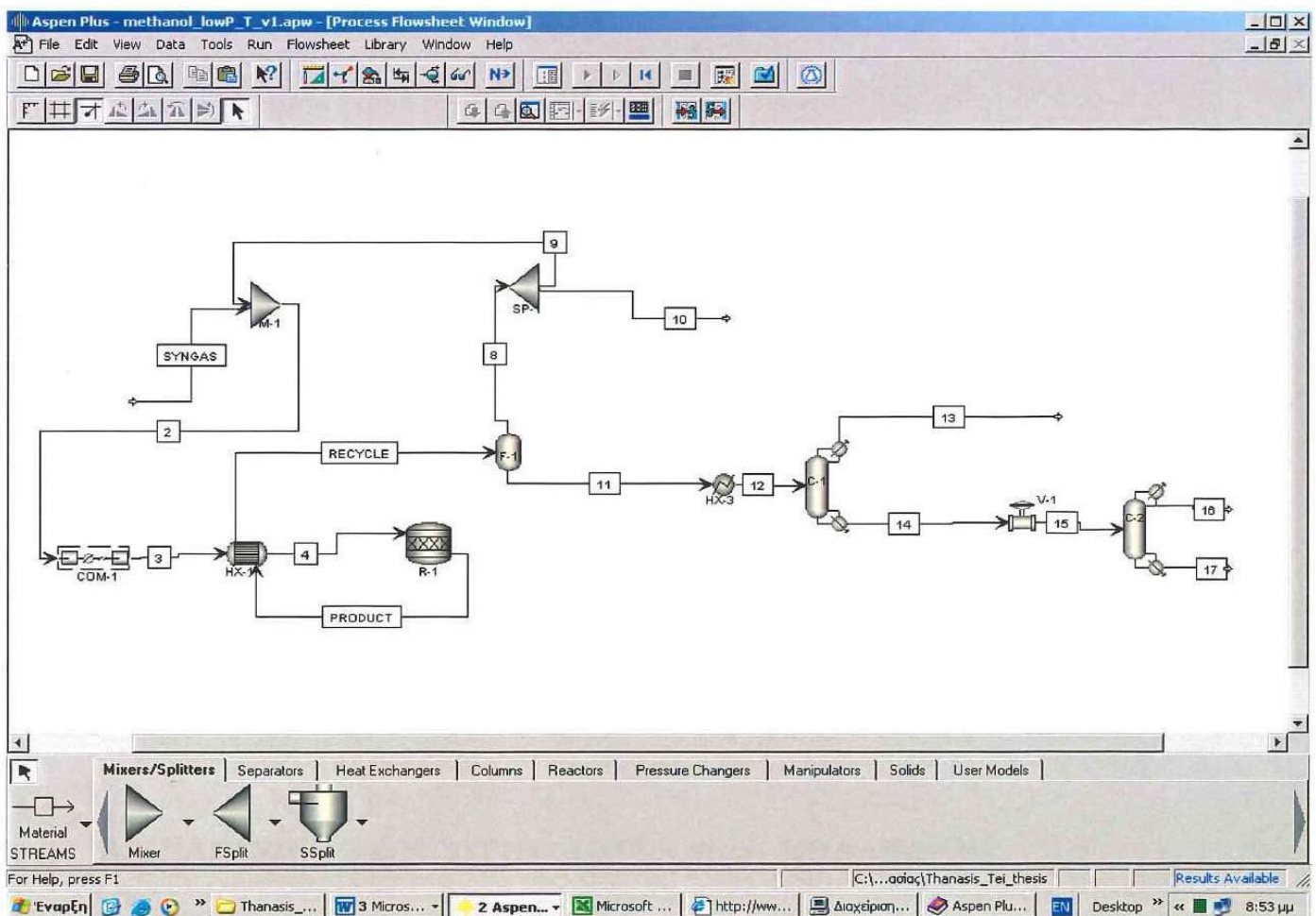


ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

«ΣΥΓΚΡΙΣΗ ΒΙΟΜΗΧΑΝΙΚΗΣ ΔΙΕΡΓΑΣΙΑΣ  
ΠΑΡΑΓΩΓΗΣ ΜΕΘΑΝΟΛΗΣ ΥΨΗΛΗΣ ΚΑΙ ΧΑΜΗΛΗΣ  
ΠΙΕΣΗΣ-ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ ΚΑΙ ΟΙΚΟΝΟΜΙΚΗ  
ΑΝΑΛΥΣΗ»



ΕΠΙΒΛΕΠΩΝ ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ: ΠΕΤΡΟΣ Π. ΠΗΛΑΒΑΚΗΣ

