

Sammendrag	3
1 Innledning	4
2 Prinsipp	6
2.1 Generelt om batch destillasjon	6
2.2 Masse og holdupbalanser	8
2.3 Modellering og regulering av batch kolonnene	10
2.3.1 Matlab modellene	10
2.3.2 Instilling av settpunkt og fortsterkning ved P-midt	11
3 Prosjektbasis	12
3.1 Spesifikasjoner gitt av Nycomed Imaging AS, Lindesnes Fabrikker	12
3.1.1 Strømdata	12
3.1.2 Kolonnedata	13
3.1.3 Priser og forbruk av løsemidler	13
3.1.4 Forutsetninger og antagelser for simuleringene	14
4 Resultater	15
4.1 Resultater av simulering av strøm 0	15
4.2 Økonomisk vurdering for gjenvinningen av strøm 0	20
4.3 Resultater av simulering av strøm 7	21
4.4 Økonomisk vurdering av strøm 7	24
4.5 Økonomisk vurdering av det nye anlegget	25
5 Diskusjon	26
5.1 Vurdering av kolonnetype og reguleringstype	26
5.2 Vurdering av strøm 0	27
5.2.1 Vurdering destillasjonssekvensen med hensyn på utbytte og tidsforbruk	27
5.2.2 Vurdering med hensyn på økonomi	29
5.2.3 Samlet vurdering av strøm 0	29
5.3 Vurdering av strøm 7	30
5.3.1 Vurdering destillasjonssekvensen med hensyn på utbytte og tidsforbruk	30
5.3.2 Vurdering med hensyn på økonomi	31
5.3.3 Samlet vurdering av strøm 7	32
5.4 Økonomisk vurdering av det nye anlegget	32
5.5 Anbefalinger for videre arbeid	32
6 Konklusjon	34
7 Litteraturliste	35
Symbolliste	36
A Utskrift av programmet for simulering av vanlig batch kolonne	37
B Utskrift av funksjonene	40
C Utskrift av programmet for simulering av	

	lukket batch kolonne	42
D	Fysikalske og termodynamiske data	45
E	Initfiler for simulering av batch kolonnen	47
F	Beregningseksempel, strøm 0	52
G	Utskrift av programkode for beregning av Wilson koeffisienter	59
H	Bergningseksempel av økonomisk vurdering av strøm 0 og 7	67
I	Beregning av kolonneleiepris	69
J	Estimering av investeringskostnader	71
K	Investeringsanalyse av det nye anlegget	74
L	Plott av temperaturprofil og stasjonæravvik	75

SAMMENDRAG

Det er blitt utført en karakterisering av den utvidete anleggsdelen på gjenvinningsanlegget ved Nycomed Imaging AS, Lindesnes Fabrikker, og en sammenligning med tilsvarende utstyr som eksisterer fra før. Dette er gjort ved at det er utviklet en dynamisk modell for batch destillasjon i Matlab. Denne modellen er brukt til å undersøke hvilken type kolonne strøm 0 og 7 bør kjøres på. De ulike kolonnetypene som er undersøkt er vanlig og lukket batch for ny og gammel kolonne.

Ut fra en vurdering av tidsforbruk og utbytte anbefales det at strøm 0 og 7 kjøres på ny kolonne som lukket batch.

Den økonomiske analysen gir ikke noe entydig svar på hvilken kolonnetype som bør kjøres for strøm 0 og 7. Analysen viser at det er økonomisk lønsomt å gjenvinne 2-metoxyetanol fra strøm 0 og metanol fra strøm 7. Metoden som er benyttet for økonomisk vurdering har en stor grad av usikkerhet.

De totale investeringskostnadene for det nye anlegget er estimert til å være 34 mill. NOK, med en årlig avkastning på 9 %. De estimerte investeringskostnadene stemmer godt overens med de reelle investeringskostnadene.

1 INNLEDNING

Denne oppgaven er gitt i faget 52073 Prosjektering i kjemiteknikk, prosjektarbeid. Oppgaven er utført i samarbeid med Nycomed Imaging AS, Lindesnes Fabrikker. Kontaktperson hos Nycomed Imaging har vært Jan Inge Arnesen. Veileder ved Institutt for kjemisk prosesssteknologi, NTNU, har vært Professor Sigurd Skogestad.

Hensikten med denne oppgaven var å karakterisere den utvidete anleggsdelen på gjenvinningsanlegget ved Nycomed Imaging AS, Lindesnes Fabrikker, og en sammenligne med tilsvarende utstyr som eksisterer fra før. På basis av denne karakteriseringen skulle man komme frem til en anbefaling hvordan (hvilke strømmer og hvilke sekvenser) som bør kjøres på det nye anlegget. Det ble derfor utviklet en dynamisk modell for batch destillasjon i Matlab. Modellen ble brukt til å undersøke hvilken type kolonne de to sidestrømmene fra kontrastmiddelproduksjon, strøm 0 og 7, bør kjøres på. De ulike kolonnetypene som ble undersøkt var vanlig og lukket batch for ny og gammel kolonne. Anbefalingen av kolonnetype blir gjort med hensyn på tidsforbruk, utbytte og økonomisk potensial for hver strøm. Som siste del i oppgaven skulle investeringskostnadene for den nye anleggsdelen estimeres, og en enkel investeringsanalyse skulle her inkluderes i beregningene.

Bakgrunn i stadig strengere miljøkrav og den stramme økonomiske situasjonen de fleste bedrifter befinner seg i, gjør at gjenvinning av løsningsmidler er blitt stadig viktigere de siste årene.

I prosessindustrien er destillasjon en vanlig enhetsoperasjon for separasjon av væskeblandinger. Separasjonen foregår vanligvis ved kontinuerlig destillasjon da batch destillasjon som oftest er mindre energi effektiv og tidsforbruket er lengre. I finkjemikalie industrien er det mest hensiktsmessig å benytte batchproduksjon, da det gjør det enklere å spore opp feil i produksjonen og minimalisere produkttap ved feilproduksjon .

Ved vanlig batch destillasjon blir føde tilsatt kokeren og produktet tatt ut i toppen av kolonnen. Med lukket batch-destillasjonen anrikes produktet etterhvert i kondensatoren, og ved en gitt sammensetning blir produktet tatt ut av kondensatoren. Den tyngste komponenten blir tilslutt tatt ut av kokeren. For at denne kolonne skal opereres optimalt er det viktig å vite den tiden det tar å destillere av de ulike komponentene og hvordan holdupen i kondensatoren skal reguleres.

Generell destillasjonsteori er gitt i McCabe og Smith [1]. Dynamikken og reguleringen av en kontinuerlig destillasjonskolonne er beskrevet av Skogestad [2] hvor det også er beskrevet Matlab modeller for kontinuerlige destillasjonskolonner.

Lukket batch-destillasjon er beskrevet av Treybal [3] hvor han også gir analytiske uttrykk for tiden det tar for å nå en gitt sammensetning.

De termodynamiske ligningene som beskriver damp/væske likevektene er beskrevet av Henley og Seader [4]. Termodynamiske data er hentet fra Gmehling og Onken [5], og azetropisk data fra Gmehling et. al. [6]. Fysikalske data finnes i CRC [7].

Til økonomiske beregninger er metoder fra Nesse [8] og Timmerhaus og Peters [9] benyttet.

2 PRINSIPP

2.1 GENERELT OM BATCH DESTILLASJON

Ved vanlig batch-destillasjon blir føde tilsatt kokeren og produktet tatt ut i toppen av kolonnen. I følge McCabe og Smith [1] kan denne typen kolonne opereres ved at sammensetningen i toppen av kolonnen holdes konstant og refluxforholdet økes når sammensetningen av væsken i kokeren forandres. En alternativ metode er konstant refluxforhold hvor en lar sammensetningen variere med tiden. Destillasjonen blir da stoppet når den gjennomsnittlige konsentrasjonen i produktet har nådd et gitt renhetskrav, eller man har oppnådd ønsket destillatmengde. En vanlig batch kolonne med regulering er vist i figur (2-1), og med tegnforklaring gitt i tabell (2-1).

Figur: 2-1 Vanlig batch kolonne

Lukket batch destillasjon er beskrevet av Treybal [3], og består av at det ikke blir tatt ut noen destillatmengde under selve batch destillasjonen. Ved start av destillasjonen blir blandingen tilsatt kokeren, eller blandingen blir fordelt i kokerene eller kondensatortanken (se figur (2-2)). Destillasjonen foregår så ved å anrike produktene etter hvert i kokeren og kondensatortanken og ved en gitt sammensetning blir de to produktene tatt ut av henholdsvis kondensatortanken og kokeren. Ved multikomponent destillasjon blir produktet i kondensatortanken tatt ut ved totalt tilbakeløp, for så å lukke kolonnen og fortsette destillasjonen med regulering av tilbakeløpet. En lukket batch kolonne med regulering er vist i figur (2-2), og med tegnforklaringer gitt i tabell (2-1).

Figur: 2-2 Lukket batch kolonne

Tabell 2-1: Tegnforklaring av batch kolonnene i figur (2-1) og figur (2-2)

- D, Destillat [kmol/h]
- L, Væskestrøm [kmol/h]
- V, Dampstrøm [kmol/h]
- MB, holdup i kokeren [kmol]
- MD, holdup i kondensatoren [kmol]
- MK, holdup på trinn n i kolonnen [kmol]
- x_i , molbrøk væske, komponent i
- y_i , molbrøk damp, komponent i
- TC, temperatur regulator
- Ts, settpunkt temperatur regulator
- LC, nivå regulator
- MDs, settpunkt nivå regulator

2.2 MASSE OG HOLDUPBALANSER

Ligningene er hentet fra Skogestad [2] og [10], og termodynamikken fra Henley og Seader [4].

Massebalansen for kondensatoren i vanlig batch destillasjon, trinn NT, er gitt ved,

$$\frac{d}{dt}(MDx_{NT}) = Vy_{N-1} - L_{NT}x_{NT} - Dx_{NT} \quad (2-1)$$

hvor MD er holdup i kondensatoren [kmol], x og y er molbrøker av væske og damp, V er dampstrøm [kmol/h], L er væskestrøm [kmol/h] og D er destillatmengde [kmol/h].

Ved lukket batch destillasjon er massebalansen for kondensatoren gitt ved

$$\frac{d}{dt}(MDx_{NT}) = Vy_{N-1} - L_{NT}x_{NT} \quad (2-2)$$

Holdupbalansen for kondensatoren i vanlig batch destillasjon er gitt av ligning (2-3),

$$\frac{d}{dt}MD = V - L_{NT} - D \quad (2-3)$$

og for lukket batch destillasjon gitt ved

$$\frac{d}{dt}MD = V - L_{NT} \quad (2-4)$$

Massebalansen for kolonnen som består av n-trinn er,

$$MK \frac{dx_i}{dt} = Lx_{n+1} + Vy_{n-1} - Lx_n - Vy_n \quad (2-5)$$

hvor MK er holdup på trinn n i kolonnen [kmol].

Kokeren vil ha følgende massebalanse,

$$\frac{d}{dt}MBx_1 = L_2x_2 - Vy_1 \quad (2-6)$$

hvor MB er holdup i kokeren [kmol].

Holdupbalansen i kokeren er gitt av ligning (2-7)

$$\frac{d}{dt}MB = L_1 - V \quad (2-7)$$

Damp-væske likevekten er gitt av ligningen

$$y_i P = x_i P_i^{sat}(T) \gamma_i(T, x) \quad (2-8)$$

Damptrykket blir beregnet ved Antoine-ligningen

$$\ln P_i^{sat} = A_i - \frac{B_i}{T + C_i} \quad (2-9)$$

hvor P_i^{sat} er metningstrykket [mmHg] og T er temperaturen [K]. A_i , B_i og C_i er Wilson koeffisienter [cal/mol].

Aktivitetskoeffisientene til væsken blir beregnet ved hjelp av Wilson-ligningen for en multikomponent blanding

$$\ln \gamma_i = 1 - \ln \left(\sum_{j=1}^{n_c} x_j \Lambda_{ij} \right) - \sum_{k=1}^{n_c} \left(\frac{x_k \Lambda_{ki}}{\sum_{j=1}^{n_c} x_j \Lambda_{kj}} \right) \quad (2-10)$$

$$\Lambda_{ij} = \frac{V_j}{V_i} \exp \left(\frac{-A_{ij}}{RT} \right) \quad (2-11)$$

hvor V_i er molart volum av rene komponenter [cm^3/mol], A_{ij} er Antoine koeffisient [cal/mol] og R er gasskonstanten [cal/K mol].

2.3 MODELLERING OG REGULERING AV BATCH KOLONNENE

2.3.1 Matlab modellene

I Matlab modellen som ble utviklet for den vanlige batch kolonnen blir nivået i kondensatortanken regulert med en P-regulator. Sammensetningen blir regulert med en temperatur regulator som er en P- eller en PI-regulator, som regulerer væskestrømmen L . Dampstrømmen V er konstant. Utskrift av Matlab modellen er gitt i bilag A og B.

Den lukkede batch kolonnen blir modellert med variabelt holdup i kokeren og kondensatortanken, ved at dampstrømmen V er konstant og væskestrømmen L blir regulert. Reguleringen av holdupen i kokeren og kondensatortanken blir indirekte regulert av sammensetningen som reguleres med en temperatur regulator (P- eller PI-regulator). Utskrift av modellen er gitt i bilag C og B.

Forutsetninger for modelleringen av kolonnen:

- Konstant molar væskeholdup på trinnene, MK
- Konstant molar dampstrøm, V
- Konstant trykk
- Konstant platevirkningsgrad (100%)
- Neglisjerbar damp holdup
- Perfekt blanding på alle trinnene
- Total kondensator

2.3.2 Instilling av settpunkt og fortsterkning ved P-midtt

Ved P-regulering i midten av batch kolonnen beskriver Skogestad [10] en enkel måte å bestemme settpunktet for temperatur regulatoren. Settepunktet bestemmes ut fra den gjennomsnittlige kokepunktstemperaturen for de to komponentene som skal separeres, ligning (2-12),

$$T_{sett} = \frac{T_{b,L} + T_{b,H}}{2} \quad (2-12)$$

hvor $T_{b,L}$ er kokepunktet til lett komponent [K] og $T_{b,H}$ er kokepunktet til tung komponent [K].

