



МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«МИРЭА – Российский технологический университет»
РТУ МИРЭА

Институт тонких химических технологий имени М.В.Ломоносова
Кафедра процессов и аппаратов химической технологии

Курсовая работа

по дисциплине «Проектирование в химических технологиях»
на тему

«Восстановление растворителей из варочного раствора гидролизом»

Шифр задания: **О-В**

Выполнили: студенты группы ХЕБО-10-15 Королёв Н.А., Шевцов
В.Ю.

Москва, 2018

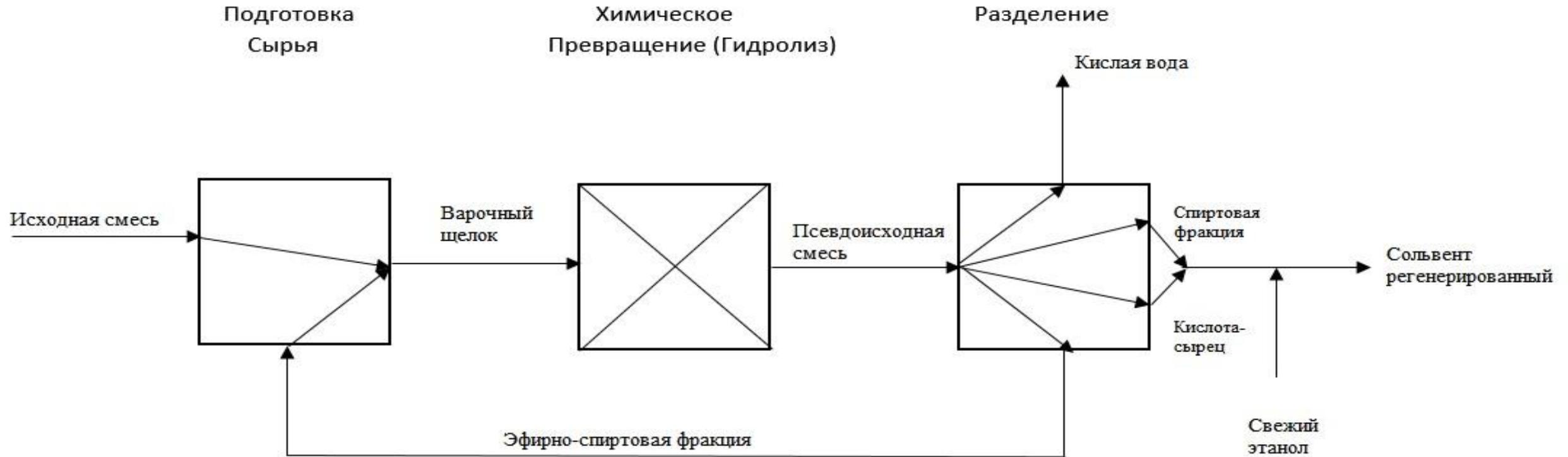
Описание процесса задания

- Одним из новых направлений производства целлюлозы и бумаги из древесины является сольвентная варка, делигнификация древесины с помощью органических растворителей. Хорошие результаты получаются при варке древесины в водной среде смеси этанола и уксусной кислоты, весьма распространенных в большой химии и в лесохимии растворителей. Оптимальный состав раствора для варки древесин (% по массе): этанол - 35, вода - 35, уксусная кислота - 30.
- В процессе варки, естественно, происходит этерификация уксусной кислоты этанолом с образованием этилацетата и воды. Таким образом, варочный щелок представляет собой смесь, из которой необходимо регенерировать компоненты исходной смеси - уксусную кислоту и этанол путем гидролиза этилацетата.
- Для проектирования промышленного способа восстановления растворителей была сконструирована лабораторная пилотная установка. Она состоит из секции нагрева исходной смеси, изотермического реактора и секции разделения, представленной каскадом ректификационных колонн. Исходная смесь образца варочного щелока смешивается с циркуляционным потоком, подогревается до температуры реактора (70 С) на водяной бане, и направляется в реактор, работающий при атмосферном давлении. После гидролизера поток разделяется в ректификационных колоннах для извлечения растворителей. Секция разделения состоит из 3 аппаратов, позволяющих выделить 4 фракции: эфирно-спиртовую, спиртовую, уксусно-кислую и кислую воду. Эфирно-спиртовая и кислотная составляющая выходного потока реактора разделяются полностью уже в первом аппарате, тогда как вода поступает в следующие разделители почти в равных долях. Эфирно-спиртовая фракция представляет собой циркуляционный раствор, смешиваемый с варочным щелком. Спиртовая фракция, с добавлением некоторого количества свежего водного раствора спирта (азеотроп, 96 масс.%), смешивается с уксусно-кислой для получения регенерированного варочного раствора. Необходимо спроектировать промышленную установку для обработки варочного щелока с массовым расходом 72 тонны в час ($t=42$ град. С, $p=1,3$ atm), повторяющая все стадии пилотной установки, для чего предполагается провести моделирование на основе экспериментально полученных данных и задавая необходимые промышленные параметры оборудования.