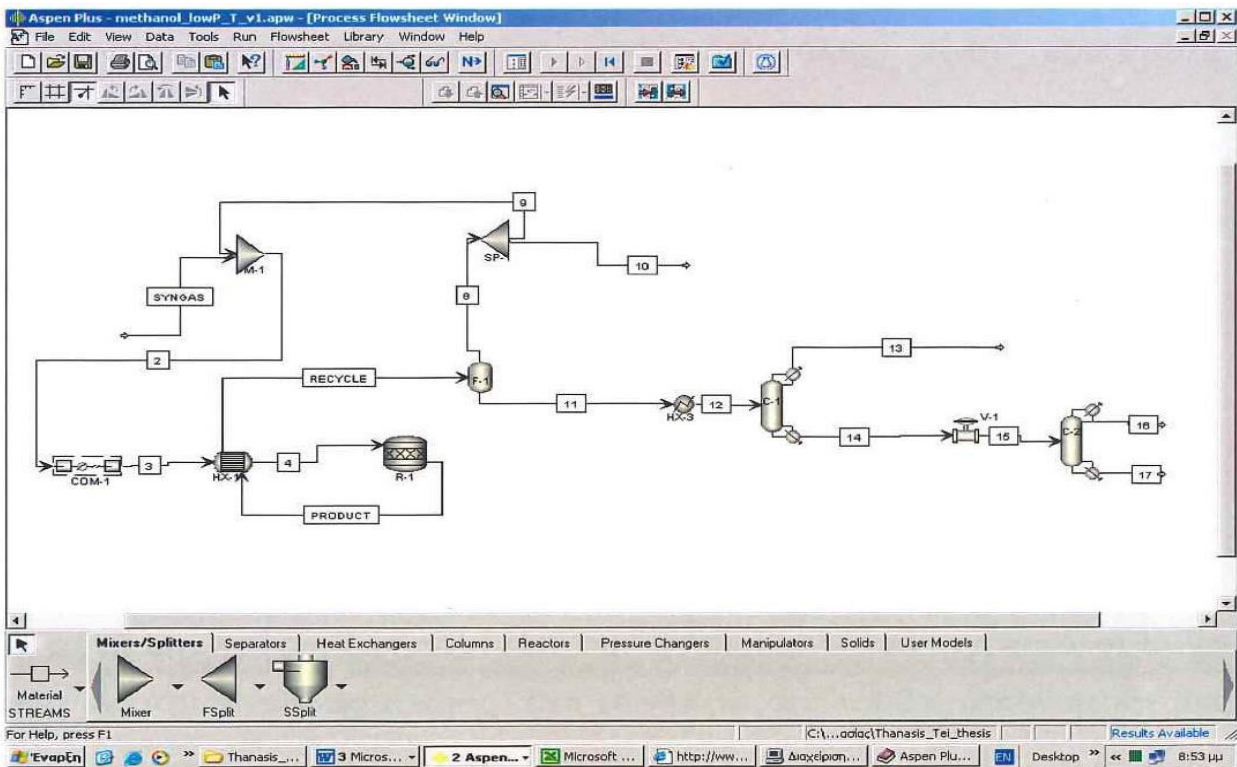
ΜΟΚΟΣ ΔΗΜΗΤΡΙΟΣ Α.Ε.Μ. 234

ΠΡΟΔΡΟΜΙΔΗΣ ΑΘΑΝΑΣΙΟΣ Α.Ε.Μ. 191

**ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΔΥΤΙΚΗΣ ΜΑΚΕΔΟΝΙΑΣ**  
**ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ ΕΝΕΡΓΕΙΑΚΩΝ ΠΟΡΩΝ**

**ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ**

**«ΣΥΓΚΡΙΣΗ ΒΙΟΜΗΧΑΝΙΚΗΣ ΔΙΕΡΓΑΣΙΑΣ**  
**ΠΑΡΑΓΩΓΗΣ ΜΕΘΑΝΟΛΗΣ ΥΨΗΛΗΣ ΚΑΙ ΧΑΜΗΛΗΣ**  
**ΠΙΕΣΗΣ-ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ ΚΑΙ ΟΙΚΟΝΟΜΙΚΗ**  
**ΑΝΑΛΥΣΗ»**



**ΕΠΙΒΛΕΠΩΝ ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ: ΠΕΤΡΟΣ Π. ΠΗΛΑΒΑΚΗΣ**

**ΜΟΚΟΣ ΔΗΜΗΤΡΙΟΣ Α.Ε.Μ. 234**

**ΠΡΟΔΡΟΜΙΔΗΣ ΑΘΑΝΑΣΙΟΣ Α.Ε.Μ. 191**

Α.Π.Θ. - ΤΜΗΜΑ  
ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ  
ΕΝΕΡΓΕΙΑΚΩΝ ΠΟΡΩΝ  
Αριθμ. Εισαγ.: 1619.....  
Ημερομηνία: 19/4/06.....

ΚΟΖΑΝΗ  
ΟΚΤΩΒΡΙΟΣ 2005

## Περίληψη

Ο σκοπός αυτής της εργασίας ήταν να δημιουργήσει δύο ρεαλιστικές προσομοιώσεις βιομηχανικής παραγωγής μεθανόλης χρησιμοποιώντας το πρόγραμμα Aspen Plus. Οι διεργασίες αυτές είχαν το ίδιο διάγραμμα ροής αλλά διέφεραν ως προς της συνθήκες αντίδρασης.

Στην εποχή μας η παραγωγή της μεθανόλης βασίζεται στο μεθάνιο, το οποίο βρίσκεται στο φυσικό αέριο. Σε αυτές τις προσομοιώσεις η τροφοδοσία θεωρείται πως είναι αέριο σύνθεσης. Η παραγωγή του αερίου σύνθεσης από το φυσικό αέριο δεν εξετάζεται στην παρούσα εργασία.

Οι αντιδράσεις σχηματισμού της μεθανόλης είναι εξώθερμες και συνοδεύονται από μείωση του όγκου, άρα ο σχηματισμός της ευνοείται από τη μεγάλη πίεση και τη χαμηλή θερμοκρασία (αρχή Le Chatelier). Οι διεργασίες παραγωγής μεθανόλης ταξινομούνται ανάλογα με τη χρησιμοποιούμενη πίεση ως εξής:

- Διεργασία υψηλής πίεσης 25-30 MPa
- Διεργασία μέσης πίεσης 10-25 MPa
- Διεργασία χαμηλής πίεσης 5-10 MPa

Σε αυτή την εργασία εξετάζονται και συγκρίνονται ενεργειακά οι διεργασίες υψηλής και χαμηλής πίεσης. Στη συνέχεια ακολουθεί οικονομική ανάλυση της ενεργειακά συμφέρουσας διεργασίας (χαμηλής πίεσης), η οποία τελικά προκύπτει οικονομικά ασύμφορη.

Η παραγωγή μεθανόλης των δύο μεθόδων ορίστηκε να είναι 100 kton/yr με καθαρότητα 99,9 wt% ενώ ο σχεδιαστικός προσδιορισμός για την καθαρή μεθανόλη είναι 99,85 wt%.

## **ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ**

<b>1. Εισαγωγή</b>	5
1.1 Ιστορικά Στοιχεία, Φυσικές Ιδιότητες και Χρήσεις	5
1.2 Προδιαγραφές Ποιότητας	7
1.3 Περιγραφή της Διεργασίας	8
1.3.1 Σύνθεση της Μεθανόλης	10
1.3.2 Διαχωρισμός Ακατέργαστης Μεθανόλης	13
<b>2. Προσομοιώσεις διεργασιών</b>	14
2.1 Πρώτες Ύλες	14
2.2 Θερμοδυναμικό Μοντέλο	15
2.3 Σύστημα Αντιδραστήρα	15
2.4 Θέρμανση & Συμπύεση Τροφοδοσίας του Αντιδραστήρα	17
2.5 Επεξεργασία Ακατέργαστης Μεθανόλης	18
2.5.1 Διαχωριστής (flash column F-1)	18
2.5.1.1 Μεταβλητή Ανακύκλωσης	18
2.5.2 Αποστακτική Στήλη C-1	19
2.5.3 Αποστακτική Στήλη C-2	20
2.6 Βοηθητικός Εξοπλισμός	21
2.7 Αποτελέσματα Προσομοιώσεων	22
<b>3. Οικονομική ανάλυση</b>	25