Forsterkning K_c blir estimert ut fra følgende ligning,

$$K_c = \frac{V}{|\Delta T_b|} = \frac{V}{|T_{b,L} - T_{b,H}|} \quad (2-13)$$

hvor V er dampstrømmen [kmol/h].

3 PROSJEKTBASIS

3.1 SPESIFIKASJONER GITT AV NYCOMED IMAGING AS, LINDESNES FABRIKKER

3.1.1 Strømdata

Fysikalske og termodynamiske data er gitt i bilag D.

I tabell 3-1 er strømdata for de to utvalgte strømmene gitt.

Tabell 3-1: Strømdata for de to utvalgte strømmene

Komponent	Strøm 0	Strøm 7
	vektprosent, %	vektprosent, %
Metanol	15	67
Vann	30	3
Isopropanol	10	30
2-metoxyetanol	45	-

Det ble sett bort fra kontrastmiddelrester i strøm 7.

Renhetskrav , gitt i molbrøk, for de aktuelle produktene er gitt i tabell 3-2 og er beregnet ut fra data gitt av Nycomed.

Tabell 3-2: Renhetskrav til de aktuelle produktene, gitt i molbrøk

Komponent	Renhetskrav
Metanol	0,964
Isopropanol	0,987
2-metoxyetanol	0,980

3.1.2 Kolonnedata

I tabell 3-3 er kolonnedata for de gamle og nye kolonnene gitt.

Tabell 3-3: Kolonnedata for de gamle og nye kolonnene

Spesifikasjon	Gammel kolonne	Ny kolonne
Væskevolum i kjelen	14m ³	20m ³
Væskeholdup i kolonnen	22dm ³	50dm ³
Væskeholdup i kondensator	50-100dm ³	50-100dm ³
Antall trinn u/koker og kondensator	13	30
Kokereffekt	850kW	1200kW
Fyllmateriale	Mellapak	Mellapak

3.1.3 Priser og forbruk av løsemidler

Priser for de ulike løsningsmidlene er gitt i tabell 3-4.

Tabell 3-4: Priser på løsningsmidler oppgitt av Nycomed Imaging AS

Løsningsmiddel	Pris[kr/l]
Metanol	1,20
Isopropanol	4,20
2-metoxyetanol	5,85

Forbruk av løsningsmidler i 1998 er gitt i tabell 3-5

Tabell 3-5: Forbruk av løsningsmiddel i 1998

Komponent	Regenerert, [m ³]	Innkjøp av rent, [m ³]
Metanol	1735	3320
Isopropanol	6140	2962
2-metoxyetanol	1786	1209

Forbruk av ren komponent er for å erstatte forbrente, solgte og forsvunne (til sjø og luft) mengder, slik at summen av regenerert og innkjøp av rent er lik totalforbruket i produksjonen.

En del av metanolforbruket er metanol tilført fyrhus pga. mye vann i løsemidler til forbrenning.

3.1.4 Forutsetninger og antagelser for simuleringene

- Neglisjerer tiden det tar å varme kolonnen og føden til kokepunktet, varm start
- Initiell sammensetning er lik fødesammensetningen
- Konstant kokereffekt gjennom en hel separasjonssekvens
- Under simuleringen er det benyttet en batch for hele destillasjonssekvensen
- Temperaturregulering med måling i midten av kolonnen
- Alle komponenter dampes helt av for hver separasjon

4 RESULTATER

Simulering av strøm 0 og 7 av vanlig og lukket batch destillasjon er utført i Matlab. I alle simuleringer hvor ikke annet er oppgitt er størrelsesordenen til forsterkningen gitt av ligning (2-13), og settpunktet til temperatur er gitt av ligning (2-12). Programmene for vanlig og lukket batch destillasjon er gitt i bilag A, C og B ,og med initieringsfiler for de ulike splittene gitt i bilag E. Fullstendig beregningseksempel er gitt i bilag F .

4.1 RESULTATER AV SIMULERING AV STRØM 0

Kolonnedata og startbetingelser er gitt i tabell 4-1.

Tabell 4-1: Kolonnedata og startbetingelser for ny og gammel kolonne

	Ny	Gammel
Antall trinn inkludert koker og kondensator	32	15
Væskevolum av en batch	20m ³	14m ³
Splitt 1		
Væskeholdup pr. trinn i kolonnen (konstant)	0,046kmol	0,046kmol
Fødesammensetning i molbrøk		
Metanol	0,16	0,16
Vann	0,58	0,58
Isopropanol	0,060	0,060
2-metoxyetanol	0,20	0,20
Holdup i koker	533 kmol	372 kmol
Holdup i kondensator	5 kmol	5 kmol
Dampstrøm (konstant)	113 kmol/h	80 kmol/h
Splitt 2		
Væskeholdup pr. trinn i kolonnen (konstant)	0,038 kmol	0,038 kmol
Fødesammensetning i molbrøk		
Vann	0,69	0,69
Isopropanol	0,070	0,070
2-metoxyetanol	0,24	0,24
Holdup i koker	446 kmol	312 kmol

Tabell 4-1: Kolonnedata og startbetingelser for ny og gammel kolonne

	Ny	Gammel
Holdup i kondensator	5 kmol	5 kmol
Dampstrøm (konstant)	108 kmol/h	80 kmol/h
Splitt 3		
Væskeholdup pr. trinn i kolonnen (konstant)	0,034 kmol	0,034 kmol
Fødesammensetning i molbrøk		
Isopropanol	0,73	0,73
2-metoxyetanol	0,27	0,27
Holdup i koker	401 kmol	281 kmol
Holdup i kondensator	5 kmol	5 kmol
Dampstrøm (konstant)	108 kmol/h	80 kmol/h

Termodynamiske og fysikalske data er gitt i bilag D.

Regulatorparametrene for ny og gammel kolonne ved separasjon av metanol er gitt i tabell 4-2.

Tabell 4-2: Regulatorparametere og settpunkt for simulering av vanlig og lukket batch destillasjon for ny og gammel kolonne, separasjon av metanol

Regulator type	K_C , ny	K_C , gammel	τ_I [timer]	T_s [K]
P-midt	4,5	4,0	-	345,0
PI-midt	4,5	4,0	0,05	345,0

Tabell 4-3 viser hvor mye det var mulig å gjenvinne av metanol, og hvor lang tid dette tar ved de ulike reguleringsmetodene og de to ulike måtene å kjøre kolonnen på. For ny og gammel kolonne var renhet av metanol gitt i molbrøk lik 1,00 ved destillasjonsslutt.

Tabell 4-3: Tidsforbruk og utbytte for simulering til stasjonære forhold for vanlig og lukket batch destillasjon for ny og gammel kolonne, separasjon av metanol

Kolonne type		Regulator type	t [timer]	Utbytte stasjonært [%]
Ny	Vanlig batch	P-midt	38,8	94,9
		PI-midt	37,1	96,1
	Lukket batch	P-midt	40,0	95,9
		PI-midt	42,6	97,7
Gammel	Vanlig batch	P-midt	36,6	79,8
		PI-midt	33,2	81,0
	Lukket batch	P-midt	44,9	84,0
		PI-midt	31,1	84,0

Fra tabell 4-3 finner man det høyeste utbyttet for ny og gammel kolonne, som gjør at de ulike metodene kan sammenlignes med hensyn på tidsforbruket til et gitt utbytte ved separasjon av metanol. Disse grensene ble satt til 94 % for ny kolonne og til 79 % for gammel kolonne. Renhetskravet er oppfylt i alle tilfellene. Resultatene for denne sammenligningen er gitt i tabell 4-4.

Tabell 4-4: Resultat fra simulering av vanlig og lukket batch destillasjon med P- og PI-regulering i midt for ny og gammel kolonne, separasjon av metanol

Kolonne type		Regulator type	t [timer]
Ny	Vanlig batch	P-midt	19,0
		PI-midt	15,1
	Lukket batch	P-midt	15,7
		PI-midt	12,7
Gammel	Vanlig batch	P-midt	17,4
		PI-midt	12,9
	Lukket batch	P-midt	11,0
		PI-midt	10,0

I tabell 4-5 er regulatorparametre for separasjon av azeotropen isopropanol/vann gitt.

Tabell 4-5: Regulatorparametere og settpunkt for simulering av vanlig og lukket batch destillasjon for ny og gammel kolonne, separasjon av azeotropen isopropanol/vann

Regulator type	K_C	τ_I [timer]	T_s [K]
P-midt	4,0	-	363,0
PI-midt, lukket batch	4,0	0,05	363,0
PI-midt, vanlig batch	4,0	0,05	358,0*

* Settpunktet til temperaturen er satt lavere, da et høyere settpunkt ga problemer i simuleringen, se diskusjon i kap. 5.2.1.

Separasjon av azeotropen isopropanol/vann er tatt med for å vise hvor stort utbytte og hvor lang tid det tar å dampe av azeotropen. Azeotropsammensetningen har i alle tilfellene en molbrøk til vann lik 0,29. Resultatene er gitt i tabell 4-6.

Tabell 4-6: Tidsforbruk, renhet og utbytte for simulering til stasjonære forhold for vanlig og lukket batch destillasjon for ny og gammel kolonne, separasjon av azeotropen isopropanol/vann

Kolonne type		Regulator type	t [timer]	Utbytte av azeotrop stasjonært [%]
Ny	Vanlig batch	P-midt	8,5	94,4
		PI-midt	7,9	95,7
	Lukket batch	P-midt	7,5	100
		PI-midt	7,2	100
Gammel	Vanlig batch	P-midt	7,3	92,5
		PI-midt	7,0	92,7
	Lukket batch	P-midt	7,0	100
		PI-midt	6,7	100

I tabell 4-7 er regulatorparametre for separasjon av 2-metoksyetanol gitt.

Tabell 4-7: Regulatorparametere og settpunkt for simulering av vanlig og lukket batch destillasjon for ny og gammel kolonne, separasjon av 2-metoksyetanol

Regulator type	K_C	τ_I [timer]	T_s [K]
P-midt	4,0	-	385,0
PI-midt, lukket batch	4,0	0,05	385,0
PI-midt, vanlig batch	4,0	0,05	373,0*

* Settpunktet til temperaturen er satt lavere, da et høyere settpunkt ga problemer i simuleringen, se diskusjon i kap. 5.2.1.

Ved separasjon av 2-metoksyetanol er renhetskravet i molbrøk gitt av Nycomed til å være 0,980. Destillasjonstiden beregnes da ut fra når dette kravet er oppfylt i kokeren, og utbyttet ble beregnet ved dette tidspunktet. Tidsforbruk og utbytte for separasjon av 2-metoksyetanol er gitt i tabell 4-8. Ved lukket batch er ikke tilfellet for simulering av PI-midt tatt med, da dette ga et lavt utbytte, se diskusjon kap 5.2.1.

Tabell 4-8: Tidsforbruk og utbytte for å oppnå $x_{2\text{-metoksyetanol}} = 0,980$ for vanlig og lukket batch destillasjon for ny og gammel kolonne, separasjon av 2-metoksyetanol

Kolonne type		Regulator type	Tid for å oppnå $x_{2\text{-metoksyetanol}} = 0,980$ i koker [timer]	Utbytte av 2-metoksyetanol ved dette tidspunktet [%]
Ny	Vanlig batch	P-midt	7,2	99,0
		PI-midt	6,0	92,8
	Lukket batch	P-midt	7,2	98,0
Gammel	Vanlig batch	P-midt	5,9	93,4
		PI-midt	6,3	93,2
	Lukket batch	P-midt	5,9	92,5

4.2 ØKONOMISK VURDERING FOR GJENVINNINGEN AV STRØM 0

Den totale fortjenesten ble beregnet ut fra utbytte av 2-metoksyetanol ved det gitte renhetskravet. Tidsforbruk og utbytte er gitt i tabell 4-8. Inntektene for å gjenvinne 2-metoksyetanol ble beregnet, og kostnaden for destillasjonen ble trukket fra, noe som gir den totale fortjenesten av denne separasjonen. Beregninger er gitt i bilag H. Den økonomisk vurderingen av de ulike metodene er gitt i tabell 4-9. I denne tabellen er den totale fortjenesten skalert ut fra startvolumet for hver batch. Dette for å gi et fornuftig sammenligningsgrunnlag mellom gammel og ny kolonne.

Tabell 4-9: Økonomisk analyse for gjenvinningen av 2-metoksyetanol

Kolonne type		Regulering type	Total fortjeneste ved gjenvinning av 2-metoksyetanol *1000 [NOK]
Ny	Vanlig batch	P-midt	23
		PI-midt	22
	Lukket batch	P-midt	22
Gammel	Vanlig batch	P-midt	23
		PI-midt	23
	Lukket batch	P-midt	23

4.3 RESULTATER AV SIMULERING AV STRØM 7

Kolonnedata og startbetingelser er gitt i tabell 4-10.

Tabell 4-10: Kolonnedata og startbetingelser for ny og gammel kolonne

	Ny	Gammel
Antall trinn inkludert koker og kondensator	32	15
Kokervolum	20 m ³	14 m ³
Holdup pr. trinn i kolonnen (konstant)	0,037 kmol	0,037 kmol
Sammensetning i kokeren (fødesammensetning), 1. splitt		
Molbrøk		
Metanol	0,7585	0,7585
Vann	0,0604	0,0604
Isopropanol	0,1811	0,1811
Holdup koker, lukket batch	437,95 kmol	306,16 kmol
Holdup kondensatortanken, lukket batch	1 kmol	1 kmol
Holdup koker, vanlig batch	436,45 kmol	304,65 kmol
Holdup kondenstortank, vanlig batch	2,5 kmol	2,5 kmol
Dampstrøm, 1 splitt (konstant)	121 kmol/h	85 kmol/h
Sammensetning i kokeren, 2. splitt		
Molbrøk		
Vann	0,2501	0,2501
Isopropanol	0,7499	0,7499
Holdup koker, lukket batch	104,95 kmol	73,17 kmol
Holdup kondensatortank, lukket batch	1 kmol	1 kmol
Holdup kokeren, vanlig batch	104,15 kmol	72,37 kmol
Holdup kondensatortank, vanlig batch	1,8 kmol	1,8 kmol
Dampstrøm, 2. splitt (konstant)	96 kmol/h	68 kmol/h

Termodynamiske og fysikalske data er gitt i bilag D.

