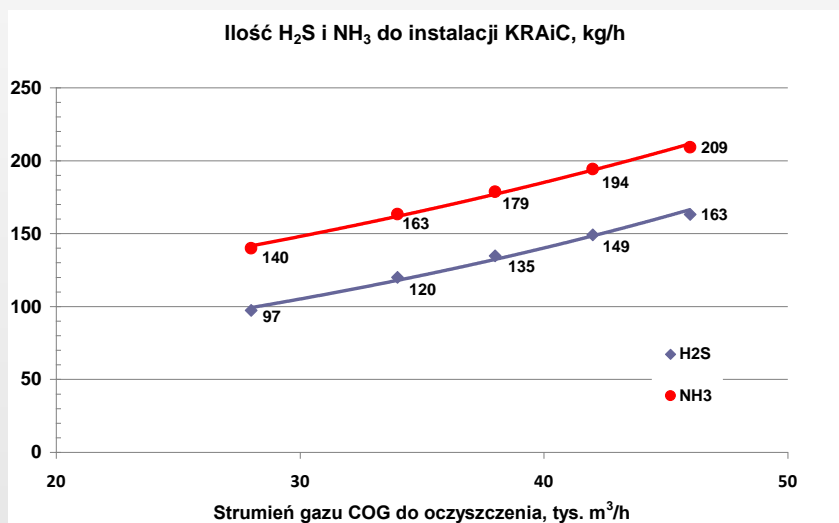


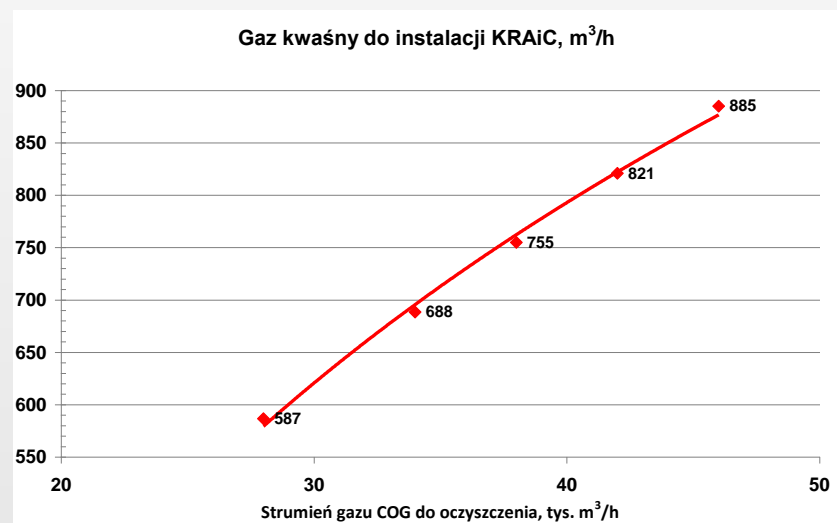
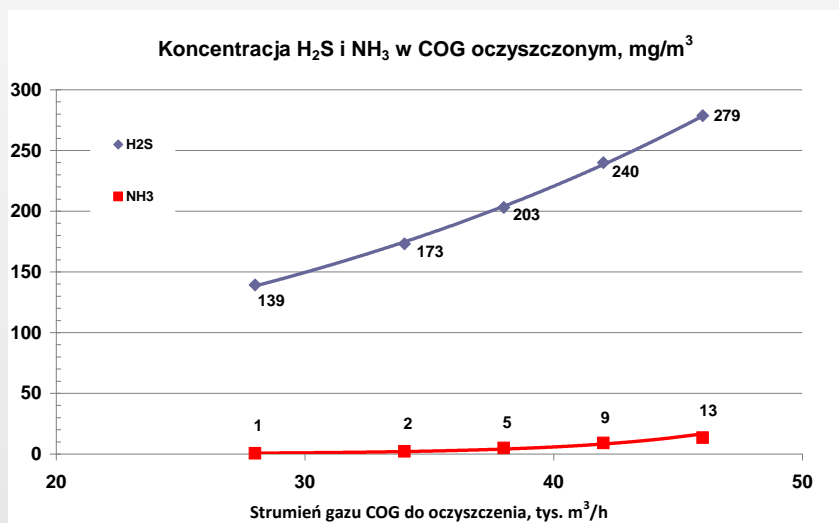
Tabela wyników symulacji