3.1 Μεταβλητά Κόστη	26
3.1.1 Κόστος Πρώτων Υλών	26
3.1.2 Ενεργειακή Κατανάλωση	26
3.2 Εργατικά Κόστη	28
3.3 Κόστος Πάγιας Επένδυσης	28
3.4 Ετήσια Κόστη Παραγωγής	30
3.5 Κόστος Παραγωγής του Προϊόντος	30
3.6 Αποτελέσματα Οικονομικής Ανάλυσης	31
3.7 Προτάσεις για Ενεργειακή Βελτιστοποίηση	32
<b>4. Συμπεράσματα</b>	<b>33</b>
<b>5. Βιβλιογραφία</b>	<b>34</b>
<b>Παραρτήματα</b>	
Παράρτημα I	36
Παράρτημα II	37
Παράρτημα III	39
Παράρτημα IV	41
Παράρτημα V	44

# 1. Εισαγωγή

## 1.1 Ιστορικά Στοιχεία, Φυσικές Ιδιότητες και Χρήσεις

Η μεθανόλη, με μοριακό τύπο  $\text{CH}_3\text{OH}$ , καλείται επίσης και μεθυλική αλκοόλη και είναι μια από τις σημαντικότερες χημικές πρώτες ύλες. Είναι η απλούστερη αλκοόλη και είναι ελαφρύ, άχρωμο και δηλητηριώδες υγρό. Επίσης είναι πλήρως διαλυτή στο νερό και στους οργανικούς διαλύτες. Το σημείο ζέσης είναι  $64,7\text{ }^\circ\text{C}$  ενώ το σημείο τήξης είναι  $-97\text{ }^\circ\text{C}$ . Η καθαρή μεθανόλη παράχθηκε αρχικά το 1661 από τον Sir Robert Boyle μέσω της ξηράς απόσταξης του ακατέργαστου ξύλου ονομάζοντας το νέο συστατικό *lignorum spiritus adiarphorus*. Αργότερα έγινε γνωστή και ως πυροξυλικό οινόπνευμα. Το 1834 οι Γάλλοι χημικοί Jean-Baptiste Dumas και Eugene Peligot καθόρισαν τη χημική της σύσταση. Ταυτόχρονα εισήγαγαν στην οργανική χημεία τον όρο μεθυλένιο από τις ελληνικές λέξεις «μέθη» και «ύλη» που σημαίνουν κρασί και ξύλο αντίστοιχα. Ο όρος «μεθανόλη» εισήχθη επίσημα στη χημεία το 1892 από το διεθνές συνέδριο χημικής ονοματολογίας (International Conference on Chemical Nomenclature) [1].

Από το 1830 έως το 1923, το «πυροξυλικό οινόπνευμα» παρέμεινε η μόνη σημαντική πηγή μεθανόλης. Από το 1913, ο A.Mitasch και οι συνεργάτες του στη BASF παρήγαγαν επιτυχώς οργανικές ενώσεις που περιείχαν οξυγόνο, συμπεριλαμβανομένης και της μεθανόλης, από το μονοξείδιο του άνθρακα και το υδρογόνο. Οι διαδικασίες παραγωγής που βασιζόνταν στη μέθοδο BASF απαιτούσαν υψηλή πίεση (25-30 MPa) και θερμοκρασία ( $320\text{-}450\text{ }^\circ\text{C}$ ) ενώ χρησιμοποιήθηκαν για περισσότερο από 40 έτη και έχουν πλέον εγκαταλειφθεί [2]. Στη δεκαετία του '60, ωστόσο, η ICI ανέπτυξε μια διεργασία για τη σύνθεση της μεθανόλης στην οποία το χωρίς θείο αέριο σύνθεσης το οποίο περιέχει μεγάλη αναλογία διοξειδίου του άνθρακα αντιδρά με τη βοήθεια καταλυτών οξειδίου του χαλκού. Αυτή και άλλες παρόμοιες διαδικασίες χαμηλής πίεσης χαρακτηρίζονται από αρκετά ήπιες

συνθήκες αντίδρασης (5-10 MPa, 200-300°C). Έτσι η μεθανόλη μπορεί να παραχθεί με αυτές τις μεθόδους οικονομικότερα [3].



Εικόνα 1. Το εργοστάσιο της Basf στη Γερμανία [2]

Η παγκόσμια παραγωγική ικανότητα το 2003 ήταν περίπου  $22,4 \cdot 10^6 \text{ ton/yr}$ . Περίπου το 85% της παραχθείσας μεθανόλης χρησιμοποιείται στη χημική βιομηχανία ως πρώτη ύλη ή ως διαλύτης ενώ το υπόλοιπο χρησιμοποιείται στον τομέα των καυσίμων και της ενέργειας [4].

Η μεθανόλη χρησιμοποιείται σε περιορισμένη κλίμακα στις μηχανές εσωτερικής καύσης λόγω του γεγονότος ότι δεν είναι τόσο εύφλεκτη όσο η βενζίνη. Ωστόσο, αποτελεί το βασικό καύσιμο των τηλεκατευθυνόμενων αεροπλάνων και των οχημάτων dragster. Όταν παράγεται από ξύλο ή από άλλα οργανικά υλικά (βιοαλκοόλη), η παραχθείσα οργανική μεθανόλη θεωρείται ως μια ανανεώσιμη εναλλακτική λύση στους βασιζόμενους στο πετρέλαιο υδρογονάνθρακες. Παρ' όλα αυτά η χρήση 100% καθαρής βιοαλκοόλης από τα σύγχρονα αυτοκίνητα είναι αδύνατη χωρίς κάποιες προσθήκες. Επίσης, η μεθανόλη χρησιμοποιείται ως διαλυτικό και ως αντιψυκτικό στους σωλήνες [5].

Η κύρια χρήση της όμως μέχρι στιγμής είναι η κατασκευή άλλων χημικών. Περίπου το 40% της παγκόσμιας παραγωγής μετατρέπεται σε φορμαλδεΰδη

και στη συνέχεια σε προϊόντα όπως πλαστικά, βαφές, εκρηκτικά και συνθετικά υφάσματα. Οι κυψέλες καυσίμων με απευθείας χρήση μεθανόλης είναι μοναδικές για τη χαμηλή θερμοκρασία και πίεση λειτουργίας τους (ατμοσφαιρική) γεγονός που τις κάνει εξαιρετικά μικρές σε μέγεθος. Σε συνδυασμό με τη σχετικά εύκολη διαχείριση και αποθήκευση της μεθανόλης ίσως ανοίξει ο δρόμος για ηλεκτρικές συσκευές που θα κάνουν χρήση κυψελών καυσίμου. Τέλος άλλα χημικά παράγωγα της μεθανόλης είναι το οξικό οξύ και ο διμέθυλ-αιθέρας, ο οποίος έχει αντικαταστήσει τους χλωροφθοράνθρακες ως προωθητικό αέριο [1]. Στον πίνακα 1.1 φαίνεται η παραγωγή μεθανόλης ανάλογα με περιοχή του πλανήτη.