Regulatorparametrene for ny og gammel kolonne ved separasjon av metanol er gitt i tabell 4-11.

Tabell 4-11: Regulatorparametere og settpunkt for simulering av vanlig og lukket batch destillasjon for ny og gammel kolonne, separasjon av metanol

Regulator type	K_C , ny	K_C , gammel	τ_I [timer]	T_s [K]
P-midt	7,6	5,4	-	345,7
PI-midt*	50,0	50,0	0,5	340,0

* For PI-midt er forsterkningen og integraltiden satt ut far at systemet ikke skal være ustabil, men ikke tunet optimalt. Settpunktet til temperaturen er satt lavere da et høyere settpunkt ga problemer i simuleringen, se diskusjon kap. 5.3.1.

Tabell 4-12 viser hvor mye det var mulig å gjenvinne av metanol, og hvor lang tid dette tar ved de ulike reguleringsmetodene og de to ulike måtene å kjøre kolonnen på. For ny og gammel kolonne var renhet av metanol gitt i molbrøk lik 1,00 ved destillasjonsslutt.

Tabell 4-12: Tidsforbruk og utbytte for simulering til stasjonære forhold for vanlig og lukket batch destillasjon for ny og gammel kolonne, separasjon av metanol

Kolonne type		Regulator type	t [timer]	Utbytte stasjonært [%]
Ny	Vanlig batch	P-midt	17,6	99,2
		PI-midt	17,7	99,2
	Lukket batch	P-midt	17,6	100
		PI-midt	17,7	99,9
Gammel	Vanlig batch	P-midt	18,5	97,2
		PI-midt	18,6	94,1
	Lukket batch	P-midt	17,4	98,2
		PI-midt	17,1	94,8

Fra tabell 4-12 finner man det høyeste utbyttet for ny og gammel kolonne, som gjør at de ulike metodene kan sammenlignes med hensyn på tidsforbruket til et gitt utbytte ved separasjon av metanol. Disse grensene ble satt til 99 % for ny kolonne og til 94 % for gammel kolonne. Renhetskravet er oppfylt i alle tilfellene. Resultatene for denne sammenligningen er gitt i tabell 4-13.

Tabell 4-13: Resultat fra simulering av vanlig og lukket batch destillasjon med P- og PI-regulering i midt for ny og gammel kolonne, separasjon av metanol

Kolonne type		Regulator type	t [timer]
Ny	Vanlig batch	P-midt	13,9
		PI-midt	14,1
	Lukket batch	P-midt	11,5
		PI-midt	11,6
Gammel	Vanlig batch	P-midt	9,7
		PI-midt	15,7
	Lukket batch	P-midt	9,3
		PI-midt	12,1

I simulering av separasjon av isopropanol er det bare blitt brukt P-midt for å regulere temperaturen i kolonne. Dette kommer av at PI-midt ga problemer under simuleringen, noe som er forklart i diskusjonen, kap. 5.3.1. Regulatorparametere for separasjon av isopropanol er gitt i tabell 4-14.

Tabell 4-14: Regulatorparametere og settpunkt for simulering av vanlig og lukket batch destillasjon for ny og gammel kolonne, separasjon av isopropanol

Regulator type	K_C , ny	K_C , gammel	T_s [K]
P-midt	50,5	36,0	354,5

Ved separasjon av isopropanol er renhetskravet i molbrøk gitt av Nycomed til å være 0,987. Destillasjonstiden beregnes da ut fra når dette kravet er oppfylt i kokeren, og utbyttet ble beregnet ved dette tidspunktet. Tidsforbruk og utbytte for separasjon av isopropanol er gitt i tabell 4-15.

Tabell 4-15: Tidsforbruk og utbytte for å oppnå $x_{\text{isopropanol}} = 0,987$ for vanlig og lukket batch destillasjon for ny og gammel kolonne, separasjon av isopropanol

Kolonne type		Regulator type	Tid for å oppnå $x_{\text{isopropanol}} = 0,987$ i koker [timer]	Utbytte av isopropanol ved dette tidspunktet [%]
Ny	Vanlig batch	P-midt	3,3	99,0
	Lukket batch	P-midt	3,3	96,2
Gammel	Vanlig batch	P-midt	3,5	88,7
	Lukket batch	P-midt	3,4	81,9

4.4 ØKONOMISK VURDERING AV STRØM 7

Det ble beregnet en kolonneleiepris for ny og gammel kolonne, bilag I. Denne kolonneleieprisen ble delt på prisen for metanol, og en får da et krav om hvor stort utbytte man trenger pr. time for at destillasjone skal være lønnsom. Beregninger er gitt i bilag H. Resultatene av den økonomiske analysen er gitt i tabell 4-16.

Tabell 4-16: Resultat av simulering med hensyn på en kolonneleie på 1000 NOK for ny kolonne og 500 NOK for gammel kolonne, separasjon av metanol

Kolonne type		Regulator type	t [timer]	Utbytte av metanol [%]
Ny	Vanlig batch	P-midt	7,3	90
		PI-midt	7,3	90
	Lukket batch	P-midt	7,3	90
		PI-midt	7,3	90
Gammel	Vanlig batch	P-midt	8,4	90
		PI-midt	7,3	88
	Lukket batch	P-midt	8,3	90
		PI-midt	7,6	86

Den totale fortjenesten ble beregnet ut fra utbytte av isopropanol ved det gitte renhetskravet. Tidsforbruk og utbytte er gitt i tabell 4-16. Inntektene for å gjenvinne isopropanol ble beregnet, og kostnaden for destillasjonen ble trukket fra, noe som gir den totale fortjenesten av denne separasjonen. Beregninger er gitt i bilag H. Økonomisk vurdering av de ulike metodene er gitt i tabell 4-17. I denne tabellen er den totale fortjenesten også skalert ut fra startvolumet for hver batch. Dette for å gi et fornuftig sammenligningsgrunnlag mellom gammel og ny kolonne.

Tabell 4-17: Økonomisk analyse for gjenvinningen av isopropanol

Kolonne type		Regulering type	Total fortjeneste ved gjenvinning av isopropanol *100 [NOK]
Ny	Vanlig batch	P-midt	8
	Lukket batch	P-midt	7
Gammel	Vanlig batch	P-midt	10
	Lukket batch	P-midt	9

4.5 ØKONOMISK VURDERING AV DET NYE ANLEGGET

De totale investeringskostnadene for det nye anlegget er estimert til å være 34 mill. NOK. Beregninger er vist i bilag J.

Den årlige avkastningen er i bilag K beregnet til å være 9 %.

5 DISKUSJON

5.1 VURDERING AV KOLONNETYPE OG REGULERINGSTYPE

I forbindelse med dette prosjektet ble det utviklet en Matlab modell for batchkolonnen på Nycomed, som kjøres som en vanlig batch kolonne. Ved modellering av den vanlige batch kolonnen blir nivået i kondensatoren regulert med en nivåregulator (P-regulator). Dette er ikke tilfellet for den nye kolonnen, da væskemengden i kondensatoren bestemmes ved at et overskudd av væske går tilbake til kolonnen ved et overløp. Dette gjør at nivået i kondensatoren er konstant, noe som også vil være tilfellet for modellen.

I oppgavebeskrivelsen ble det opplyst at de nye kolonnene på Nycomed kunne kjøres som lukket batch. I etterkant viste det seg at dette ikke var tilfellet, men det vil være små investeringer knyttet til å utvide kolonnen til å kunne kjøres som en lukket batch kolonne. En utvidelse vil omfatte at man kjører tilbakeløpet fra resipienttanken istedet for tilbakeløp fra kondensatoren. Dette kan gjøres ved at det installeres en reflukspumpe mellom resipienttanken og toppen av kolonnen slik at tilbakeløpet nå kommer fra resipienttanken. Det ble derfor også utviklet en Matlab modell for en lukket batch kolonne for å sammenligne denne muligheten med vanlig batch destillasjon. Motivasjonen for å undersøke lukket batch begrunnes i at denne type kolonne kan gi et lavere tidsforbruk. Samtidig gir lukket batch ingen problemer forbundet med at destillasjonen går over for lang tid, da dette fører til en stadig anriking av destillat. Ved vanlig batch kan dette føre til gjennomslag og urent destillat.

På Nycomed reguleres sammensetningen til destillatet ved temperaturregulering i alle kolonnene med P-regulering og temperaturmåling i toppen av kolonnen. Dette er lite gunstig ut fra reguleringshensyn. Et problem som vil være aktuelt er at man trenger et avvik mellom målt temperatur T_m og settpunktet til temperatur T_s for i det hele tatt å få ut et produkt. Dette fører til et stasjonæravvik som er vist i fig. L-2, bilag L. Dersom T_s settes lik T_m vil det ikke komme noe produkt, da reguleringen fører til total reflux. Siden P-regulering i toppen av kolonne trenger et avvik i settpunkt for å fungere fører dette til at man får et avvik i ønsket renhetskrav, noe som gir problemer ved høye renhetskrav da en liten endring / forstyrrelse i temperatur vil før til et urent produkt. En aktuell forstyrrelse vil være små trykkendringer i kolonnen.

Figur L-1 i bilag L viser temperaturprofilen for P-regulering i toppen og midten av kolonne ved vanlig batch destillasjon. Temperaturprofilene viser at ved topp-regulering utnyttes kolonnen i liten grad med tanke på god separasjon. Regulering med temperaturmåling i toppen av kolonnen fører til at separasjonsgrensen ligger høyt oppe i kolonnen, noe som fører til at få trinn benyttes til anrikning av destillatet. Ved bruk av temperaturmåling i midten av kolonnen vil separasjonsgrensen ligge lavere ned i kolonnen, se figur L-1 i bilag L. Dette vil gi en mye bedre utnyttelse av kolonnen da flere trinn brukes til å anrike destillatet. Ved riktig instilling av settpunktet vil ikke regulering i midten av kolonnen føre til problemer med renhet til destillatet, forutsatt at antall trinn er høyt nok for den ønskede renheten i separasjonen.

Ønskes det et robust reguleringsystem, må man regulere ut fra måling av temperatur lengre ned i kolonnen. I alle simuleringene er reguleringen basert på temperaturmåling i midten av kolonnen, hvor det blir brukt P- og/eller PI-regulator. I modellene som er utviklet i Matlab kan temperaturmålingene settes på et valgfritt trinn.

I forbindelse med den nye kolonnen gir reguleringsystemet til Nycomed mulighet til å endre målepunktet i kolonnen. For den gamle kolonnen må det investeres i nye temperaturmålere, siden de gamle kolonnene kun har målepunkter i bunn og topp av kolonnen. Dette kan enkelt implementeres ved at temperaturelementer monteres på kolonneveggen, da dette gir mindre målestøy enn temperaturmålere inne i selve kolonnen.

5.2 VURDERING AV STRØM 0

5.2.1 Vurdering destillasjonssekvensen med hensyn på utbytte og tidsforbruk

En generell trend for separasjon av metanol, tabell 4-3, er at ny kolonne gir et mye større utbytte, 10-12 %, sammenlignet med gammel kolonne. Dette skyldes at settpunktet gitt av ligning (2-12) er for lavt for gammel kolonne. Dette medfører at en del av metanolen blir værende igjen i koker. Økes settpunktet for temperaturen vil det gi et større utbytte med lavere renhet, men renheten vil fortsatt ligge innenfor renhetskravet. Tidsforbruket for å nå stasjonært utbytte avhenger sterkt av type kolonne. Selv om utbyttet for ny kolonne er høyt er mengden metanol i strøm 0 så liten at Nycomed ikke betrakter metanol som et produkt fra strøm 0. Siden det er 2-metoksyetanol som er hovedproduktet fra denne strømmen, må metanolen separeres fra blandingen, og metanol kan dermed betraktes som et delprodukt.

Tabell 4-4 viser at for separasjon av metanol bør ny kolonne kjøres som lukket batch med PI-regulering i midten. Tiden for å oppnå et utbytte på 94 % for lukket batch er 2,3 timer mindre sammenlignet med vanlig batch, PI-regulering i midten av kolonnen. Resultatene i tabell 4-4 viser også at PI-regulering er raskere enn P-regulering.

Fra tabell 4-4 ser vi at gammel kolonne har lavest tidsforbruk for å nå et utbytte på 79 %, ved lukket batch med PI-regulering midt. Det tar 2.9 timer lengre å kjøre gammel kolonne som vanlig batch.

For separasjonen av azeotropen isopropanol/vann, tabell 4-6, har vi ingen produkter å ta hensyn til. Men dette er en separasjon som må kjøres for å gjenvinne 2-metoksyetanol, og derfor er det ønskelig å se hvilken kolonne type som gir lavest tidsforbruk. Denne separasjonen kjøres best som lukket batch med PI-regulering i midt, både for gammel og ny kolonne.

Ved et settpunkt for temperaturen, gitt av ligning (2-12), for PI-midt vanlig batch, fikk vi problemer med at noe av 2-metoksyetanolen ble dratt med opp i resipienttanken. Årsaken til dette er at før regulering ble satt på, ble det bygd opp en temperaturprofil i kolonnen. Når reguleringen settes på blir dette å betrakte som en forstyrrelse, og denne forstyrrelsen blir betydelig med settpunktet gitt av ligning (2-12). Da produktet i denne strømmen er 2-metoksyetanol er dette selvfølgelig ikke ønskelig. For å hindre dette i å skje ble settpunktet satt lavere.