Stream No. Stream Name	1 Woda (DS)	3 COG z PS 14	4 Woda (ES)	5 COG I	9 COG II	12 Woda (DAL)
Temp C	24	24	23,3243	24,7444	25,9966	32,5
Pres kPa	160	124	160	106,2	106,1001	160
Enth MW	-182,21	-12,113	-315,22	-12,654	-12,404	-65,671
Vapor mass frac.	0	0,99959	0	1	1	0
Total kmol/h	2311,772	1070,776	3988,741	1072,759	1070,958	829,184
Total kg/h	41953,824	12666,405	72540,852	12612,785	12499,578	14983,164
Total std L m3/h	42,198	40,403	72,861	40,266	40,112	15
Total std V m3/h	51815,25	24000	89402,23	24044,45	24004,07	18585,04
Flow rates in kg/h						
Water	40987	377,329	70843,305	564,441	609,235	14897,416
Ammonia	448,693	92,845	539,464	26,073	0,286	18,013
Hydrogen Sulfide	30,612	103,7	129,024	8,763	20,358	0,3
Carbon Dioxide	137,377	1273,19	374,563	1231,888	1080,41	37,019
Carbon Monoxide	0	2099,892	0,157	2099,798	2099,791	0
Hydrogen	0	1184,246	0,073	1184,203	1184,2	0
Methane	0	4053,183	0,475	4052,9	4052,879	0
Nitrogen	0	1400,137	0,073	1400,094	1400,091	0

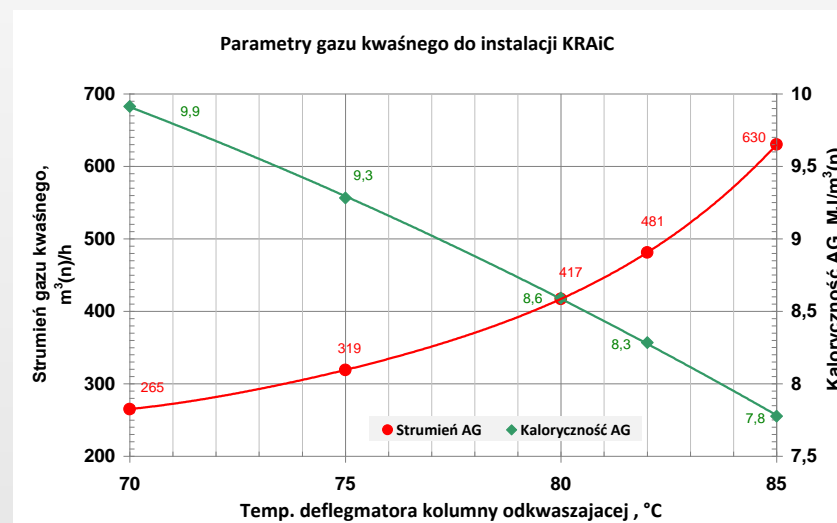
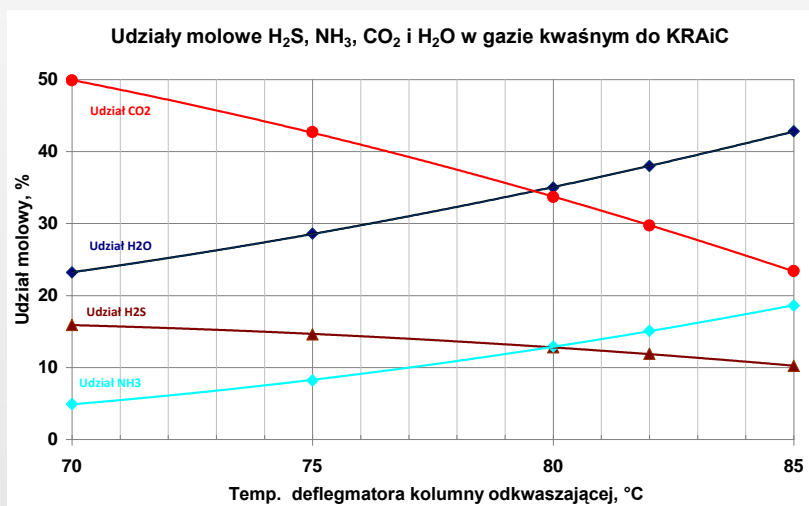
Przykładowe wyniki analizy czułości (1)