Πίνακας 1.1 Πρωτοπόρες περιοχές στην παραγωγή μεθανόλης [6]

	Δις. Γαλόνια το χρόνο
Ευρώπη	2.616
ΗΠΑ	1.805
Αυστραλία/Ασία	900
Καναδάς/Μεξικό	837
Νότια Αμερική	713
Μέση Ανατολή	628
Αφρική	266
Σύνολο	7.765

## 1.2 Προδιαγραφές ποιότητας

Για εμπορική χρήση η μεθανόλη ταξινομείται συνήθως, ανάλογα με την καθαρότητά της, σύμφωνα με τα πρότυπα ASTM σε δύο βαθμούς ποιότητας, σε βαθμό A και σε βαθμό AA. Για χημική χρήση η μεθανόλη συνήθως έχει το βαθμό AA [4]. Οι προδιαγραφές του βαθμού AA φαίνονται στον πίνακα 1.2. Εκτός από το νερό οι τυπικές ακαθαρσίες είναι η ακετόνη (η οποία είναι πολύ δύσκολο να διαχωριστεί με την απόσταξη) και η αιθανόλη.



Πίνακας 1.2 Οι ομοσπονδιακές προδιαγραφές για την καθαρή μεθανόλη στις Η.Π.Α. [4]

<b>Ιδιότητα</b>	<b>Βαθμός ΑΑ</b>
Περιεχόμενο σε αιθανόλη, mg/kg	<10
Περιεχόμενο σε ακετόνη, mg/kg	<20
Συνολικό περιεχόμενο σε ακετόνη και αλδεύδες, mg/kg	<30
Περιεχόμενο σε οξέα (π.χ. οξικό οξύ), mg/kg	<30
Δείκτης χρώματος (ΑΡΗΑ)	<5
Δοκιμή σε θειικό οξύ (ΑΡΗΑ)	<30
Το εύρος σημείου ζέσης (101,3 kPa) πρέπει να είναι $64,6 \pm 0,1$ °C	<1
Ξηρό υπόλοιπο, mg/L	<10
Πυκνότητα (20 °C), g/cm <sup>3</sup>	0,7928
Αριθμός υπερμαγγανικού άλατος	<30
Περιεχόμενο σε μεθανόλη, wt%	>99,85
Περιεχόμενο σε νερό, wt%	<0,10
Οσμή	Τυπική, όχι επίμονη

### 1.3 Περιγραφή της Διεργασίας

Οι αντιδράσεις σχηματισμού της μεθανόλης είναι εξώθερμες και συνοδεύονται από μείωση του όγκου, άρα ο σχηματισμός της ευνοείται από τη μεγάλη πίεση και τη χαμηλή θερμοκρασία (αρχή Le Chatelier). Η πιο σύγχρονη μέθοδος παραγωγής μεθανόλης σε βιομηχανική κλίμακα είναι η καταλυτική μετατροπή του αερίου σύνθεσης [4]. Οι διεργασίες παραγωγής μεθανόλης ταξινομούνται ανάλογα με τη χρησιμοποιούμενη πίεση ως εξής:

- Διεργασία υψηλής πίεσης 25–30 MPa
- Διεργασία μέσης πίεσης 10–25 MPa
- Διεργασία χαμηλής πίεσης 5 –10 MPa



Εικόνα 2. Ίσως το μεγαλύτερο εργοστάσιο παραγωγής μεθανόλης, βρίσκεται στο Point Lisas, του Trinidad και Tobago [6]

Τα κύρια πλεονεκτήματα της διεργασίας χαμηλής πίεσης είναι το μικρότερο επενδυτικό κόστος, το χαμηλότερο κόστος παραγωγής, η βελτιωμένη λειτουργική αξιοπιστία και η δυνατότητα ευελιξίας όσον αφορά το μέγεθος του εργοστασίου [4].

Η βιομηχανική παραγωγή μεθανόλης μπορεί να υποδιαιρεθεί σε τρία κύρια βήματα [4]:

1. Παραγωγή του αερίου σύνθεσης
2. Σύνθεση της μεθανόλης
3. Επεξεργασία της ακατέργαστης μεθανόλης

Σε αυτή την εργασία προσομοιώνονται τα βήματα δύο και τρία για τις διεργασίες χαμηλής και υψηλής πίεσης. Η παραγωγή του αερίου σύνθεσης

δεν προσομοιώνεται. Θεωρούμαι ότι απλά μας παρέχεται καθαρό αέριο σύνθεσης.

### 1.3.1 Σύνθεση της Μεθανόλης

Η μεθανόλη παράγεται από το αέριο σύνθεσης μέσα σε καταλυτικό αντιδραστήρα. Τα αντιδρώντα είναι κυρίως μονοξείδιο του άνθρακα, διοξείδιο του άνθρακα, υδρογόνο και ως αδρανή υλικά μεθάνιο και άζωτο.

Η κύρια αντίδραση σχηματισμού μεθανόλης από το αέριο σύνθεσης περιγράφεται από την εξίσωση 1. Ταυτόχρονα λαμβάνει χώρα η αντίδραση αποσύνθεσης της μεθανόλης (εξίσωση 2) [4].



Η πρώτη αντίδραση είναι εξώθερμη και συνοδεύεται από πτώση πίεσης. Επίσης, η αντίδραση παραγωγής της μεθανόλης οδηγεί σε μείωση των όγκων από αριστερά προς τα δεξιά. Για τους παραπάνω λόγους αυξάνοντας τη πίεση και μειώνοντας τη θερμοκρασία ευνοείται ο σχηματισμός μεθανόλης. Η μέγιστη μετατροπή εξαρτάται από τη θέση ισορροπίας.

Επιπρόσθετα στις δύο αυτές αντιδράσεις, η εξώθερμη αντίδραση του διοξειδίου του άνθρακα και του υδρογόνου πρέπει επίσης να ληφθεί υπόψη [4].