Resultatene i tabell 4-8, for separasjon av azeotropen vann/2-metoksyetanol og 2-metoksyetanol, viser at ny kolonne bør kjøres som vanlig batch, når tidsforbruket for å nå renhetskravet til 2-metoksyetanol i kokeren legges til grunn. Vi ser at utbyttet er markant lavere for PI-midt sammenlignet med P-midt. Dette kommer av at settpunktet for PI-midt er satt betraktelig lavere enn hva ligning (2-12) gir. Settpunktet blir satt lavere på grunn av at vi hadde problemer med å få modellen til å gå med dette settpunktet for temperaturen. Problemet som oppstod var at kokeren ble tømt under simuleringen. Dette kommer trolig av at I-virkningen gjør at tilbakeløpet reguleres for sent i forhold til den konstante dampstrømmen, som er beregnet ut fra antagelse om konstant kokereffekt gjennom hele separasjonssekvensen. Siden P-midt fungerer ved denne kokereffekten vil K_c / τ_I -forholdet være den faktoren som spiller inn.

Resultatene for PI-midt, lukket batch, er her ikke tatt med, da disse ga et meget lavt utbytte. Dette skyldes “undershoot” av nivået i kokeren, med det menes at nivået i kokeren går under stasjonærverdi for så å dra seg inn til stasjonærverdi. Tiden for å oppnå et høyt utbytte med lukket batch, med PI-regulering i midt, vil derfor ta mye lengre tid enn hva tilfellet er ved de andre kolonnetypene. “Undershooten” kunne sannsynligvis vært unngått ved bedre regulering, og da gitt et lavere tidsforbruk for å oppnå et akseptabelt utbytte.

Fra tabell 4-8 ser vi at for gammel kolonne gir P-midt for vanlig og lukket batch omtrent samme utbytte og likt tidsforbruk. Det blir her vanskelig å komme med en konkret anbefaling for valg av kolonne type.

5.2.2 Vurdering med hensyn på økonomi

Nycomed vurderer 2-metoksyetanol som eneste produkt fra strøm 0, derfor vil den økonomiske vurderingen av strøm 0 kun baseres på denne separasjonen. Da er det antatt at alle kostnader ved andre separasjoner er dekket av kolonneleieprisen.

I tabell 4-9 er den totale fortejenesten gitt for gjenvinning av 2-metoksyetanol, skalert ut fra startvolum til batchen for ny og gammel kolonne. Den totale fortejenesten er da lik for alle kolonnetyper som er kjørt.

5.2.3 Samlet vurdering av strøm 0

Dersom man vurderer strøm 0 ut fra tidforbruk og utbytte, anbefales denne sekvensen å kjøres på ny kolonne, det er da antatt at hele sekvenser må kjøres på samme kolonnetype. Siden økonomiske betraktninger av strøm 0 ikke favoriserer den ene kolonnetypen fremfor andre, anbefales det at kolonnen som bør benyttes er lukket batch, da denne gir laveste tidsforbruk for hele sekvensen sett under ett. Det er da ikke lagt vekt på det faktum at vanlig batch gir 1 % høyere utbytte sammenlignet med lukket batch destillasjon, for separasjonen av 2-metoksyetanol. Det viktig å merke seg at det er relativt små forskjeller mellom vanlig og lukket batch.

5.3 VURDERING AV STRØM 7

5.3.1 Vurdering destillasjonssekvensen med hensyn på utbytte og tidsforbruk

En generell trend fra tabell 4-12 er at ny kolonne gir et større stasjonært utbytte ved et lavere tidsforbruk sammenlignet med gammel kolonne.

Ved sammenligning av vanlig og lukket batch destillasjon av metanol i ny kolonne, viser tabell 4-13 at P-midt for lukket batch destillasjon har lavest destillasjonstid for et utbytte på 99 % for metanol. Det er minimal forskjell, 0.1 time, mellom P-midt og PI-midt for lukket batch destillasjon. For vanlig batch destillasjon er det en markant økning i tidsforbruket, 2.5 time, sammenlignet med lukket batch destillasjon. Det vil si at separasjon av metanol i strøm 7 på ny kolonne bør kjøres som lukket batch.

En annen trend er at PI-midt tar lengere tid enn P-midt. Dette kommer av at vi hadde problemer med å få modellen til å gå med settpunktet for temperaturen, gitt av ligning (2-12), som vil være et mer optimalt settpunkt. Dette problemet er diskutert under kap. 5.2.1.

For den gamle kolonnen viser sammenligningen i tabell 4-13 at tidsforbruket for å oppnå et utbytte på 94 % for metanol er mindre for lukket batch destillasjon enn for vanlig batch destillasjon, men forskjellen er mindre enn for ny kolonne. P-midt i lukket batch destillasjon har lavest tidsforbruk, men tidsforbruket økes bare med 0.4 timer for vanlig batch destillasjon med P-midt. For separasjon av metanol på gammel kolonne, strøm 7, er det ikke forskjellen i tidsforbruket for vanlig og lukket batch destillasjon så markant, men det er allikevel en trend i resultatene som gjør at lukket også anbefales i dette tilfellet.

Det er større forskjell mellom P- og PI-midt med hensyn på tidsforbruk til et gitt utbytte innad i samme kolonnetype for gammel enn for ny kolonne. Hovedårsaken til dette er også at settpunktet for temperaturen er lavere for PI- enn for P-regulering, som diskutert for ny kolonne. Dette vil også forklare forskjellen i stasjonært utbytte og tilhørende tidsforbruk gitt i tabell 4-12. Feil i settpunktet vil være mer avgjørende for den gamle kolonnen da denne har færre trinn. I vårt tilfelle hvor settpunktet er for lavt fører dette til at mer av metanolen presses ned i kokeren og utbyttet blir lavere.

I forbindelse med simulering av separasjonen mellom isopropanol og azeotropen isopropanol/vann er det ikke brukt PI-regulering da dette ga problemer i simuleringen. Problemet er det samme som beskrevet for separasjonen av metanol, men siden mengden i kokeren er mye mindre ved denne separasjonen fører dette til at problemet ikke kan løses ved å senke settpunktet på temperaturen. Dessuten er dette en vanskelig separasjon da temperatur forskjellen i kokepunkt mellom azeotropen og isopropanol er liten, 2 °C.

Resultatene for separasjon mellom isopropanol og azeotropen isopropanol/vann i tabell 4-15, viser for ny kolonne at tidsforbruket for å nå renhetskravet til isopropanol i kokeren er det samme, men utbyttet er høyere, 3 %, for vanlig batch destillasjon sammenlignet med lukket batch destillasjon. Dette skyldes en liten “undershoot” av nivået i kokeren, med det menes at nivået i kokeren går under satjonærverdi for så å dra seg inn til stasjonærverdi. “Undershooten” kunne sannsynligvis vært unngått ved bedre regulering, og det er derfor vanskelig å konkludere med hvilken metode som er best for ny kolonne.

For gammel kolonne tar det litt lengere tid for å oppnå renhetskravet sammenlignet med ny kolonne, men utbytte er betraktlig lavere. Siden vanlig batch destillasjon har et høyere utbytte, 7 %, enn lukket batch destillasjon vil dette være en bedre måte å kjøre kolonnen på.

5.3.2 Vurdering med hensyn på økonomi

Nycomed vurderer metanol som eneste produkt fra strøm 7, derfor vil den økonomiske vurderingen av strøm 7 vektlegge denne separasjonen. Da er det antatt at alle kostnader ved andre separasjoner er dekket av kolonneleieprisen.

For ny kolonne, separasjon av metanol, viser tabell 4-16 at destillasjonen bør stoppes etter 7.3 timer da videre destillasjon gir tap. Ved dette tidspunktet gir alle de undersøkte tilfellene likt utbytte, 90 %. Ut fra en økonomisk analyse kan ikke det ene tilfellet anbefalles fremfor det andre.

For gammel kolonne, separasjon av metanol, viser tabell 4-16 at det er minimal forskjell i lønsomhet mellom å kjøre vanlig og lukket batch destillasjon.

Ved sammenligning av ny og gammel kolonne, ser man at for å oppnå samme utbytte av metanol som for ny kolonne tar det en time lengre for gammel kolonne, men den gamle kolonnen drives fortsatt med fortjeneste og tidsforbruket er derfor ikke avgjørende for hva som

er lønsomt. Ut fra utbytte kan vi heller ikke anbefale kolonnetype. Vi må her ta forbehold om usikkerheten i kolonneleieprisene.

Ut fra de totale fortjenestene gitt i tabell 4-17 ser vi at det er veldig lite å hente på denne separasjonen, noe som underbygger at Nycomed ikke betrakter isopropanol som et produkt fra strøm 7. Det økonomiske potensialet for strøm 7 vil da kun innebefatte separasjonen av metanol.

5.3.3 Samlet vurdering av strøm 7

Dersom man vurderer strøm 7 ut fra tidforbruk og utbytte, anbefales også denne sekvensen å kjøres på ny kolonne som lukket batch. Dette kan også forsvares ut fra den økonomiske betraktningen av strøm 7, da denne ikke favoriserer den ene kolonnetypen fremfor andre. Det er også her antatt at hele sekvenser må kjøres på samme kolonnetype. Det er da ikke lagt vekt på det faktum at vanlig batch gir 2,8 % høyere utbytte sammenlignet med lukket batch destillasjon, for separasjonen av isopropanol.

5.4 ØKONOMISK VURDERING AV DET NYE ANLEGGET

Investeringskostnadene på 34 mill.NOK, som er estimert ut fra metode gitt av Nesse [8], stemmer bra overens med de reelle investeringskostnadene, 32 mill.NOK, som det nye anlegget kom på.

Innvesteringsanalysen baserer seg kun på produkter fra strøm 0 og 7. Inntektene baseres på at det nye anlegget fører til at innkjøp av rene løsningsmidler reduseres med 50 %. Det er også sett bort fra inntekt fra salg av iod i kontrastmiddelrester. Selv med disse antagelsene får vi en positiv årlig avkastning på 9 %, noe som viser at investeringen vil være lønsom. Det er verdt å merke seg at andre strømmer kan være mer lønsomme å gjenvinne enn de to vi har sett på, noe som vil øke den årlige avkastningen ytterligere.

5.5 ANBEFALINGER FOR VIDERE ARBEID

Videre arbeid bør innebefatte en optimalisering av hele anlegget. Optimaliseringen bør gå på å finne optimale verdier på regulatorparametere og kokereffekter for hver separasjon i de sekvensene som kjøres.

Det må også utvikles en bedre objektfunksjon til økonomisk vurdering av de ulike sekvensene. Denne anbefalingen begrunnes i at de økonomiske analysene som her er lagt til grunn ikke skiller mellom de ulike kolonnetypene.

6 KONKLUSJON

Det er blitt utført en karakterisering av den utvidete anleggsdelen og en sammenligning med tilsvarende utstyr som eksisterer fra før. Dette er gjort ved at det er utviklet en dynamisk modell for batch destillasjon i Matlab. Denne modellen er brukt til å undersøke hvilken type kolonne strøm 0 og 7 bør kjøres på. De ulike kolonnetypene som er undersøkt er vanlig og lukket batch for ny og gammel kolonne.

Ut fra en vurdering av tidsforbruk og utbytte anbefales det at strøm 0 og 7 kjøres på ny kolonne som lukket batch.

Den økonomiske analysen gir ikke noe entydig svar på hvilken kolonnetype som bør kjøres for strøm 0 og 7. Analysen viser at det er økonomisk lønsomt å gjenvinne 2-metoxyetanol fra strøm 0 og metanol fra strøm 7. Metoden som er benyttet for økonomisk vurdering har en stor grad av usikkerhet.

De totale investeringskostnadene for det nye anlegget er estimert til å være 34 mill. NOK, med en årlig avkastning på 9 %. De estimerte investeringskostnadene stemmer godt overens med de reelle investeringskostnadene.

Trondheim 16.04.99

Ketil Eik

Per Furu

7 LITTERATURLISTE

- [1] McCabe W.L., J.C. Smith, P. Harriott, "Unit Operations of Chemical Engineering", 5th.ed., McGraw-Hill Book Co., USA, 1993
- [2] Skogestad S., "Dynamics and Control of Distillation Columns", Trans. IChemE., Vol. 75, Part A, (1997)
- [3] Treybal R.E., "A Simple Method of Batch Distillation", Chem. Eng., 95-98, (1970)
- [4] Henley J. E., Seader J. D., "Equilibrium-Stage Separation Operations in Chemical Engineering", John Wiley & Sons, USA, 1981
- [5] Gmehling J., Onken U., "Vapor-Liquid Equilibrium Data Collection", Chemistry Data Series, Dechema, Frankfurt am Main, West Germany, 1977.
- [6] Gmehling J., Menke J., Krafczyk J., Fischer K., "Azeotropic Data", Weinheim, 1994.
- [7] CRC, "Handbook of Chemistry and Physics", 78th edition, CRC Press, New York, 1997.
- [8] Nesse N., "Prosjektering av prosessanlegg", Institutt for kjemiteknikk, UNIT/NTH, 1992.
- [9] Timmerhaus P., Peters S. P., "Plant Design and Economics for Chemical Engineers", Fourth edition, McGraw-Hill, Singapore, 1991.
- [10] Skogestad S., B. Wittgens, R. Litto, E. Sørensen, "Multivessel Batch Distillation", AIChE Journal, Vol. 43, No. 4, 971-978, (1997).