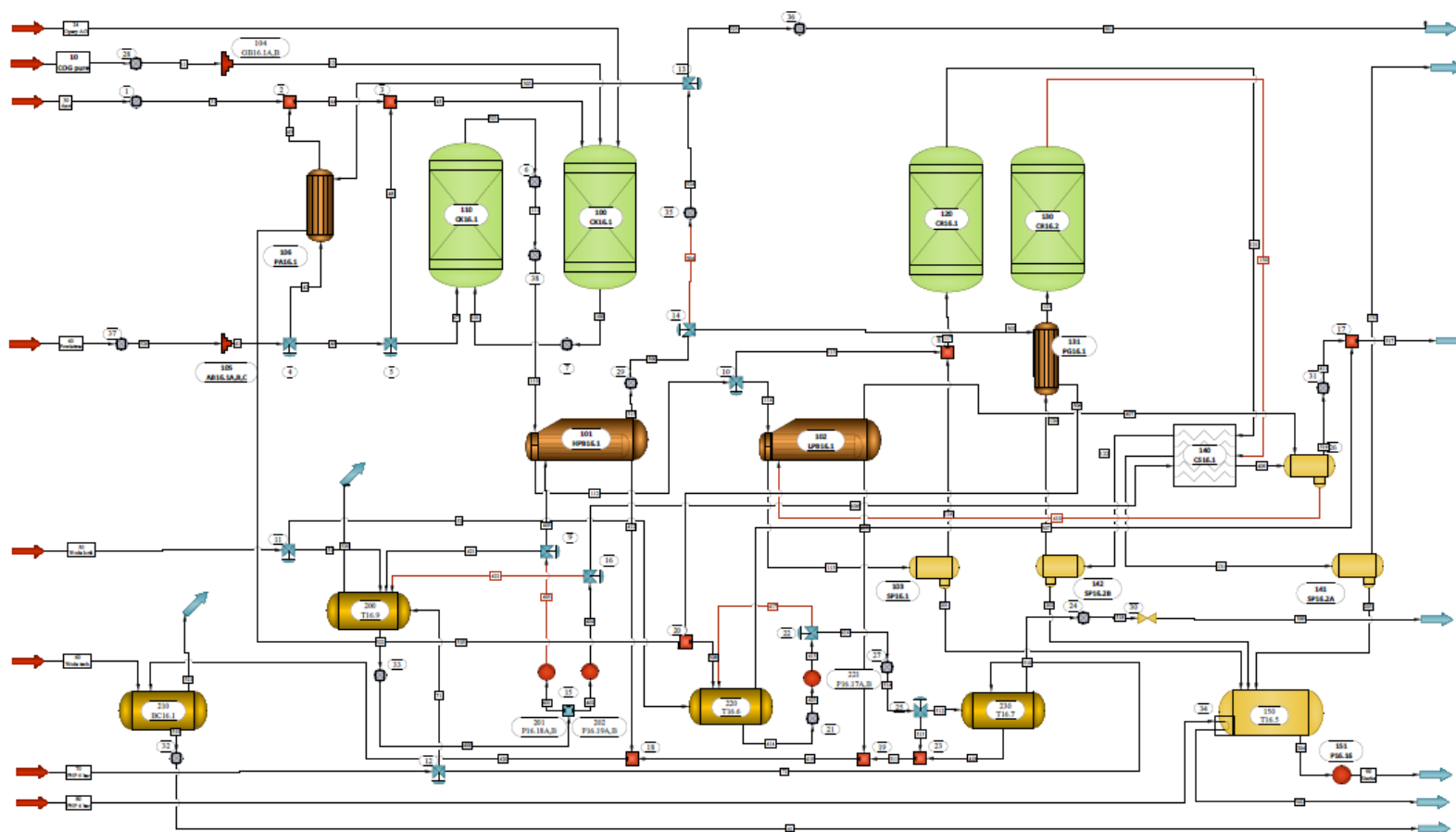
Przykładowe wyniki analizy czułości (2)



Przykładowe wyniki analizy czułości (3)



Model komputerowy instalacji KRAiC



INSTYTUT CHEMICZNEJ PRZERÓBKII WĘGLA

ul. Zamkowa 1 • 41-803 Zabrze

Telefon: **32 271 00 41**
Fax: **32 271 08 09**

E-mail: **office@ichpw.pl**
Internet: **www.ichpw.pl**

NIP: **648-000-87-65**
Regon: **000025945**



CENTRUM BADAŃ TECHNOLOGICZNYCH
Tel. sekretariat 32 271 00 41 w. 300
Tel. Dyrektor Centrum 32 271 00 41
e-mail: cit@ichpw.pl



CENTRUM BADAŃ LABORATORYJNYCH
Tel. sekretariat 32 271 00 41 w. 200
Tel. Dyrektor Centrum 32 271 00 41
e-mail: cba@ichpw.pl