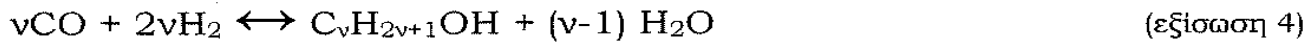


Η μετατροπή του διοξειδίου του άνθρακα σε μεθανόλη (εξίσωση 1) είναι αποτέλεσμα των εξισώσεων 2 και 3.

Οι εμπορικά διαθέσιμοι καταλύτες για τη διεργασία χαμηλής πίεσης επιτρέπουν την παραγωγή της μεθανόλης σε ποσοστό 99% όσον αναφορά

το παρεχόμενο μονοξείδιο. Οι ακόλουθες ακαθαρσίες είναι σημαντικές όταν έχουμε βιομηχανική παραγωγή μεγάλης κλίμακας [4]:

➤ Ανώτερες αλκοόλες σχηματίζονται από ίχνη αλκαλίων



➤ Υδρογονάνθρακες και κεριά σχηματίζονται από ίχνη σιδήρου, κοβαλτίου και νικελίου σύμφωνα με τη Fisher-Tropsch process



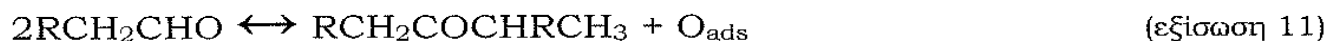
➤ Εστέρες



➤ Διμέθυλ- αιθέρες



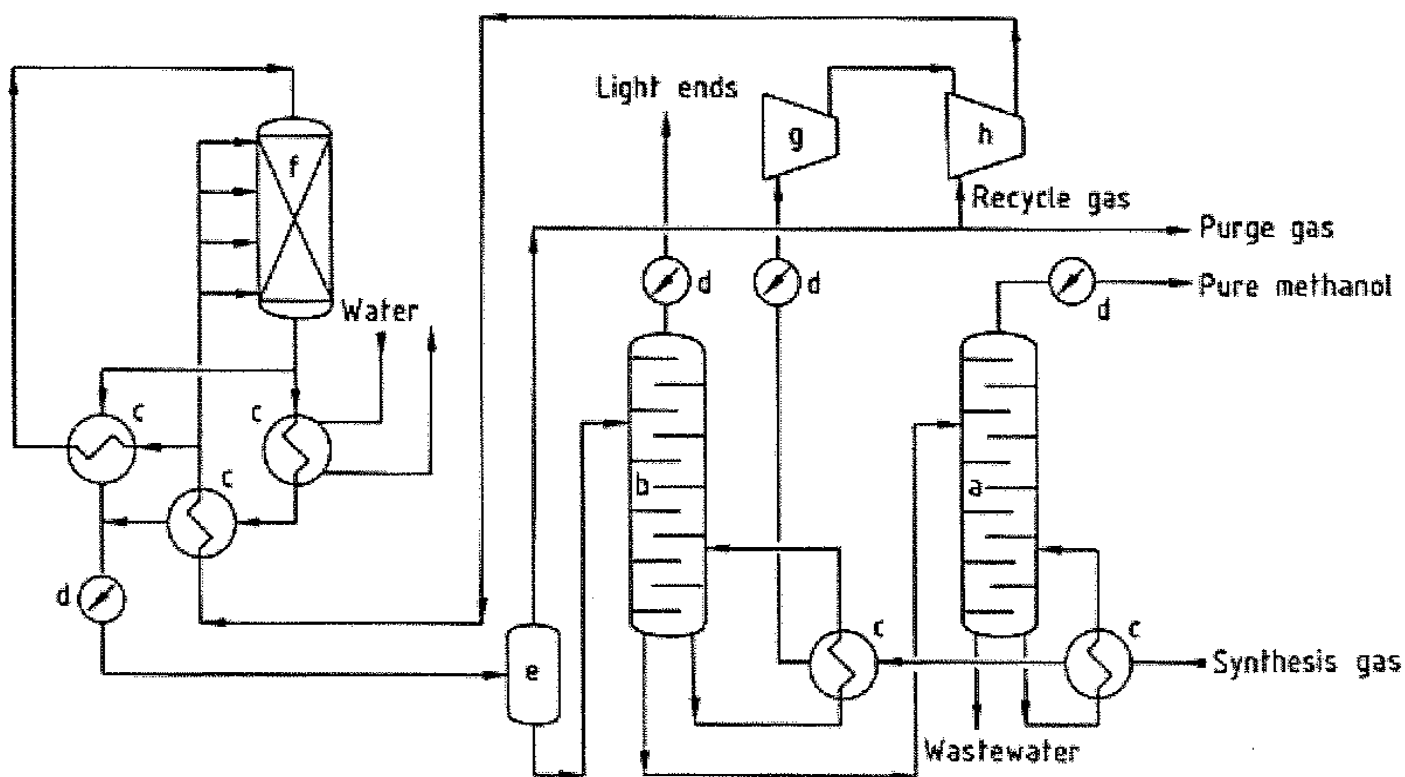
➤ Κετόνες



Πολλοί διαφορετικοί καταλύτες είναι διαθέσιμοι σήμερα, οι οποίοι μπορεί να είναι είτε αδιαβατικοί (π.χ. ICI) είτε μερικώς ισόθερμοι (π.χ. Lurgi). Το 60% της παγκόσμιας παραγωγής μεθανόλης γίνεται με τη μέθοδο ICI ενώ με τη μέθοδο Lurgi το 30%. Η ICI χρησιμοποιεί αδιαβατικό αντιδραστήρα με μονή καταλυτική κλίνη [4].

Σε αυτή την εργασία θα μελετηθεί και θα προσομοιαστεί η διεργασία ICI σε σύγκριση με την διεργασία BASF.

Στο παρακάτω σχήμα παρουσιάζεται ενδεικτικά το διάγραμμα ροής της διεργασίας ICI.