SYMBOLLISTE

Symbol	Enhet	Beskrivelse
A_{ij}	cal/mol	Antoine koeffesient
A_i	cal/mol	Wilson koeffesient
B_i	cal/mol	Wilson koeffesient
C_i	cal/mol	Wilson koeffisient
D	kmol/h	Destillat
K_c		Forsterkning
L	kmol/h	Væskestrøm
LC		Nivå regulator
MB	kmol	Holdup koker
MD	kmol	Holdup kondensatortank
MDs	kmol	Settpunkt nivå kondensatortank
MK	kmol	Holdup på trinn n
P	atm	Trykk i kolonnen
p_i^{sat}	mmHg	Metningstrykk komponent i
t	h	Destillasjonstid
TC		Temperatur regulator
T_m	K	Målt temperatur
T_s	K	Settpunkt temperatur regulator
V	kmol/h	Dampstrøm
x_i		Molbrøk væske, komponent i
y_i		Molbrøk damp, komponent i
γ		Aktivitetskoeffisient
τ_I		Integraltid

BILAG A UTSKRIFT AV PROGRAMMET FOR SIMULERING AV VANLIG BATCH KOLONNE

```

% Fil nycobatch.m
% Programmet simulerer en vanlig batch kolonne med nivaaregulering av
% kondensatortanken, og sammensetningsregulering ved hjelp av temperatur.
% Programmet bruker funksjonene sumy.m og ycomp.m av Katrine Hilmen og
% wilsonv.m av Steinar Hauan.
% Kall i matlab:
% Kjoer foerst lukket batch for aa oppnaa en profil i kolonnen
% [t,x]=ode15s('nycobatch',[0 50],A)
% Programmet er laget av Per Furu og Ketil Eik

function xdot = nycobatch(t,A)

global Xglob Tkglob

% Antall trinn inkludert koker og kondensator

NT=32;

% Antall komponenter

NC=3;

% Oevrige data
tk=Tkglob; % Start temperatur (K)
V=121; % Dampstroem (kmol/h)
MD=A((NC*NT)+1); % Holdup kondensator (kmol)
MB=A((NC*NT)+2); % Holdup koker (kmol)
MK=0.037; % Holdup paa hvert trinn i kolonne (kmol)
MDmin=0.001; % Brukes for aa unngaa at kondensatoren gaar tom

% Initsiering av sammensetning
X=A(1:NC*NT);
for i=1:NT
    x(:,i)=X((i-1)*NC+1:i*NC);
end

% Damp-vaeske likevekt (bruker funksjonen wilsonv.m, ycomp.m og sumy.m)

```

```

y=zeros(NC,1,NT);

Tkut=[];
for i=1:NT-1;
Xglob=x(:,i);
Tk=fzero('sumy',tk(i));
Tkut(i)=Tk;
y(:,i)=ycomp(Tk);
Tkut=[Tkut];
end
Tkglob=Tkut;

% Regulering av sammensetningen, temperatur regulator

KC = -50;           % Forsterkning
Tks = 337.75;      % Settpunkt temperatur (K)
err= Tkut(31)-Tks; % Proporsjonalfeil
LOI=0;            % Vaeskestroem (kmol/h)
taui=0.5;        % Integraltid
interr = A((NC*NT)+3); % Integralfeil
LT0 = LOI - KC*err;% - KC/taui*interr; % Regulering av vaeskestroemen
LT=LT0*(1-exp(-(MD/MDmin))) % Brukes for at kondensator ikke skal gaa tom

if LT < 0
    LT = 0.01;
    err = 0; % Skruv av integrasjonen for aa motvirke windup
end

% Dampstroem
i=1:NT-1;
V(i)=V*ones(1,NT-1);

% Vaeskestroem
i=2:NT;
L(i)=LT*ones(1,NT-1);

% Total kondensator
y(:,NT)=x(:,NT);

% Holdup i kolonnen
i=2:NT-1;
M(i)=MK*ones(1,NT-2);

% Holdup i kokeren
MBdot=L(2)-V(1);

% Nivaaregulering av holdup i kondensatortank P-regulering

KCh = 10;

```

```

MDs= 2.5; % kmol
D0= V(NT-1)-L(NT)
errh = MD-MDs;
D= D0 + KCh*errh

if D < 0
    D = 0;
    errh = 0;

end

% Holdup i kondensatoren
MDdot=V(NT-1)-L(NT)-D;

% Dynamiske ligninger (komponentbalanser)
Mxdot=zeros(NC,1,NT);
xdot =zeros(NC,1,NT);

% Kokeren
Mxdot(:,1)= L(2)*x(:,2)-V(1)*y(:,1);
xdot(:,1)=(Mxdot(:,1)-x(:,1)*MBdot)/MB;

% Kolonnen
for i=2:NT-1
    xdot(:,i)=(L(i+1)*x(:,i+1)-L(i)*x(:,i)+V(i-1)*y(:,i-1)-V(i)*y(:,i))/M(i);
end

% Kondensatoren
Mxdot(:,NT) = V(NT-1)*y(:,NT-1)-L(NT)*x(:,NT)-D*x(:,NT);
xdot(:,NT)=(Mxdot(:,NT)-x(:,NT)*MDdot)/MD;

% Utverdier av holdup i koker og kondensator

MDut=MDdot;
MBut=MBdot;

% Integrator i regulatoren
errut=err;

% Utverdier av sammensetningene paa hvert trinn
xdotut=xdot(:);

% Funksjonen returnere en kolonnevektor
(trinn 1 til NT med NC komponenter,MD,MB ,err og D)
xdot=[xdotut;MDut;MBut;errut;D]; % Ved bruk av PI-regulering
% xdot=[xdotut;MDut;MBut;D]; % ved bruk av P-regulering

```

BILAG B UTSKRIFT AV FUNKSJONENE

```
function y = ycomp(Tk)
```

```
% This function returns the vector of vapor compositions at given
% values of temperature (Tk), pressure (P) and liquid composition (X).
```

```
global Xglob Pglob NCglob Rglob Wglob Vglob Aglob
```

```
NC=NCglob;
```

```
A =Aglob;
```

```
P =Pglob;
```

```
X =Xglob;
```

```
% Antoine equation where Psat [mmHg] and temperature Tk [K]
```

```
for i=1:NC
```

```
    log10Psat = A(i,1) - A(i,2) / (Tk-273.15 + A(i,3));
```

```
    Psat(i) = 10^log10Psat;
```

```
end
```

```
% Phase equilibrium where P [atm] and Psat [mmHg]
```

```
gamma=wilsonv(Tk);
```

```
q=Psat' .*X;
```

```
y=q.*gamma./(P*760);
```

```
function y = sumy(Tk);
```

```
% This function returns the vector of differences (1-sumY) at given
```

```
% values of temperature (Tk), pressure (P) and liquid composition (X).
```

```
% FZERO('sumy',value) returns the Tk that gives sumY=1, i.e. when the
```

```
% difference is zero
```

```
global Xglob Pglob NCglob Rglob Wglob Vglob Aglob
```

```
Y=ycomp(Tk);
```

```
y=sum(Y)-1;
```

```
% Fil wilsonv.m
% Funksjonen beregner aktivitetskoeffisientene til vaesken ved
% Wilson metode paa vektorisert form
% Funksjonen er laget av Steinar Hauan

function gamma=wilsonv(Tk)

global Wglob Vglob Xglob Rglob NCglob;

W =Wglob;
V =Vglob;
X =Xglob';
NC=NCglob;
R= Rglob;

% Lager en NCxNC matrise av vektorene V og X

Vmat=V(ones(1,NC),:);
Xmat=X(ones(1,NC),:);

% Vektorisering av en for-loop

Lambda =Vmat./Vmat'.*exp(-W/(R*Tk));
ledd2=sum((Xmat.*Lambda)');
Xs=X./ledd2;
Xsmat=Xs(ones(1,NC),:);
ledd3=sum((Xsmat.*Lambda)');

gamma=(exp(1-log(ledd2)-ledd3))';
```

BILAG C UTSKRIFT AV PROGRAMMET FOR SIMULERING AV LUKKET BATCH KOLONNE

```

% Fil nyco7.m
% Programmet simulerer en lukket batch kolonne med variabel holdup i koker og
% kondensatortank indirekte regulert av sammensetningen som blir regulert
% med en temperatur regulator (P- eller PI-regulator)
% Programmet bruker funksjonen sumy.m, ycomp.m av Katrine Hilmen og wilsonv.m
% av Steinar Hauan
% Kall i matlab:
% Kjoer foerst en av initfilen, se de forskjellige initfilen for de ulike
% stroemmene
% [t,x]=ode15s('nyco7',[0 50],A)
% Programmet er laget av Per Furu og Ketil Eik

function xdot = nyco7(t,A)

global Xglob Tkglob

% Antall trinn inkludert koker og kondensator

NT=32;

% Antall komponenter

NC=3;

% Oevrige data
tk=Tkglob;      % Start temperatur (K)
V=121;         % Dampstroem (kmol/h)
MD=A((NC*NT)+1); % Holdup kondensatortank (kmol)
MB=A((NC*NT)+2); % Holdup koker (kmol)
MK=0.037;      % Holdup paa hvert trinn i kolonne (kmol)
MDmin=1;       % Minimumskarv til mengde i kondensatortank

% Initsiering av sammensetning
X=A(1:NC*NT);
for i=1:NT
    x(:,i)=X((i-1)*NC+1:i*NC);
end

% Damp-vaeske likevekt (bruker funksjonen wilsonv.m, ycomp.m og sumy.m)
y=zeros(NC,1,NT);

Tkut=[];

```

```

for i=1:NT-1;
Xglob=x(:,i);
Tk=fzero('sumy',tk(i));
Tkut(i)=Tk;
y(:,i)=ycomp(Tk);
Tkut=[Tkut];
end
Tkglob=Tkut;

% Regulering av sammensetningen, temperatur regulator

KC = -70;           % Forsterkning
Tks = 337.7;       % Settpunkt temperatur (K)
err= Tkut(16)-Tks; % Proporsjonalfeil
LOI=0;            % Vaeskestroem (kmol/h)
taui=0.5;         % Integraltid
interr = A((NC*NT)+3); % Integralfeil
LT0 = LOI - KC*err - KC/taui*interr; % Regulering av vaeskestroemen
LT=LT0*(1-exp(-(MD/MDmin))) % Brukes for at kondensator ikke skal gaa tom

if LT < 0
  LT = 0.001;
  err = 0; % Skrur av integrasjonen for aa motvirke windup
end

% Dampstroem
i=1:NT-1;
V(i)=V*ones(1,NT-1);

% Vaeskestroem
i=2:NT;
L(i)=LT*ones(1,NT-1);

% Total kondensator
y(:,NT)=x(:,NT);

% Holdup i kolonnen
i=2:NT-1;
M(i)=MK*ones(1,NT-2);

% Holdup i kokeren
MBdot=L(2)-V(1);

% Holdup i kondensatoren
MDdot=V(NT-1)-L(NT);

% Dynamiske ligninger (komponentbalanser)
Mxdot=zeros(NC,1,NT);
xdot =zeros(NC,1,NT);

```

```

% Kokeren
Mxdot(:,1)= L(2)*x(:,2)-V(1)*y(:,1);
xdot(:,1)=(Mxdot(:,1)-x(:,1)*MBdot)/MB;

% Kolonnen
for i=2:NT-1
xdot(:,i)=(L(i+1)*x(:,i+1)-L(i)*x(:,i)+V(i-1)*y(:,i-1)-V(i)*y(:,i))/M(i);
end

% Kondensatoren
Mxdot(:,NT) = V(NT-1)*y(:,NT-1)-L(NT)*x(:,NT);
xdot(:,NT)=(Mxdot(:,NT)-x(:,NT)*MDdot)/MD;

% Utverdier av holdup i koker og kondensator
MDut=MDdot;
MBut=MBdot;

% Integrator i regulatoren
errut=err;

% Utverdier av sammensetningene paa hvert trinn
xdotut=xdot(:);

% Funksjonen returnere en kolonnevektor
% (trinn 1 til NT med NC komponenter,MD,MB og err)
xdot=[xdotut;MDut;MBut;errut]; % ved bruk av PI-regulator

% xdot=[xdotut;MDut;MBut]; % ved bruk av P-regulator

```

BILAG D FYSIKALSKE OG TERMODYNAMISKE DATA

Fysikalske data for komponentene i strøm 0 og strøm 7 ved Nycomed Imaging er gitt i tabell D-1. Molare volum er hentet fra [5] og resten er hentet fra [7].

Tabell D-1 : Fysikalske data for komponentene i strøm 0 og strøm 7

Komponent	Molmasse, [g/mol]	Tetthet, [g/cm ³]	Kokepunkt, [°C]	Molart volum, [ml/mol]	Fordampningsentalpi, [kJ/mol]
Isopropanol	60,1	0,7855	82,3	76,92	39,05
Metanol	32,04	0,7914	64,5	40,73	35,21
Vann	18,02	0,9982	100,0	18,07	40,66
2-Metoksyetanol	76,1	0,9646	124,1	79,25	37,54

Azeotropdata for de aktuelle azeotropene er gitt i tabell D-2, og er hentet fra [6].

Tabell D-2 : Azeotropdata fra hhv. litteratur og simulering

Azeotroper	Kokepunkt fra litt., [°C]	Molbrøk vann i azeotrop, fra litt.	Molbrøk vann i azeotrop, fra sim.	Kokepunkt fra sim., [°C]
vann / isopropanol	80,4	0,3167	0,2887	80,67
vann / 2-metoksyetanol	99,75	0,9490	0,9264	99,44

Termodynamiske data er gitt i tabell D-3 og i tabell D-4, og er hentet fra [5].

Tabell D-3 : Termodynamiske data for komponentene i strøm 0 og strøm 7

Komponenter	Antoine konstanter		
	Isopropanol	8,87829	2010,330
Metanol	8,08097	1582,271	239,726
Vann	8,07131	1730,630	233,426
2-Metoksyetanol	7,84980	1793,982	236,877

Wilsonkoeffisienter for de binære systemene i strøm 0 og strøm 7 ved Nycomed Imaging er gitt i tabell D-4. Wilsonkomponentene for de binære systemene med 2-metoksyetanol er estimert i matlab, bilag G, ut fra likevektsdata generert i Aspen +.