Описание задач задания

1. Изобразить схему процесса в симуляторе Aspen Plus с представленными модулями их библиотеки моделей Aspen.
2. Задать все данные входных потоков. Выбрать метод расчета физических свойств и объяснить причины выбора. Определить расход горячей воды на подогрев исходной смеси. Вода циркулирует по замкнутому обороту с внешним подогревом от горелки. Привести тепловой расход в теплообменниках. Задать параметры реактора. Определить равновесную конверсию этилацетата в адиабатических условиях и в условиях процесса.
3. Определить неизвестные параметры секции разделения, чтобы результаты расчета процесса соответствовали составам фракций лабораторного процесса. Флегмовое число во всех процессах принять равным предварительно от 3 до 4. Вычислить расхождение расчетных значений с приведенными в задании.

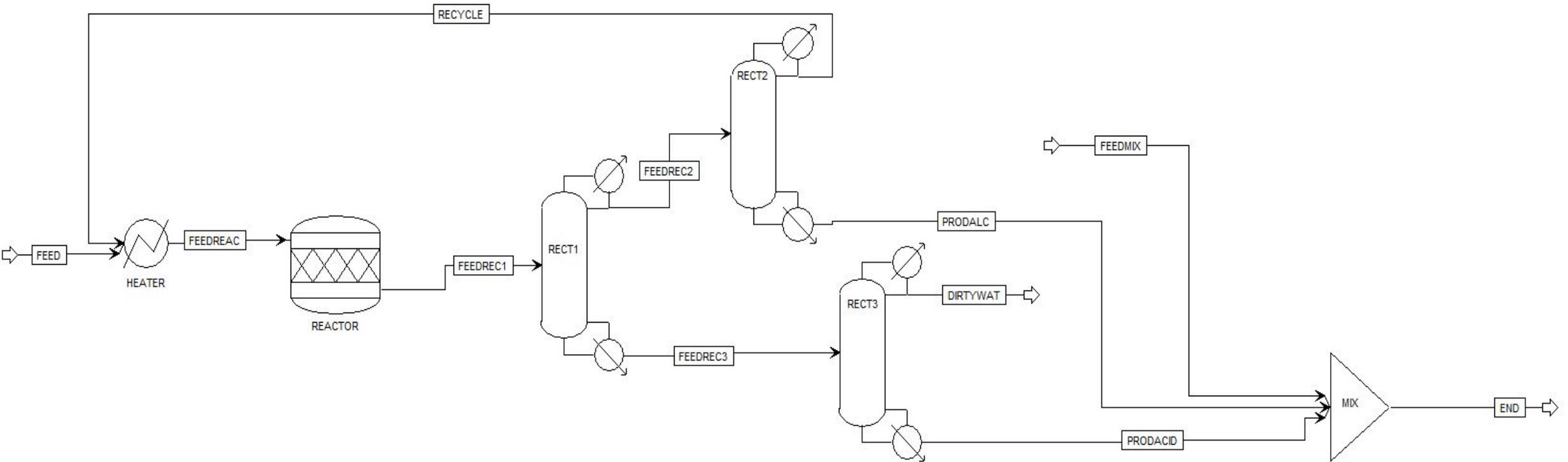
Концепт-схема процесса



Обоснование выбора модели расчёта

- Проанализировав состав физико-химической системы, было принято решение использовать для расчета модель НРТЛ (NRTL-НОС - Non-Random Two Liquids - Hayden-O'Connell (неслучайное двухжидкостное по корреляции Хайдена-О Коннелла), так она является наиболее универсальной и удовлетворительной по точности по отношению ко многим веществам. В частности, при работе с системой, в которой участвуют в основном полярные растворители.
- Данная модель вводит, в дополнение к двум энергетическим параметрам в уравнении Вильсона для концепции локального состава, третий, характеризующий степень упорядоченности молекул (эмпирический учет энтропийной составляющей) в бинарном растворе. И таким образом, возможно количественное описание экспериментальной зависимости коэффициентов активности компонентов бинарных растворов и без введения дополнительных параметров трехкомпонентных растворов.