Σχήμα 1.1 Διεργασία παραγωγής μεθανόλης χαμηλής πίεσης ICI [4]. a) Στήλη καθαρής μεθανόλης b) Αποστακτική στήλη ελαφρών προϊόντων c) Εναλλάκτης θερμότητας d) Ψύκτης e) Διαχωριστής (flash) f) Αντιδραστήρας g) Συμπιεστής h) Συμπυκνωτής ρεύματος ανακύκλωσης

### 1.3.2 Διαχωρισμός Ακατέργαστης Μεθανόλης (Separation Unit)

Η ακατέργαστη μεθανόλη η οποία φεύγει από τον αντιδραστήρα περιέχει νερό και πολλά άλλα ανεπιθύμητα προϊόντα. Το μέγεθος και η αναλογία αυτών των παράπλευρων προϊόντων εξαρτάται από τις συνθήκες αντίδρασης, την τροφοδοσία, τον τύπο και τη διάρκεια ζωής του καταλύτη. Η ακατέργαστη μεθανόλη περιέχει συστατικά χαμηλού και ψηλού σημείου ζέσεως. Τα λιγότερο πτητικά περιλαμβάνουν διαλυμένα αέρια, διμέθυλαιθέρες και κετόνες. Τα περισσότερα πτητικά συστατικά περιλαμβάνουν ανώτερες αλκοόλες και υδρογονάνθρακες, μεγαλύτερες κετόνες και εστέρες μικρότερων αλκοολών με οξικά και μυρμηκικά οξέα. Επίσης σχηματίζονται μεγάλοι κέρινοι υδρογονάνθρακες που αποτελούνται από σχεδόν ευθεία αλυσίδα  $> C_8 - C_{40}$  οι οποίοι έχουν πολύ μικρή πτητικότητα και για αυτό παραμένουν στη βάση της αποστακτικής στήλης, από την οποία μπορούν εύκολα να απομακρυνθούν λόγω της μικρής τους πυκνότητας και της μικρής τους διαλυτότητας στο νερό [4].

Το πρώτο τμήμα διαχωρισμού είναι στήλη διαχωρισμού μιας βαθμίδας (flash) όπου η μεθανόλη διαχωρίζεται από το αέριο σύνθεσης που δεν αντέδρασε. Στη συνέχεια το αέριο σύνθεσης οδηγείται ξανά στον αντιδραστήρα για να επιτευχθεί η επιθυμητή μετατροπή ενώ η ακατέργαστη μεθανόλη εισέρχεται σε αποστακτική στήλη όπου πραγματοποιείται διαχωρισμός της μεθανόλης από τα ελαφρύτερα από αυτήν συστατικά. Το προϊόν πυθμένα της παραπάνω στήλης οδηγείται σε δεύτερη αποστακτική από την κορυφή της οποίας λαμβάνεται μεθανόλη υψηλής καθαρότητας. Η αποστακτική στήλη δουλεύει σε ατμοσφαιρική πίεση λόγω του ότι σε μεγάλη πίεση το μείγμα παρουσιάζει αζεότροπο και δεν είναι εφικτή η επιθυμητή καθαρότητα [4].

## 2. Προσομοιώσεις διεργασιών

Σε αυτό το μέρος της εργασίας προσομοιώνονται με τη βοήθεια του προγράμματος Aspen Plus οι διεργασίες χαμηλής και υψηλής πίεσης παραγωγής μεθανόλης. Και οι δύο διεργασίες έχουν κοινό διάγραμμα ροής, που παρουσιάζεται στο Παράρτημα I, ενώ η διαφορά τους έγκεινται στα λειτουργικά δεδομένα της κάθε συσκευής τα οποία παρουσιάζονται αναλυτικά στους πίνακες που ακολουθούν.

### 2.1 Πρώτες Ύλες

Η πρώτη ύλη που χρησιμοποιείται για την παραγωγή μεθανόλης είναι το αέριο σύνθεσης. Η προτιμώμενη μέθοδος για την παραγωγή του αερίου σύνθεσης είναι η καταλυτική αυτόθερμη αναμόρφωση γιατί είναι πιο οικονομική για εργοστάσια με μεγάλη δυναμικότητα παραγωγής (>5kton/year) [4]. Έχει υποτεθεί ότι όλες οι εγκαταστάσεις που είναι αναγκαίες για την παραγωγή του αερίου σύνθεσης είναι διαθέσιμες επί τόπου. Το αναμορφωμένο αέριο αναμιγνύεται με υδρογόνο για να ρυθμιστεί η σύσταση του αερίου σύνθεσης.

Πίνακας 2.1 Προδιαγραφές αερίου σύνθεσης (Παράρτημα V), [4]

Τροφοδοσία	% v/v
H <sub>2</sub>	74
CO	15
CO <sub>2</sub>	8
CH <sub>4</sub>	3
Πίεση (MPa)	5
Θερμοκρασία (°C)	50

Το αέριο σύνθεσης βρίσκεται υπό συνθήκες 5 MPa και 50 °C.

*Σχεδιαστικός προσδιορισμός(Design specification):* Η κοινή βάση στην οποία στηρίζεται η σύγκριση των διεργασιών είναι η δυναμικότητα της μονάδας (100 kton/yr).

Ο στόχος αυτός επιτεύχθηκε χρησιμοποιώντας την ειδική λειτουργία του Aspen που ονομάζεται «σχεδιαστικός προσδιορισμός». Συγκεκριμένα, με τη χρήση αυτής της λειτουργίας τέθηκε ο περιορισμός να παράγονται 100 kton/yr (2136 kmol/hr) μεθανόλης χρησιμοποιώντας ως μεταβαλλόμενη μεταβλητή την παροχή τροφοδοσίας (Παράρτημα V).

## 2.2 Θερμοδυναμικό Μοντέλο

Η καταστατική εξίσωση Soave-Redlich-Kwong επιλέχθηκε σύμφωνα με τη βιβλιογραφία για να υπολογιστούν οι ιδιότητες των συστατικών που λαμβάνουν μέρος στη διεργασία [4].

## 2.3 Σύστημα Αντιδραστήρα

Στην διεργασία ICI οι συνθήκες της αντίδρασης είναι 10 MPa και 200 °C, ενώ στη διεργασία BASF 30 MPa και 400 °C. Στις συνθήκες της διεργασίας ICI το μέγιστο ποσοστό μετατροπής (θερμοδυναμική ισορροπία) των CO και CO<sub>2</sub> είναι 99% και 83%, όπως φαίνεται στον παρακάτω πίνακα. Για τις ανάγκες της παρούσας εργασίας και εφόσον δεν χρησιμοποιήθηκαν κινητικά δεδομένα, έγινε η παραδοχή ότι οι βαθμοί μετατροπής για τις δυο αντιδράσεις (και για τις δυο μεθόδους) είναι οι προαναφερόμενοι.