Tabell D-4 : Wilsonkoeffisienter for de binære systemene i strøm 0 og strøm 7

Binært system	Wilsonkoeffisienter	
	W_{12}	W_{21}
Metanol / vann	107,3832	469,5509
Metanol / isopropanol	140,1672	-132,7052
Metanol / 2-metoksyetanol	1306,9	-964,6
vann / isopropanol	1238,9966	437,9789
vann / 2-metoksyetanol	752,503	396,3751
isopropanol / 2-metoksyetanol	1019,5	-431,3

BILAG E INITFILER FOR SIMULERING AV BATCH KOLONNEN

```

% Fil initnyco7.m
% Initfil for stroem 7, foerste splitt, tre komponent blanding av
% metanol, vann, isopropanol
% Komponentene i matrisene : 1 = metanol 2 = vann 3 = isopropanol

global Xglob Pglob NCglob Rglob Wglob Vglob Aglob Tkglob

Rglob=1.98721; % [cal/K mol]

NCglob=3;

Pglob=1;

% Alle prameterer er hentet fra DECHEMA

% Antoine koeffisienter, Psat_i [mmHg] og T [K]

Aglob=[8.08097 1582.271 239.726
      8.07131 1730.630 233.426
      8.87829 2010.330 252.636];

% Wilson koeffisienter ved 1 atm., W_ij [cal/mol]

Wglob=[ 0      107.3832 140.1672
      469.5509  0      1238.9966
      -132.7052 437.9789  0      ];

% Molart volum av rene vaesker [cm^3/mol]

Vglob=[40.73 18.07 76.92 ];

% Initsiering av start vektor for vaeskesammnesetningen x

NT = 32;
zF = [0.7585;0.0604;0.1811]
X=[];
for i=1:NT
  X=[X;zF];
end

% Initsiering av start temperatur

Tkglob=337*ones(1,NT-1)

% Holdup i koker MB og i kondensator MD [kmol]

```

```
MB = 437.79;
MD = 1;

% Startvektor for bruk i nyc07.m

%A=[X' MD MB]    %P-regulator, lukket batch

A=[X' MD MB 0]   %PI-regulator, lukket batch

%A=[X' MD MB 0]  %P-regulator, vanlig batch

%A=[X' MD MB 0 0] %PI-regulator, vanlig batch

% Fil : initnyc072.m
% Initfil for stroem 7, andre splitt, to komponent blanding av
% vann og isopropanol
% Komponenter i matrisen: 1= vann, 2= isopropanol

global Xglob Pglob NCglob Rglob Wglob Vglob Aglob Tkglob

Rglob=1.98721; % [cal/K mol]

NCglob=2;

Pglob=1;

% Alle prameterer er hentet fra DECHEMA

% Antoine koeffisienter, Psat_i [mmHg] og T [K]

Aglob=[8.07131 1730.630 233.426
      8.87829 2010.330 252.636];

% Wilson koeffisienter ved 1 atm., W_ij [cal/mol]

Wglob=[0      1238.9966
      437.9789  0    ];

% Molart volum av rene vaesker [cm^3/mol]

Vglob=[18.07 76.92 ];

% Initsiering av start vektor for vaeskesammnesetningen x

NT = 32;
zF = [0.2501;0.7499]
```

```

X=[];
for i=1:NT
    X=[X;zF];
end

% Initsiering av start temperatur

Tkglob=337*ones(1,NT-1)

% Holdup i koker MB og i kondensator MD [kmol]

MB = 104.95;
MD = 1;

% Startvektor for bruk i nyc07.m eller nycobatch.m

A=[X' MD MB 0] % PI-regulering, lukket batch

%A=[X' MD MB ] % P-regulering, lukket batch

%A=[X' MD MB 0 0] % PI-regulering, vanlig batch

%A=[X' MD MB 0] % P-regulering, vanlig batch

% Initfil for stroem 0, 1. splitt
% 1=Metanol 2= Vann 3=Isopropanol 4=2-Metoxyetanol
global Xglob1 Pglob1 NCglob1 Rglob1 Wglob1 Vglob1 Aglob1 Tkglob1

Rglob1=1.98721;

NCglob1=4;

Pglob1=1;

% Alle prameterer er hentet fra DECHEMA

% Antoine koeffisienter, Psat_i [mmHg] og T [K]

Aglob1=[8.08097 1582.271 239.726
        8.07131 1730.630 233.426
        8.87829 2010.330 252.636
        7.84980 1793.982 236.877 ];

% Wilson koeffisienter ved 1 atm., W_ij [cal/mol]

```

```

Wglob1=[ 0      107.3832  140.1672  1306.9
         469.5509  0      1238.9966  752.503
        -132.7052  437.9789  0      1019.5
        -964.6   396.3751  -431.3   0   ];

```

```
% Molart volum av rene vaesker [cm^3/mol]
```

```
Vglob1=[40.73 18.07 76.92 79.25 ];
```

```
NT = 32;
```

```
zF = [0.16;0.58;0.060;0.20];
```

```
X=[];
```

```
for i=1:NT
```

```
    X=[X;zF];
```

```
end
```

```
Tkglob1=337*ones(1,NT-1)
```

```
A=[X' 5 533]
```

```
% Initfil for stroem 0, 2. splitt
```

```
% 1= Vann 2=Isopropanol 3=2-Metoxyetanol
```

```
global Xglob1 Pglob1 NCglob1 Rglob1 Wglob1 Vglob1 Aglob1 Tkglob1
```

```
Rglob1=1.98721;
```

```
NCglob1=3;
```

```
Pglob1=1;
```

```
% Alle prameterer er hentet fra DECHEMA
```

```
% Antoine koeffisienter, Psat_i [mmHg] og T [K]
```

```
Aglob1=[8.07131 1730.630 233.426
```

```
         8.87829 2010.330 252.636
```

```
         7.84980 1793.982 236.877 ];
```

```
% Wilson koeffisienter ved 1 atm., W_ij [cal/mol]
```

```
Wglob1=[ 0      1238.9966  752.503
```

```
         437.9789  0      1019.5
```

```
         396.3751  -431.3   0   ];
```

```
% Molart volum av rene vaesker [cm^3/mol]
```

```
Vglob1=[18.07 76.92 79.25 ];
```

```
NT = 32;
zF = [0.69;0.07;0.24];
X=[];
for i=1:NT
    X=[X;zF];
end

Tkglob1=337*ones(1,NT-1)
A=[X' 5 446]

% Initfil for stroem 0, 3. splitt
% 1= Vann 3=2-Metoxyetanol
global Xglob1 Pglob1 NCglob1 Rglob1 Wglob1 Vglob1 Aglob1 Tkglob1

Rglob1=1.98721;

NCglob1=2;

Pglob1=1;

% Alle prameterer er hentet fra DECHEMA

% Antoine koeffisienter, Psat_i [mmHg] og T [K]

Aglob1=[8.07131 1730.630 233.426
        7.84980 1793.982 236.877 ];

% Wilson koeffisienter ved 1 atm., W_ij [cal/mol]

Wglob1=[ 0      752.503
        396.3751  0 ];

% Molart volum av rene vaesker [cm^3/mol]

Vglob1=[18.07 79.25 ];

NT = 32;
zF = [0.73;0.27];
X=[];
for i=1:NT
    X=[X;zF];
end

Tkglob1=337*ones(1,NT-1)
A=[X' 5 401]
```

BILAG F BEREGNINGSEKSEMPEL, STRØM 0

Alle fysikalske data er gitt i bilag D.

Til å beregne totale mengder av komponentene i systemet ble det beregnet en middeltetthet til blandingen. Det ble da antatt at det var en lineær sammenheng mellom de ulike komponenters tetthet. Blandingens tetthet blir da:

$$\begin{aligned}\rho_{blanding} &= 0,15 \cdot 0,7914 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3} + 0,30 \cdot 0,9982 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3} + 0,10 \cdot 0,7855 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3} + 0,45 \cdot 0,9646 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3} \\ &= 0,9308 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3} = 930,8 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}\end{aligned}$$

Beregner først for den nye kolonnen.

Beregning av antall mol av hver komponent i fødeblanding i den nye kolonnen:

$$\text{Metanol: } n_{\text{metanol}} = \frac{0,15 \cdot 930,8 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \cdot 20\text{m}^3}{32,04 \frac{\text{kg}}{\text{kmol}}} = 87,15 \text{ kmol}$$

$$\text{Vann: } n_{\text{vann}} = \frac{0,30 \cdot 930,8 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \cdot 20\text{m}^3}{18,02 \frac{\text{kg}}{\text{kmol}}} = 309,92 \text{ kmol}$$

$$\text{Isopropanol: } n_{\text{isopropanol}} = \frac{0,10 \cdot 930,8 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \cdot 20\text{m}^3}{60,1 \frac{\text{kg}}{\text{kmol}}} = 30,98 \text{ kmol}$$

$$\text{2-metoxyetanol: } n_{\text{2-metoxyetanol}} = \frac{0,45 \cdot 930,8 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \cdot 20\text{m}^3}{76,1 \frac{\text{kg}}{\text{kmol}}} = 110,10 \text{ kmol}$$

Total antall mol i fødeblandingen blir da:

$$\begin{aligned} n_{\text{total}} &= n_{\text{metanol}} + n_{\text{vann}} + n_{\text{isopropanol}} + n_{2\text{-metoxyetanol}} \\ &= 87,15 \text{ kmol} + 309,92 \text{ kmol} + 30,98 \text{ kmol} + 110,10 \text{ kmol} \\ &= 538,15 \text{ kmol} \end{aligned}$$

Sammensetningen til fødeblandingen blir da i molbrøk:

$$x_{\text{metanol}} = \frac{87,15 \text{ kmol}}{538,15 \text{ kmol}} = 0,1619$$

$$x_{\text{vann}} = \frac{309,92 \text{ kmol}}{538,15 \text{ kmol}} = 0,5759$$

$$x_{\text{isopropanol}} = \frac{30,98 \text{ kmol}}{538,15 \text{ kmol}} = 0,05757$$

$$x_{2\text{-metoxyetanol}} = \frac{110,10 \text{ kmol}}{538,15 \text{ kmol}} = 0,2046$$

Væskeholdup pr.trinn beregnes ut fra:

$$MK = \frac{50 \times 10^{-3} \text{ m}^3 \cdot \frac{538 \text{ kmol}}{20 \text{ m}^3}}{30} = 0,045 \text{ kmol}$$

Til å beregne dampstrømmen må først fordampningsentalpien til fødeblandingen beregnes.

$$\begin{aligned} \Delta H_{\text{vap}} &= \sum_i y_i \cdot \lambda_i \\ &= (0,3739 \cdot 35,21 + 0,4280 \cdot 40,657 + 0,1356 \cdot 39,05 + 0,0625 \cdot 37,54) \frac{\text{kJ}}{\text{kmol}} \\ &= 38,2 \times 10^3 \frac{\text{kJ}}{\text{kmol}} \end{aligned}$$

Dampstrømmen blir da:

$$V = \frac{1200 \frac{kJ}{s} \cdot 3600 \frac{s}{h}}{38,2 \times 10^3 \frac{kJ}{kmol}} = 113 \frac{kmol}{h}$$

Beregning av mengder etter at de ulike komponenter fjernes.

Total antall mol igjen i koker etter at metanol er fjernet:

$$\begin{aligned} n_{\text{total}} &= n_{\text{vann}} + n_{\text{isopropanol}} + n_{2\text{-metoxyetanol}} \\ &= 309,92 \text{ kmol} + 30,98 \text{ kmol} + 110,10 \text{ kmol} \\ &= 451,00 \text{ kmol} \end{aligned}$$

Sammensetning for den resterende blandingen, som blir sett på som fødeblandingen ved separasjon nr.2, vil bli den samme som beregnet for gammel kolonne.

Total antall mol igjen i koker etter at azeotropen isopropanol / vann er fjernet. All isopropanol blir fjernet ved denne separasjonen:

$$n_{A_z, 1} = \frac{n_{is}}{x_{is, Az}} = \frac{30,98 \text{ kmol}}{0,7113} = 43,55 \text{ kmol}$$

Vann fjernet ved azeotropen:

$$n_{\text{vann}, Az} = n_{A_z, 1} \cdot x_{\text{vann}, Az} = 43,55 \text{ kmol} \cdot 0,2887 = 12,57 \text{ kmol}$$

Antall mol vann igjen etter at azeotropen er fjernet:

$$n_{\text{vann}} = 309,92 \text{ kmol} - 12,57 \text{ kmol} = 297,35 \text{ kmol}$$

Total antall mol igjen i koker etter at metanol og azeotropen isopropanol / vann er fjernet:

$$\begin{aligned} n_{\text{total}, 3} &= n_{\text{vann}} + n_{2\text{-metoxyetanol}} \\ &= 297,35 \text{ kmol} + 110,10 \text{ kmol} \\ &= 407,45 \text{ kmol} \end{aligned}$$

Sammensetningen for den resterende blandingen, som blir sett på som fødeblandingen ved separasjon nr.3, vil også her bli den samme som beregnet for gammel kolonne.

Finner da tilslutt hvor mye 2-metoksyetanol som er igjen i kokeren etter at azeotropen vann / 2-metoksyetanol er fjernet. Alt vann blir fjernet ved denne separasjonen:

$$n_{Az,2} = \frac{n_{vann}}{x_{vann,Az}} = \frac{297,35 \text{ kmol}}{0,9264} = 320,97 \text{ kmol}$$

2-metoksyetanol fjernet ved azeotropen:

$$n_{2\text{-metoksyetanol,Az}} = n_{Az,2} \cdot x_{2\text{-metoksyetanol,Az}} = 320,97 \text{ kmol} \cdot 0,0736 = 23,65 \text{ kmol}$$

Antall mol 2-metoksyetanol igjen etter at azeotropen er fjernet:

$$n_{2\text{-metoksyetanol}} = 110,10 \text{ kmol} - 23,65 \text{ kmol} = 86,45 \text{ kmol}$$

Beregningene for gammel kolonne.