Расчётная схема процесса в ПО Aspen Plus



Спецификация нагревателя

HEATER (Heater) x +

Specifications | Flash Options | Utility | Comments

Flash specifications

Flash Type

	Temperature	▼
	Pressure	▼

Temperature

70	C	▼
----	---	---

Temperature change

	C	▼
--	---	---

Degrees of superheating

	C	▼
--	---	---

Degrees of subcooling

	C	▼
--	---	---

Pressure

1,3	atm	▼
-----	-----	---

Спецификация реактора

The image shows two screenshots of a reactor specification software interface. The top screenshot displays the 'Specifications' tab for a reactor, with the following settings:

- Flash Type: Temperature, Pressure
- Temperature: 70 C
- Pressure: 1 atm
- Duty: cal/sec
- Vapor fraction: (empty)
- Valid phases: Liquid-Only

The bottom screenshot displays the 'Reactions' tab, showing a table of reaction specifications:

Rxn No.	Specification type	Molar extent	Units	Fractional conversion	Fractional Conversion of Component	Stoichiometry
1	Frac. conversion		kmol/hr	0,772463	ACETATE	WATER + ACETATE --> ETHANOL(MIXED) + ACID(MIXED)

Below the table are buttons for 'New', 'Edit', 'Delete', 'Copy', and 'Paste'.

Спецификация ректификационной

Main Flowsheet x RECT1 (RadFrac) x +

Configuration Streams Pressure Condenser Reboiler 3-Phase Comments

Setup options

Calculation type: *Equilibrium*

Number of stages: 40 [Stage Wizard]

Condenser: *Total*

Reboiler: *Kettle*

Valid phases: *Vapor-Liquid*

Convergence: *Standard*

Operating specifications

Distillate rate: *Mass* 45666 kg/hr

Reflux ratio: *Mass* 3,5

Main Flowsheet x RECT1 (RadFrac) x +

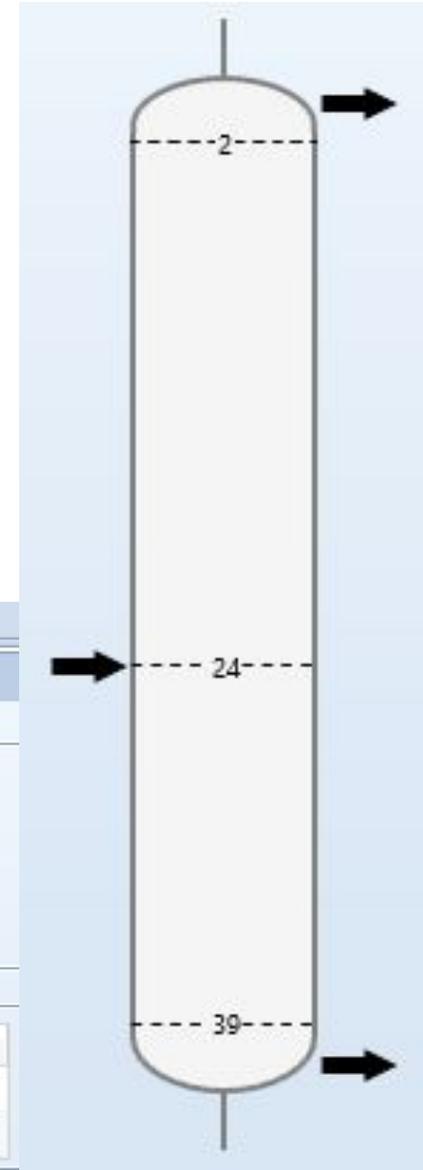
Configuration Streams Pressure Condenser Reboiler 3-Phase Comments

Feed streams

Name	Stage	Convention
FEEDREC1	24	Liquid

Product streams

Name	Stage	Phase	Basis	Flow	Units	Flow Ratio	Feed Specs
FEEDREC2	1	Liquid	Mole		kmol/hr		Feed basis
FEEDREC3	40	Liquid	Mole		kmol/hr		Feed basis