Πίνακας 2.2 Η εξάρτηση της μετατροπής του CO και του CO<sub>2</sub> σε σχέση με τη θερμοκρασία και την πίεση [4]

Θερμοκρασία [°C]	Μετατροπή CO			Μετατροπή CO <sub>2</sub>		
	5 MPa	10 MPa	30 MPa	5 MPa	10 MPa	30 MPa
200	96,3	99,0	99,9	28,6	83,0	99,5
250	73,0	90,6	99,0	14,4	45,1	92,4

Το μοντέλο του αντιδραστήρα που χρησιμοποιείται και στις δύο περιπτώσεις είναι Rstoic (στοιχειομετρικός αντιδραστήρας). Αυτός ο τύπος αντιδραστήρα χρησιμοποιείται όταν [7]:

- Δεν είναι γνωστό το κινητικό μοντέλο των αντιδράσεων που λαμβάνουν χώρα



- Η στοιχειομετρία των αντιδράσεων είναι γνωστή
- Η μετατροπή των αντιδράσεων είναι γνωστή

Οι αντιδράσεις που υποθέτουμε ότι λαμβάνουν χώρα καθώς και οι βαθμοί μετατροπής που θεωρήθηκαν παρουσιάζονται στον πίνακα 2.3 (Παράρτημα V). Τα παραπροϊόντα που μπορούν να σχηματιστούν σ' αυτή την προσομοίωση είναι προπανόλη, μεθάνιο και διμεθυλ-αιθέρας.

Πίνακας 2.3 Η στοιχειομετρία και ο βαθμός μετατροπής των αντιδράσεων

Αντιδράσεις	Μετατροπή
$\text{CO} + 2\text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_3\text{OH}$	0,99
$\text{CO}_2 + \text{H}_2 \rightarrow \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$	0,83
$3\text{CO} + 6\text{H}_2 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_7\text{OH} + 2\text{H}_2\text{O}$	0,003
$\text{CO}_2 + 4\text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_4 + 2\text{H}_2\text{O}$	0,03
$2\text{CO} + 4\text{H}_2 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_6\text{O} + \text{H}_2\text{O}$	0,005

Επιπλέον στοιχεία για την προσομοίωση του αντιδραστήρα παρουσιάζονται στους πίνακες 2.4 και 2.5.

Πίνακας 2.4 Input Data του αντιδραστήρα R-1 για τη διεργασία ICI (Παράρτημα V)

R-1 Input	
Θερμοδυναμικό μοντέλο	SRK
Πίεση	10 MPa
Θερμοκρασία	200 °C

Πίνακας 2.5 Input Data του αντιδραστήρα R-1 για τη διεργασία BASF

R-1 Input	
Θερμοδυναμικό μοντέλο	SRK
Πίεση	30 MPa
Θερμοκρασία	400 °C

Είναι άξιο αναφοράς ότι η θερμότητα που εκλύεται είναι μεγάλη και στις δύο διεργασίες και προτείνεται μανδύας ψύξης για να απορροφά αυτή τη θερμότητα. Με αυτό τον τρόπο το νερό ψύξης που χρησιμοποιείται στον

μανδύα μετατρέπεται σε ατμό. Πρέπει ωστόσο να τονιστεί ότι δεν πραγματοποιήθηκε προσομοίωση του μανδύα στα πλαίσια της παρούσας εργασίας.

## 2.4 Θέρμανση και συμπίεση της τροφοδοσίας του αντιδραστήρα

Όπως αναφέρεται στην παράγραφο 2.3 οι συνθήκες του αντιδραστήρα είναι 10 MPa, 200 °C και 30 MPa, 400 °C αντίστοιχα ενώ το αέριο σύνθεσης βρίσκεται σε συνθήκες 5 MPa και 50 °C. Γι' αυτόν το λόγο απαιτείται θέρμανση και συμπίεση.

Σύμφωνα με το διάγραμμα ροής της διεργασίας (Παράρτημα Ι) το αέριο σύνθεσης αναμιγνύεται με το ρεύμα ανακύκλωσης, ρεύμα 9, και το μίγμα τους, ρεύμα 2, συμπιέζεται.

Για να θερμανθεί το ρεύμα χρησιμοποιείται ένας εναλλάκτης θερμότητας τύπου κελύφους-αυλών (shell tube). Το θερμό ρεύμα είναι το ρεύμα εξόδου του αντιδραστήρα. Το σύνολο των δεδομένων αυτού του τμήματος παρουσιάζονται στους πίνακες 2.6 και 2.7.

Πίνακας 2.6 Input Data του συμπιεστή C-1 και του εναλλάκτη HX-1 στην ICI process (Παράρτημα V)

C-1 Input	
Μοντέλο συμπιεστή	Isentropic
Πίεση	10MPa
HX-1 Input	
Διεύθυνση ρευμάτων	Αντίρροπη
Θερμοκρασία κρύου ρεύματος	185°C
Πίεση (θερμό τμήμα)	9,8MPa

Πίνακας 2.7 Input Data του συμπιεστή C-1 και του εναλλάκτη HX-1 στην BASF process

C-1 Input	
Μοντέλο συμπιεστή	Isentropic
Πίεση	30MPa
HX-1 Input	

Διεύθυνση ρευμάτων	Αντίρροπη
Θερμοκρασία κρύου ρεύματος	370°C
Πίεση (θερμό τμήμα)	29,7MPa

## 2.5 Επεξεργασία ακατέργαστης μεθανόλης.

Η ακατέργαστη μεθανόλη που φεύγει από τον αντιδραστήρα περιέχει νερό και άλλες ακαθαρσίες (υδρογόνο, CO, CO<sub>2</sub>, μεθάνιο, διμέθυλ-αιθέρα και προπανόλη). Απαιτείται μια μονάδα διαχωρισμού για την παραγωγή μεθανόλης βαθμού AA (βλέπε πίνακα 1.2). Το θερμοδυναμικό μοντέλο που επιλέχθηκε για αυτό το τμήμα είναι το UNIFAC.

### 2.5.1 Διαχωριστής μιας βαθμίδας (flash column F-1)

Το υδρογόνο που δεν αντέδρασε ανακυκλώνεται στον αντιδραστήρα ώστε να αυξηθεί ο συνολικός βαθμός μετατροπής. Το υδρογόνο διαχωρίζεται από την ακατέργαστη μεθανόλη σε μια στήλη flash. Τα ελαφρά συστατικά CO, CO<sub>2</sub> και μεθάνιο διαχωρίζονται μαζί με το υδρογόνο. Οι συνθήκες λειτουργίας αναφέρονται στους πίνακες 2.8 και 2.9.