Finner antall mol av hver komponent i fødeblandingen i den gamle kolonnen:

$$\text{Metanol: } n_{\text{metanol}} = \frac{0,15 \cdot 930,8 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \cdot 14 \text{ m}^3}{32,04 \frac{\text{kg}}{\text{kmol}}} = 61,01 \text{ kmol}$$

$$\text{Vann: } n_{\text{vann}} = \frac{0,30 \cdot 930,8 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \cdot 14 \text{ m}^3}{18,02 \frac{\text{kg}}{\text{kmol}}} = 216,95 \text{ kmol}$$

$$\text{Isopropanol: } n_{\text{isopropanol}} = \frac{0,10 \cdot 930,8 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \cdot 14 \text{ m}^3}{60,09 \frac{\text{kg}}{\text{kmol}}} = 21,69 \text{ kmol}$$

$$\text{2-metoksyetanol: } n_{2\text{-metoksyetanol}} = \frac{0,45 \cdot 930,8 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \cdot 14 \text{ m}^3}{76,09 \frac{\text{kg}}{\text{kmol}}} = 77,07 \text{ kmol}$$

Total antall mol i fødeblandingen blir da:

$$\begin{aligned} n_{\text{total}} &= n_{\text{metanol}} + n_{\text{vann}} + n_{\text{isopropanol}} + n_{\text{2-metoxyetanol}} \\ &= 61,01 \text{ kmol} + 216,95 \text{ kmol} + 21,69 \text{ kmol} + 77,07 \text{ kmol} \\ &= 376,72 \text{ kmol} \end{aligned}$$

Sammensetningen til fødeblandingen blir her selvfølgelig den samme som for den nye kolonnen.

Væskeholdup pr.trinn:

$$MK = \frac{22 \times 10^{-3} \text{ m}^3 \cdot \frac{377 \text{ kmol}}{14 \text{ m}^3}}{13} = 0,045 \text{ kmol}$$

Til å beregne dampstrømmen må først fordampningsentalpien til fødeblandingen beregnes.

$$\begin{aligned} \Delta H_{\text{vap}} &= \sum_i y_i \cdot \lambda_i \\ &= (0,3739 \cdot 35,21 + 0,4280 \cdot 40,657 + 0,1356 \cdot 39,05 + 0,0625 \cdot 37,54) \frac{\text{kJ}}{\text{kmol}} \\ &= 38,2 \times 10^3 \frac{\text{kJ}}{\text{kmol}} \end{aligned}$$

Dampstrømmen blir da:

$$V = \frac{850 \frac{\text{kJ}}{\text{s}} \cdot 3600 \frac{\text{s}}{\text{h}}}{38,2 \times 10^3 \frac{\text{kJ}}{\text{kmol}}} = 80 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Beregning av mengder etter at de ulike komponenter fjernes.

Total antall mol igjen i koker etter at metanol er fjernet:

$$\begin{aligned} n_{\text{total},2} &= n_{\text{vann}} + n_{\text{isopropanol}} + n_{\text{2-metoxyetanol}} \\ &= 216,95 \text{ kmol} + 21,69 \text{ kmol} + 77,07 \text{ kmol} \\ &= 315,71 \text{ kmol} \end{aligned}$$

Det gir følgende sammensetning for den resterende blandingen, som blir sett på som fødeblandingen ved separasjon nr.2.

$$x_{\text{vann}} = \frac{216,95 \text{ kmol}}{315,71 \text{ kmol}} = 0,6872$$

$$x_{\text{isopropanol}} = \frac{21,69 \text{ kmol}}{315,71 \text{ kmol}} = 0,06870$$

$$x_{2\text{-metoxyetanol}} = \frac{77,07 \text{ kmol}}{315,71 \text{ kmol}} = 0,2441$$

Total antall mol igjen i koker etter at azeotropen isopropanol / vann er fjernet. All isopropanol blir fjernet ved denne separasjonen:

$$n_{A_z, 1} = \frac{n_{is}}{x_{is, Az}} = \frac{21,69 \text{ kmol}}{0,7113} = 30,49 \text{ kmol}$$

Vann fjernet ved azeotropen:

$$n_{\text{vann}, Az} = n_{A_z, 1} \cdot x_{\text{vann}, Az} = 30,49 \text{ kmol} \cdot 0,2887 = 8,80 \text{ kmol}$$

Antall mol vann igjen etter at azeotropen er fjernet:

$$n_{\text{vann}} = 216,95 \text{ kmol} - 8,80 \text{ kmol} = 208,15 \text{ kmol}$$

Total antall mol igjen i koker etter at metanol og azeotropen isopropanol / vann er fjernet:

$$\begin{aligned} n_{\text{total}, 3} &= n_{\text{vann}} + n_{2\text{-metoxyetanol}} \\ &= 208,15 \text{ kmol} + 77,07 \text{ kmol} \\ &= 285,22 \text{ kmol} \end{aligned}$$

Det gir følgende sammensetning for den resterende blandingen, som blir sett på som fødeblandingen ved separasjon nr.3.

$$x_{\text{vann}} = \frac{208,15 \text{ kmol}}{285,22 \text{ kmol}} = 0,7298$$

$$x_{2\text{-metoxyetanol}} = \frac{77,07 \text{ kmol}}{285,22 \text{ kmol}} = 0,2702$$

Finner da tilslutt hvor mye 2-metoxyetanol som er igjen i kokeren etter at azeotropen vann / 2-metoxyetanol er fjernet. Alt vann blir fjernet ved denne separasjonen:

$$n_{Az,2} = \frac{n_{vann}}{x_{vann,Az}} = \frac{208,15 \text{ kmol}}{0,9264} = 224,69 \text{ kmol}$$

2-metoxyetanol fjernet ved azeotropen:

$$n_{2\text{-metoxyetanol},Az} = n_{Az,2} \cdot x_{2\text{-metoxyetanol},Az} = 224,69 \text{ kmol} \cdot 0,0736 = 16,54 \text{ kmol}$$

Antall mol 2-metoxyetanol igjen i koker etter at azeotropen er fjernet:

$$n_{2\text{-metoxyetanol}} = 77,07, \text{ kmol} - 16,54, \text{ kmol} = 60,53 \text{ kmol}$$

BILAG G UTSKRIFT AV PROGRAMKODE FOR BEREGNING AV WILSON KOEFFISIENTER

```
% Fil initvannw.m
% Initfil for aa bergene Wilson koeffisientene til systemet
% 2-metoxyetanol/ vann
% Komponenten i matrisene: 1 = 2-metoxyetanol 2 = vann

global Xglob Pglob NCglob Rglob Wglob Vglob Aglob Tkglob

Rglob=1.98721;

NCglob=2;

Pglob=1;

% Alle prameterer er hentet fra DECHEMA

% Antoine koeffisienter, Psat_i [mmHg] og T [K]

Aglob=[7.84980 1793.982 236.877
      8.07131 1730.630 233.426];

% Molart volum av rene vaesker [cm^3/mol]

Vglob=[79.25 18.07 ];

% Fil wvann.m
% Funksjonen beregner Wilsonparametere for sytemet
% 2-metoxyetanol/vann
% Inn data er damp/vaeske sammensetninger for 2-metoxyetanol/vann
% som er generert i Aspen
% Programmet bruker funksjonen fmins,og et kavdratisk avvik
% Funksjonen bruker funksjonen ycompw.m og wilsonvw.m, dette er funksjoner
% som tar inn en sammensetningsvektor x og temperaturen T
% Start av programmet : x=fmins('wiso',W)
% W er en 2x2 matrise som gir start parameter for bergningene

function f = wvann(W)

global Wglob
Wglob=[0 W(1);W(2) 0]
```

% trinn 1

T1= 116.7271+273.15;
x1= [0.875; 0.125];
y1= 0.6875;
y_{calc1}=y_{compw}(T1,x1)

% trinn 2

T2= 111.1147+273.15;
x2= [0.75; 0.25];
y2= 0.4940;
y_{calc2}=y_{compw}(T2,x2)

% trinn 3

T3= 106.9411+273.15;
x3= [0.625; 0.375];
y3= 0.3635;
y_{calc3}=y_{compw}(T3,x3)

% trinn 4

T4= 103.8477+273.15;
x4= [0.5; 0.5];
y4= 0.2707;
y_{calc4}=y_{compw}(T4,x4)

% trinn 5

T5= 101.6456+273.15;
x5= [0.375; 0.625];
y5= 0.2023;
y_{calc5}=y_{compw}(T5,x5)

% trinn 6

T6= 100.4549+273.15;
x6=[0.275;0.725];
y6= 0.1593;
y_{calc6}=y_{compw}(T6,x6)

% trinn 7

T7= 99.50169+273.15;
x7=[0.125;0.875];
y7= 0.1015;
y_{calc7}=y_{compw}(T7,x7)

```
% Beregner kvadratavviket
```

```
f=(y1-ycalc1(1))^2+(y2-ycalc2(1))^2+(y3-ycalc3(1))^2+(y4-ycalc4(1))^2+(y5-
ycalc5(1))^2+(y6-ycalc6(1))^2+(y6-ycalc6(1))^2 ;
```

```
% Fil initisow.m
```

```
% Initfilfor aa beregne Wilson koeffisientene til systemet
```

```
% 2-metoxyetanol/isopropanol
```

```
% Komponenten i matrisene: 1 = 2-metoxyetanol 2 = isopropanol
```

```
global Xglob Pglob NCglob Rglob Wglob Vglob Aglob Tkglob
```

```
Rglob=1.98721;
```

```
NCglob=2;
```

```
Pglob=1;
```

```
% Alle prameterer er hentet fra DECHEMA
```

```
% Antoine koeffisienter, Psat_i [mmHg] og T [K]
```

```
Aglob=[7.84980 1793.982 236.877
8.87829 2010.330 252.636];
```

```
% Molart volum av rene vaesker [cm^3/mol]
```

```
Vglob=[79.25 76.92 ];
```

```
% Fil wiso.m
```

```
% Funksjonen beregner Wilsonparametere for sytemet
```

```
% 2-metoxyetanol/isopropanol
```

```
% Inn data er damp/vaeske sammensetninger for 2-metoxyetanol/isopropanol
```

```
% som er generert i Aspen
```

```
% Programmet bruker funksjonen fmins,og et kvadratisk avvik
```

```
% Funksjonen bruker funksjonen ycompw.m og wilsonvw.m, dette er funksjoner
```

```
% som tar inn en sammensetningsvektor x og temperaturen T
```

```
% Start av programmet : x=fmins('wiso',W)
```

```
% W er en 2x2 matrise som gir start parameter for bergningene
```

```
function f = wiso(W)
```

```
global Wglob
```

```
Wglob=[0 W(1);W(2) 0]
```

% trinn 1

T1= 383.941;
x1= [0.875; 0.125];
y1= 1-0.4266;
ycalc1=ycompw(T1,x1)

% trinn 2

T2= 371.68756;
x2= [0.625; 0.375];
y2= 0.2840;
ycalc2=ycompw(T2,x2)

% trinn 3

T3= 367.59374;
x3= [0.5; 0.5];
y3= 0.2011;
ycalc3=ycompw(T3,x3)

% trinn 4

T4= 364.05734;
x4= [0.375; 0.625];
y4= 0.1349;
ycalc4=ycompw(T4,x4)

% trinn 5

T5= 358.09155;
x5= [0.125; 0.875];
y5= 0.036;
ycalc5=ycompw(T5,x5)

% trinn 6

T6= 376.7462;
x6=[0.75;0.25];
y6= 0.39547;
ycalc6=ycompw(T6,x6)

% trinn 7

T7= 360.9142;
x7=[0.25;0.75];
y7= 0.08072;
ycalc7=ycompw(T7,x7)

```
% Beregner kvadratavviket
```

```
f=(y1-ycalc1(1))^2+(y2-ycalc2(1))^2+(y3-ycalc3(1))^2+(y4-ycalc4(1))^2+(y5-ycalc5(1))^2+(y6-ycalc6(1))^2 ;
```

```
% Fil initmetw.m
```

```
% Initfilfor aa beregne Wilson koeffisientene til systemet
```

```
% 2-metoxyetanol/metanol
```

```
% Komponenten i matrisene: 1 = 2-metoxyetanol 2 = metanol
```

```
global Xglob Pglob NCglob Rglob Wglob Vglob Aglob Tkglob
```

```
Rglob=1.98721;
```

```
NCglob=2;
```

```
Pglob=1;
```

```
% Alle prameterer er hentet fra DECHEMA
```

```
% Antoine koeffisienter, Psat_i [mmHg] og T [K]
```

```
Aglob=[7.84980 1793.982 236.877  
8.08097 1582.271 239.726];
```

```
% Molart volum av rene vaesker [cm^3/mol]
```

```
Vglob=[79.25 40.73 ];
```

```
% Fil wmet.m
```

```
% Funksjonen beregner Wilsonparametere for sytemet
```

```
% 2-metoxyetanol/metanol
```

```
% Inn data er damp/vaeske sammensetninger for 2-metoxyetanol/metanol
```

```
% som er generert i Aspen
```

```
% Programmet bruker funksjonen fmins,og et kvadratisk avvik
```

```
% Funksjonen bruker funksjonen ycompw.m og wilsonvw.m, dette er funksjoner
```

```
% som tar inn en sammensetningsvektor x og temperaturen T
```

```
% Start av programmet : x=fmins('wiso',W)
```

```
% W er en 2x2 matrise som gir start parameter for bergningene
```

```
function f = wmet(W)
```

```
global Wglob
```

```
Wglob=[0 W(1);W(2) 0]
```

% trinn 1

T1= 106.9186+273.15
x1= [0.875; 0.125];
y1= 0.4973;
ycalc1=ycompw(T1,x1)

% trinn 2

T2= 95.37598+273.15;
x2= [0.75; 0.25];
y2= 0.2834;
ycalc2=ycompw(T2,x2)

% trinn 3

T3= 87.04459+273.15;
x3= [0.625; 0.375];
y3= 0.1721;
ycalc3=ycompw(T3,x3)

% trinn 4

T4= 80.63078+273.15;
x4= [0.5; 0.5];
y4= 0.1063;
ycalc4=ycompw(T4,x4)

% trinn 5

T5= 75.47468+273.15;
x5= [0.375; 0.625];
y5= 0.06403;
ycalc5=ycompw(T5,x5)

% trinn 6

T6= 71.99926+273.15;
x6=[0.275;0.725];
y6= 0.04024;
ycalc6=ycompw(T6,x6)