Спецификация ректификационной

Main Flowsheet x RECT2 (RadFrac) x +

Configuration Streams Pressure Condenser Reboiler 3-Phase Comments

Setup options

Calculation type *Equilibrium*

Number of stages Stage Wizard

Condenser *Total*

Reboiler *Kettle*

Valid phases *Vapor-Liquid*

Convergence *Standard*

Operating specifications

Distillate rate *Mass* *kg/hr*

Reflux ratio *Mass*

Free water reflux ratio Feed Basis

Design and specify column internals

Спецификация ректификационной колонны 3

Configuration Streams Pressure Condenser Reboiler 3-Phase Comments

Setup options

Calculation type: *Equilibrium*

Number of stages: 40

Condenser: **Total**

Reboiler: *Kettle*

Valid phases: *Vapor-Liquid*

Convergence: *Standard*

Operating specifications

Distillate rate: **Mass** 5245,2 kg/hr

Reflux ratio: **Mass** 3,5

Free water reflux ratio: 0

Свойства потоков

	Units	FEED	FEEDREAC	FEEDREC1	FEEDREC2	FEEDREC3	RECYCLE	DIRTYWAT	PRODALC	PRODACID	FEEDMIX	END
Temperature	C	42	70	70	77,337	102,035	73,5912	100,168	80,8243	102,683	20	87,1319
Pressure	bar	1,31723	1,31723	1,01325	1,01325	1,01325	1,01325	1,01325	1,01325	1,01325	1,01325	1,01325
Molar Vapor Fraction		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Molar Liquid Fraction		1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
Molar Solid Fraction		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Mass Vapor Fraction		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Mass Liquid Fraction		1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
Mass Solid Fraction		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Molar Enthalpy	cal/mol	-74846,4	-74090,1	-74089,7	-67514,3	-80429	-72915,1	-67552,3	-66342,8	-84090,3	-66627,8	-74052,3
Mass Enthalpy	cal/gm	-2544,45	-2369,07	-2369,06	-2104,64	-2647,93	-1472,87	-3637,75	-2338,04	-2492,43	-1536,35	-2351,34
Molar Entropy	cal/mol-K	-50,0339	-50,6175	-50,7363	-55,2465	-43,9707	-76,6188	-35,3453	-50,7765	-46,5354	-78,6292	-49,762
Mass Entropy	cal/gm-K	-1,70093	-1,61852	-1,62232	-1,72221	-1,44763	-1,54768	-1,90337	-1,78946	-1,3793	-1,81308	-1,58006
Molar Density	mol/cc	0,0311768	0,0277664	0,0276166	0,024887	0,0295123	0,0156898	0,0492732	0,0283323	0,0266661	0,0187076	0,0267671
Mass Density	gm/cc	0,91708	0,868364	0,863678	0,798344	0,896416	0,776731	0,914994	0,80394	0,899667	0,811304	0,842992
Enthalpy Flow	cal/sec	-5,08891e+07	-5,55097e+07	-5,55094e+07	-2,66974e+07	-2,84546e+07	-5,05341e+06	-5,3002e+06	-2,16362e+07	-2,31522e+07	-2,23846e+06	-4,70268e+07
Average MW		29,4155	31,2739	31,2739	32,0788	30,3743	49,5055	18,5698	28,3754	33,7383	43,3677	31,4936
— Mole Flows	kmol/hr	2447,69	2697,19	2697,19	1423,56	1273,63	249,499	282,459	1174,06	991,17	120,947	2286,18
ETHANOL	kmol/hr	291,944	467,781	609,401	609,401	1,39826e-10	175,837	1,39826e-10	433,564	4,514e-17	109,301	542,865
ACID	kmol/hr	232,836	232,836	374,456	0,00714435	374,449	4,97986e-29	3,72599	0,00714435	370,723	0	370,73
WATER	kmol/hr	1781,29	1813,23	1671,61	772,435	899,18	31,9465	278,733	740,488	620,447	11,6461	1372,58
ACETATE	kmol/hr	141,62	183,336	41,7156	41,7156	1,20455e-23	41,7159	0	5,29669e-06	0	0	5,29669e-06

