***Άσκηση 1 :***

Να σχεδιάσετε και να προσομοιώσετε το διάγραμμα ροής που διακρίνεται στο παράρτημα. Η περιγραφή του έχει ως εξής: Ρεύμα CH3OH με γραμμομοριακή ροή 1kmol/hr, θερμοκρασία 25oC και πίεση 1atm αναμιγνύεται (χρησιμοποιήστε Mixer χωρίς να τροποποιήσετε κάτι στα δεδομένα στο Aspen Hysys) με ρεύμα H2O διπλάσιας γραμμομοριακής ροής και ίσης θερμοκρασίας και πίεσης. Το νέο ρεύμα, θερμαίνεται σε εναλλάκτη θερμότητας στην θερμοκρασία 250oC (δεν μεταβάλλεται η πίεση) και εισέρχεται σε αντιδραστήρα (χρησιμοποιήστε τον Conversion Reactor). Στον αντιδραστήρα λαμβάνει χώρα η παρακάτω αντίδραση:

***CH3OH+H2O🡪CO2+3H2 με μετατροπή CH3OH 85% σε T=250oC, P=1atm.***

Το ρεύμα του αντιδραστήρα που εξέρχεται, ψύχεται σε εναλλάκτη ψύξεως στους 30oC (δεν μεταβάλλεται η πίεση) και εισέρχεται σε δοχείο ισορροπίας υγρής-αέριας φάσης (χρησιμοποιήστε τον διαχωριστή separator) που λειτουργεί σε θερμοκρασία 30oC και πίεση 1atm. Από το δοχείο ισορροπίας/διαχωριστή προκύπτουν δύο ρεύματα διαφορετικής φάσης (1 υγρής και 1 αέριας). Χρησιμοποιήστε την μέθοδο NRTL.

1. Να συμπληρωθεί ο παρακάτω πίνακας με τα αποτελέσματα του Aspen Hysys.

|  |  |
| --- | --- |
| ***HEAT DUTIES*** |  |
| Q1, kW | 42.63 |
| Q2, kW | 13.59 |
| Q3, kW | 22.36 |
| ***Molar Fraction: Exit of REACTOR*** |  |
| CH3OH | 0.0319 |
| H2O | 0.2447 |
| CO2 | 0.1809 |
| H2 | 0.5426 |
| ***Mass Flows: Exit of Separator*** |  |
| GASPHASE, kg/hr | 48.14 |
| LIQPHASE, kg/hr | 19.93 |
| ***Molar Flows GASPHASE*** |  |
| CH3OH, kmol/hr | 0.0934 |
| H2O, kmol/hr | 0.1448 |
| CO2, kmol/hr | 0.8499 |
| H2, kmol/hr | 2.55 |
| ***Molar Flows LIQPHASE*** |  |
| CH3OH, kmol/hr | 0.0566 |
| H2O, kmol/hr | 1.0052 |
| CO2, kmol/hr | 1.36e-4 |
| H2, kmol/hr | 1.274e-5 |

1. Στο προηγούμενο διάγραμμα ροής εισέρχεται ρεύμα αέρα 3kmol/hr προθερμασμένο στους 250οC και με πίεση 1atm. Το ρεύμα αυτό εισάγεται απευθείας στον αντιδραστήρα και λαμβάνει χώρα άλλη μία αντίδραση που έχει ως εξής:

***CH3OH+3/2O2🡪CO2+2H2O με μετατροπή CH3OH 15% σε T=250oC, P=1atm.***

Όλα τα υπόλοιπα βήματα πριν και μετά την είσοδο του αέρα παραμένουν ως έχουν. Να συμπληρωθεί ο παρακάτω πίνακας. Τι παρατηρείται?

1. Προτείνεται ένα τρόπο που να μηδενίσει την θερμότητα Q2 χωρίς να μεταβάλλετε την ροή εισόδου, θερμοκρασία και πίεση των αντιδρώντων.

**ΘΑ ΑΛΛΑΞΕΤΕ ΤΗΝ ΜΕΤΑΤΡΟΠΗ ΤΗΣ ΑΝΤΙΔΡΑΣΗΣ ΑΠΟ 15% ΣΕ 7.3%.**

|  |  |
| --- | --- |
| ***HEAT DUTIES*** |   |
| Q1, kW | 42.63 |
| Q2, kW | -14.38 |
| Q3, kW | 29.4 |
| ***Molar Fraction: Exit of REACTOR*** |  |
| CH3OH | 0 |
| H2O | 0.1865 |
| CO2 | 0.1286 |
| H2 | 0.328 |
| ***Mass Flows: Exit of Separator*** |  |
| GASPHASE, kg/hr | 133.5 |
| LIQPHASE, kg/hr | 21.14 |
| ***Molar Flows GASPHASE*** |  |
| CH3OH, kmol/hr | 0 |
| H2O, kmol/hr | 0.2766 |
| CO2, kmol/hr | 0.9999 |
| H2, kmol/hr | 2.55 |
| ***Molar Flows LIQPHASE*** |  |
| CH3OH, kmol/hr | 0 |
| H2O, kmol/hr | 1.1734 |
| CO2, kmol/hr | 9.3787e-5 |
| H2, kmol/hr | 6.2838e-6 |

***Εκπαιδευτικοί Στόχοι της ‘Ασκησης 1***

* Εξοικοίωση με την εισαγωγή δεδομένων στο Aspen Plus σε ρεύματα μάζας (material stream).
* Εκμάθηση στην σύνδεση υποσυστημάτων (μίκτη, εναλλάκτη, αντιδραστήρα, δοχείου διαχωρισμού/ισορροπίας φάσεων).
* Εκμάθηση στην αξιολόγηση θερμικών αναγκών.



***Διάγραμμα Ροής Ερωτήματος 1***



***Διάγραμμα Ροής Ερωτήματος 2***