% trinn 7

T7= 67.58888+273.15;
x7=[0.125;0.875];
y7= 0.01491;
ycalc7=ycompw(T7,x7)

```
% Beregner kvadratavviket
```

```
f=(y1-ycalc1(1))^2+(y2-ycalc2(1))^2+(y3-ycalc3(1))^2+(y4-ycalc4(1))^2+(y5-
ycalc5(1))^2+(y6-ycalc6(1))^2+(y6-ycalc6(1))^2 ;
```

```
% Fil ycompw.m
```

```
% Funksjonen brukes for aa generere Wilsonkoeffisienter
```

```
function y = ycompw(Tk,x)
```

```
% This function returns the vector of vapor compositions at given
```

```
% values of temperature (Tk), pressure (P) and liquid composition (X).
```

```
global Xglob Pglob NCglob Rglob Wglob Vglob Aglob
```

```
NC=NCglob;
```

```
A =Aglob;
```

```
P =Pglob;
```

```
% Antoine equation where Psat [mmHg] and temperature Tk [K]
```

```
for i=1:NC
```

```
log10Psat = A(i,1) - A(i,2) / (Tk-273.15 + A(i,3));
```

```
Psat(i) = 10^log10Psat;
```

```
end
```

```
% Phase equilibrium where P [atm] and Psat [mmHg]
```

```
gamma=wilsonv(Tk,x);
```

```
q=Psat' .*x;
```

```
y=q.*gamma./(P*760);
```

```
% Fil wilsonvw.m
```

```
% Funksjonen brukes for aa generere Wilsonkoeffisienter
```

```
% Funksjonen beregner aktivitetskoeffisientene til vaesken ved
```

```
% Wilson metode paa vektorisert form
```

```
% Funksjonen er laget av Steinar Hauan
```

```
function gamma=wilsonvw(Tk,x)
```

```
global Wglob Vglob Xglob Rglob NCglob;
```

```
W =Wglob;
```

```
V =Vglob;
```

```
X=x';
```

```
NC=NCglob;
```

```
R= Rglob;
```

```
% Lager en NCxNC matrise av vektorene V og X

Vmat=V(ones(1,NC),:);
Xmat=X(ones(1,NC),:);

% Vektorisering av en for-loop

Lambda =Vmat./Vmat'.*exp(-W/(R*Tk));
ledd2=sum((Xmat.*Lambda)');
Xs=X./ledd2;
Xsmat=Xs(ones(1,NC),:);
ledd3=sum((Xsmat.*Lambda)');

gamma=(exp(1-log(ledd2)-ledd3))';

% Fil sumyw.m
% Funksjonen brukes for aa generere Wilsonkoeffisienter
function y = sumyw(Tk,x);

% This function returns the vector of differences (1-sumY) at given
% values of temperature (Tk), pressure (P) and liquid composition (X).

% FZERO('sumy',value) returns the Tk that gives sumY=1, i.e. when the
% difference is zero

global Xglob Pglob NCglob Rglob Wglob Vglob Aglob

Y=ycomp(Tk,x);
y=sum(Y)-1;
```

BILAG H BERGNINGSEKSEMPEL AV ØKONOMISK VURDERING AV STRØM 0 OG 7

Kolonneleie prisen er beregnet i bilag I, og gitt i tabell H-1.

Tabell H-1 : Kolonneleiepris

Kolonnetype	Kolonneleiepris [NOK/time]
Ny	1000
Gammel	500

Ut fra kolonneleieprisen beregnes det et utbytte pr. time som må være oppfylt for at separasjonen skal være lønsom. Dette lønsomhetskravet er gitt av ligning (H-1)

$$\text{Lønsomhetskrav} = \frac{\text{Kolonneleiepris [NOK/time]}}{\text{Pris på produkt [NOK/kmol]}} \quad (\text{H-1})$$

Lønsomhetskravet for strøm 7, separasjon av metanol er gitt i tabell H-2

Tabell H-2 : Lønsomhetskrav for separasjon av metanol, strøm 7

Kolonnetype	Lønsomhetskrav [kmol/time]
Ny	20,6
Gammel	10,3

Beregningseksempel for beregning av lønsomhetskrav er gitt for strøm 7, separasjon av metanol på ny kolonne, vanlig batch med P-midt regulering.

Lønsomhetskravet for ny kolonne gitt av tabell H-2 til å være 20,6 kmol/h. Ut fra resultatene av simuleringen finner man grensen for når dette kravet ikke lenger gjelder. Dette ble funnet til å være 7,3 timer, da forskjellen mellom utbytte på 7,3 timer og 6,3 timer var på 20,6. Dette er beregnet ved lineær interpolasjon av utskrift fra resultatene av simuleringen. Det blir så beregnet et utbytte ved dette tidspunktet prosentvis fra det teoretiske, ligning (H-2)

$$\text{Utbytte} = \frac{\text{Utbytte ved det gitte lønsomhetskravet}}{\text{Teoretisk utbytte}} = \frac{298,8 \text{ kmol}}{332,8 \text{ kmol}} = 90\% \quad (\text{H-2})$$

Til å beregne det økonomiske potensialet for produkt som blir igjen i koker ved endt destillasjon, er følgende metode benyttet.

Metoden benytter tid og utbytte det tar å nå en renhet som tilsvarer renhetskravet. Dette pga. videre destillasjon gjør at tidsforbruket øker, samtidig som utbyttet går ned. Det ideelle vil være å stoppe destillasjonen når renhetskravet oppnås i koker. Tiden det vil ta å dampe av produktet er her tatt med, siden alle produkt blir tatt ut i topp. Tilslutt ble fortjenesten til den nye kolonnen skalert ned, slik at verdiene for ny og gammel kolonne blir sammenlignbare, her ble startvolumene for batch på hhv. ny og gammel kolonne benyttet som skaleringsfaktor.

Som eksempel for beregningen er tilfellet for vanlig batch, separasjon av 2-metoksyetanol, fra strøm 0 på ny kolonne, P-regulering valgt.

Tid og utbytte avlest ved renhet lik renhetskrav:

Tabell H-3 : Tid og utbytte avlest ved renhet lik renhetskrav

Tidsforbruk	Utbytte
7,23	87,31

Totalt tidsforbruk for destillasjonen blir da:

$$t = t_{renhet} + \frac{MB}{V} = 7,23 + \frac{87,31}{108} = 8,04 \text{ timer}$$

Total fortjeneste blir da:

$$\text{Total inntekt} = \text{Pris på produkt} \times \text{utbytte} = 87,31 \text{ kmol} \times 461,5 \frac{\text{kr}}{\text{kmol}} = 40293 \text{ kr}$$

Total fortjeneste blir da etter at kolonneleieutgiften trekkes fra inntekten:

$$\text{Total fortjeneste} = \text{Total inntekt} - \text{kolonneleieutgift} = 40293 - 8040 = 32253 \text{ NOK}$$

Dette ble så skalert ned slik at det ble direkte sammenlignbart med gammel kolonne.

$$\text{Total fortjeneste skalert} = \text{Total fortjeneste} \times 0,7 = 32253 \times 0,7 = 22577 \text{ NOK}$$

BILAG I BEREKNING AV KOLONNELEIEPRIS

Kolonneleieprisen for ny kolonne er estimert ut fra metode gitt i Nesse [8] med følgende antagelser:

- 10 års nedbetalingstid
- Rentefot på 7%
- Døgnkontinuerlig drift i 300 døgn pr. år
- Operatørene går femskift, 2 operatører pr. skift
- Vedlikeholds- og forbruksmaterialkostnader 5% av investeringskostnader pr. år
- Avskrivningen er flat over 10 år

Ingen energikostnad da damp produseres i fyrhus, ved forbrenning av løsningsmidler som ikke kan brukes i prosessen igjen eller selges, dette vil i hovedsak bestå av azeotrope blandinger

Estimatet for kolonneleieprisen gitt i kr / time blir da:

Kolonnen vil i lengre perioder ikke være i effektiv drift pga. forskjellige årsaker. Dette antas å dekkes ved å legge til 350 kr pr. time til driftskostnadene.

Kolonneleieprisen for en gammel kolonne ble estimert til å være 50% av kolonneleieprisen for ny kolonne. Dette er et meget grovt anslag, men dette ble gjort da informasjonen om de gamle kolonnene ikke var tilstrekkelige til å foreta et estimeringsberegning ut fra Nesse's metode.

Kolonneleieprisene er gitt i tabell I-1.

Tabell I-1 : Kolonneleiepriser for gammel og ny kolonne

Kolonne	Kolonneleiepris, [kr / time]
Ny	1000
Gammel	500

Siden simuleringene baserer seg på mol som mengdeenhet ble prisene for løsemidler gjort om til kr / kmol. Disse prisene er grunnlaget til bestemmelsen av når man bør stoppe destillasjonen økonomisk sett. Disse prisene er gitt i tabell I-2.

Tabell I-2 : Priser på komponentene i kr / kmol

Komponent	Pris, [kr / kmol]
Metanol	48,6
Isopropanol	321,3
2-metoxyetanol	461,5

BILAG J ESTIMERING AV INNVESTERINGSKOSTNADER

Innvesteringskostnadene for det nye anlegget er estimert ut fra metode gitt i Nesse [8] med følgende antagelser:

- For komponenter som er i direkte kontakt med løsningsmiddel gjelder estimatene for syrefast stål
- Fyllmaterialet er estimert ut fra pris for intalox metall pakning
- Estimatet for kjel er hentet fra Timmerhaus og Peters [9]
- Prisindekser benyttet er hentet fra statistisk sentralbyrå den 23.03.99, og er gitt i tabell J-1.

Tabell J-1 : Prisindekser fra statistisk sentralbyrå den 23.03.99

År som basis	Prisindeks
1981	188
1990	150

Valutakurser benyttet er hentet fra Dagens Næringsliv 23.03.99, og er gitt i tabell J-2.

Tabell J-2 : Valutakurser fra Dagens Næringsliv den 23.03.99

Valuta	kr/valutaenhet
Am. dollar	7,8
Eng. pund	12,7

BILAG K INVESTERINGSANALYSE AV DET NYE ANLEGGET

For å foreta en investeringsanalyse må man estimere inntekter, eller rettere sagt hvor mye som kan spares med det nye anlegget. I investeringsanalysen for det nye anlegget har vi anslått den totale kapasitetsøkningen, dvs. et overslag på hvor mye innkjøpet av løsningsmiddel vil gå ned pga. det nye anlegget. Innsparingen er her estimert ut fra priser gitt av Nycomed for de aktuelle løsningsmidlene. Beregningen av besparelsen av løsningsmiddelinnkjøp er basert på følgende antagelser.

- Ingen tap av løsningsmiddel fra produksjonen til gjenvinningsanlegget, altså et lukket system
- Ser bort fra salg
- At fyrhus drives av azeotropiske blandinger
- Ikke tatt hensyn til at Butanol også er en komponent, ser kun på besparelser i innkjøp av de tre komponentene metanol, isopropanol og 2-metoxyetanol
- Det nye anlegget gjør at behovet for innkjøp av rene komponenter senkes med 50 %

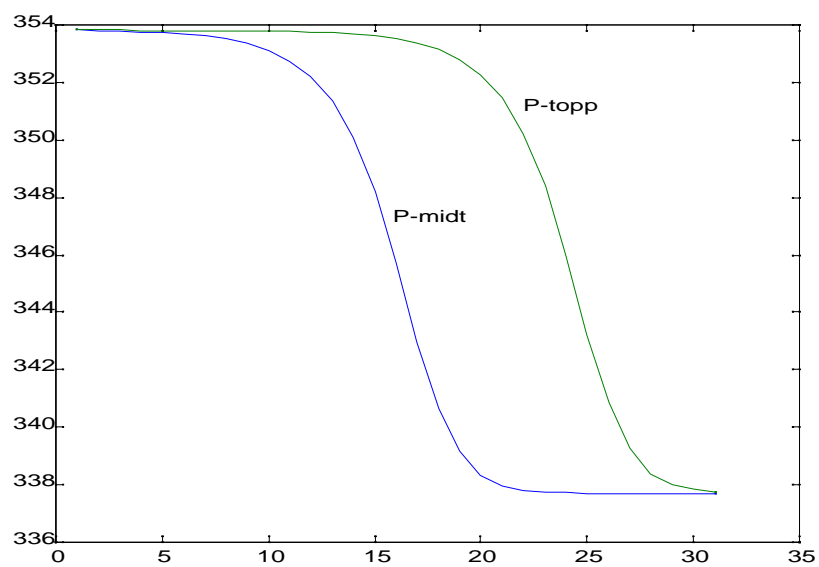
Beregner besparelse av løsningsmiddelinnkjøp

Beregninger av driftskostnader er vist i bilag I, og er funnet til å være 9308*1000 NOK.

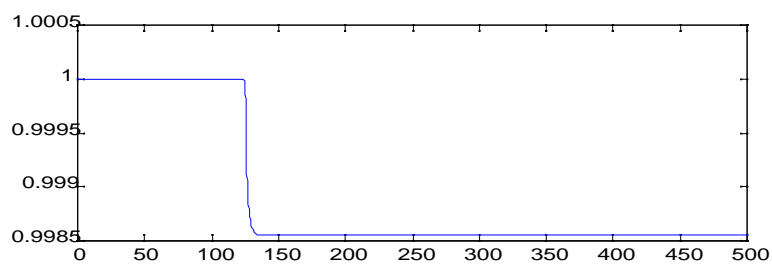
Årlig investeringsavkastning, gitt av Nesse [8], blir da

$$\text{ROI} = \frac{\text{Netto inntekt}}{\text{Innvestering}} \times 100 \% = \frac{2980}{34000} \times 100 \% = 8,8 \% \quad (\text{K-1})$$

BILAG L PLOTT AV TEMPERATURPROFIL OG STASJONÆRAVVIK



Figur L-1: Plott av temperaturprofil med P-topp og P-midt



Figur L-2: Plott av stasjonærravvik ved P-regulering