Свойства потоков

	Units	FEED	FEEDREAC	FEEDREC1	FEEDREC2	FEEDREC3	RECYCLE	DIRTYWAT	PRODALC	PRODACID	FEEDMIX	END
Enthalpy Flow	cal/sec	-5,08891e+07	-5,55097e+07	-5,55094e+07	-2,66974e+07	-2,84546e+07	-5,05341e+06	-5,3002e+06	-2,16362e+07	-2,31522e+07	-2,23846e+06	-4,70268e+07
Average MW		29,4155	31,2739	31,2739	32,0788	30,3743	49,5055	18,5698	28,3754	33,7383	43,3677	31,4936
+ Mole Flows	kmol/hr	2447,69	2697,19	2697,19	1423,56	1273,63	249,499	282,459	1174,06	991,17	120,947	2286,18
- Mole Fractions												
ETHANOL		0,119274	0,173433	0,22594	0,428083	1,09786e-13	0,704759	4,95033e-13	0,369286	4,55422e-20	0,903709	0,237455
ACID		0,0951249	0,0863255	0,138832	5,01866e-06	0,294002	1,99594e-31	0,0131913	6,08517e-06	0,374026	0	0,162162
WATER		0,727743	0,672269	0,619762	0,542608	0,705998	0,128042	0,986809	0,630708	0,625974	0,096291	0,600383
ACETATE		0,0578586	0,0679729	0,0154663	0,0293038	9,45765e-27	0,167199	0	4,51144e-09	0	0	2,31684e-09
- Mass Flows	kg/hr	72000	84351,6	84351,6	45666	38685,6	12351,6	5245,2	33314,4	33440,4	5245,2	72000
ETHANOL	kg/hr	13449,6	21550,2	28074,5	28074,5	6,44167e-09	8100,64	6,44167e-09	19973,9	2,07956e-15	5035,39	25009,3
ACID	kg/hr	13982,4	13982,4	22487	0,429037	22486,6	2,99054e-27	223,755	0,429036	22262,9	0	22263,3
WATER	kg/hr	32090,4	32665,9	30114,6	13915,6	16199	575,525	5021,45	13340,1	11177,5	209,808	24727,4
ACETATE	kg/hr	12477,6	16153	3675,41	3675,41	1,06129e-21	3675,44	0	0,000466672	0	0	0,000466672
- Mass Fractions												
ETHANOL		0,1868	0,255481	0,332828	0,61478	1,66513e-13	0,655837	1,22811e-12	0,599557	6,2187e-20	0,96	0,347351
ACID		0,1942	0,165763	0,266587	9,3951e-06	0,581266	2,42117e-31	0,042659	1,28784e-05	0,665748	0	0,309213
WATER		0,4457	0,387259	0,357013	0,304726	0,418734	0,0465952	0,957341	0,40043	0,334252	0,04	0,343437
ACETATE		0,1733	0,191497	0,0435725	0,0804846	2,74337e-26	0,297568	0	1,40081e-08	0	0	6,48156e-09
Volume Flow	l/min	1308,5	1618,98	1627,76	953,348	719,264	265,034	95,5416	690,649	619,496	107,752	1423,5

Сравнение результатов с выданными данными

Поток: FEEDREAC	Лабораторные данные (в пересчёте на 72000 кг/ч)		Полученные в Aspen данные	
	Масса	Масс.%	Масса	Масс.%
Этилацетат	16103	19,09	16153	19,15
Этанол	21763	25,8	21550	25,55
Вода	32501	38,53	32666	38,73
Уксусная кислота	13985	16,58	13982	16,58
Итого	84351,6	100	84351,6	100

Сравнение результатов с выданными данными

Поток: PRODALC	Лабораторные данные (в пересчёте на 72000 кг/ч)		Полученные в Aspen данные	
	Масса	Масс.%	Масса	Масс.%
Этилацетат	~0	~0	~0	~0
Этанол	19955	59,90	19974	60,00
Вода	13356	40,09	13340	40,00
Уксусная кислота	~0	~0	~0	~0
Итого	33314	100	33314	100

Сравнение результатов с выданными данными

Поток: PRODACID	Лабораторные данные (в пересчёте на 72000 кг/ч)		Полученные в Aspen данные	
	Масса	Масс.%	Масса	Масс.%
Этилацетат	~0	~0	~0	~0
Этанол	~0	~0	~0	~0
Вода	10978	32,83	11178	33,43
Уксусная кислота	22462	67,17	22263	66,57
Итого	33440	100	33440	100

Сравнение результатов с выданными данными

Поток: END	Лабораторные данные (в пересчёте на 72000 кг/ч)		Полученные в Aspen данные	
	Масса	Масс.%	Масса	Масс.%
Этилацетат	36	0,05	~0	~0
Этанол	25200	35,00	25009	34,74
Вода	24300	33,75	24727	34,34
Уксусная кислота	22464	31,20	22263	30,92
Итого	72000	100	72000	100