Πίνακας 2.8 Input Data της στήλης Flash F1 (ICI process)

F-1 Input	
Θερμοκρασία	25°C
Πίεση	9.7MPa

Πίνακας 2.9 Input Data της στήλης Flash F1 (BASF process)

F-1 Input	
Θερμοκρασία	25°C
Πίεση	9.7MPa

Μετά τον διαχωριστή το 10% της συνολικής αέριας φάσης «καθαρίζεται» (purge) ώστε να αποφευχθεί η συσσώρευση ακαθαρσιών στον αντιδραστήρα.

Ο διαχωριστής (Splitter) SP-1 χρησιμοποιείται για αυτό το σκοπό. Το υπόλοιπο 90%, ρεύμα 9, ανακυκλώνεται στον αντιδραστήρα.

### 2.5.1.1 Μεταβλητή ανακύκλωσης

Ένας συνηθισμένος τρόπος λύσης στα προβλήματα ανακύκλωσης είναι ο εξής:

Υποθέτουμε μια αρχική τιμή για τη μεταβλητή ανακύκλωσης και υπολογίζουμε διαδοχικά τα στοιχεία του «άκυκλου» συστήματος μέχρι να υπολογίσουμε μια επόμενη τιμή για τη μεταβλητή ανακύκλωσης. Συγκρίνουμε την αρχική με τη τελική τιμή. Αν διαφέρουν πολύ δίνουμε νέα τιμή στη μεταβλητή ανακύκλωσης και οι επαναληπτικοί υπολογισμοί συνεχίζονται ώσπου η διαφορά της υποτιθέμενης και της υπολογισμένης τιμής της μεταβλητής να ικανοποιεί κάποια επιθυμητή προσέγγιση [8].

Στην παρούσα εργασία το ρεύμα 9 ήταν αρχικά ανοικτό. Τα αποτελέσματα του ρυθμού ροής του κάθε συστατικού του ρεύματος 9 εισάγονταν σαν δεδομένα στο βοηθητικό ρεύμα στην επόμενη δοκιμή. Αυτή η διαδικασία επαναλαμβάνονταν μέχρι τα αποτελέσματα του ρεύματος 9 να είναι κοντινά με τα δεδομένα που εισάγαμε στο βοηθητικό ρεύμα (η διαφορά στη συνολική ροή mole να είναι μικρότερη από 1kmol/hr).

### 2.5.2 Αποστακτική στήλη C-1

Στην αποστακτική στήλη C-1, που στη βιβλιογραφία αναφέρεται ως στήλη ελαφρών συστατικών, γίνεται ο διαχωρισμός των ελαφρών συστατικών (CO, CO<sub>2</sub>, μεθάνιο και διμέθυλ-αιθέρας) από τη μεθανόλη.

Αρχικά χρησιμοποιείται για συντόμευση η στήλη DSTWU. Οι πληροφορίες που απαιτούνται είναι ο υποτιθέμενος αριθμός επιπέδων και η επιθυμητή ανάκτηση των light και heavy key components. Τα αποτελέσματα αυτής της συντόμευσης (ο λόγος επαναροής, ο λόγος αποστάγματος προς τροφοδοσία και η βαθμίδα τροφοδοσίας) χρησιμοποιούνται για το

σχεδιασμό της στήλης RadFrac. Τα δεδομένα που εισαχθήκανε στην στήλη RadFrac φαίνονται στον πίνακα 2.7 (κοινός και για τις δύο διεργασίες).

Πίνακας 2.7 Input Data της αποστακτικής στήλης C-1

C-1 Input	
Αριθμός βαθμίδων	15
Συμπυκνωτής	Partial-Vapor
Λόγος επαναροής	8
Λόγος αποστάγματος προς τροφοδοσία	0,1
Βαθμίδα τροφοδοσίας	9 (On-stage)

*Σχεδιαστικός προσδιορισμός (Design specification):* Η απαιτούμενη ανάκτηση mole του ελαφρού συστατικού διμέθυλ-αιθέρας είναι 0,95 και επιτυγχάνεται με μεταβολή του λόγου αποστάγματος προς τροφοδοσία.

### 2.5.3 Αποστακτική στήλη C-2

Στην αποστακτική στήλη C-2 γίνεται ο διαχωρισμός της μεθανόλης από τα βαριά συστατικά (προπανόλη και νερό).

Χρησιμοποιείται ξανά για συντόμευση η στήλη DSTWU και τα αποτελέσματά της (ο λόγος επαναροής, ο λόγος αποστάγματος προς τροφοδοσία και η βαθμίδα τροφοδοσίας) χρησιμοποιούνται για το σχεδιασμό της στήλης RadFrac. Τα δεδομένα που εισαχθήκανε στην στήλη RadFrac φαίνονται στον πίνακα 2.8 (κοινός και για τις δύο διεργασίες).

Πίνακας 2.8 Input Data of Distillation Column C-2 (Παράρτημα V)

C-1 Input	
Αριθμός βαθμίδων	35
Συμπυκνωτής	Total
Λόγος επαναροής	0,75
Λόγος αποστάγματος προς τροφοδοσία	0,692
Βαθμίδα τροφοδοσίας	22(Above stage)

*Σχεδιαστικός προσδιορισμός (Design specification):* Η επιθυμητή καθαρότητα της μεθανόλης στην κορυφή της στήλης είναι 0,9985 [4] και επιτυγχάνεται με την μεταβολή του λόγου επαναροής (Παράρτημα V).

## 2.6 Βοηθητικός εξοπλισμός

Ο βοηθητικός εξοπλισμός που χρησιμοποιείται στην προσομοίωση είναι ο ακόλουθος:

- Μικτής (Mixer) M-1 για την ανάμιξη του νέου αερίου σύνθεσης με το ρεύμα ανακύκλωσης.
- Διαχωριστής (Splitter) SP-1 για το χωρισμό του ρεύματος της κάθαρσης από το ρεύμα ανακύκλωσης.
- Εναλλάκτης Θερμότητας (Heat Exchanger) HX-2 για την προθέρμανση της τροφοδοσίας της αποστακτικής στήλης C-1.
- Βαλβίδα (Valve) V-1 για την μείωση της πίεσης της τροφοδοσίας της αποστακτικής στήλης C-2 από 10 MPa σε 0,01 MPa.

Πίνακας 2.9 Input Data του βοηθητικού εξοπλισμού (κοινός και για τις δύο διεργασίες)

<b>M-1 Input</b>	
Πίεση	5 MPa
<b>SP-1 Input</b>	
Split fraction	0,9
<b>HX-2 Input</b>	
Πίεση	10 MPa
Vapor Fraction	0,3
<b>V-1 Input</b>	
Πίεση εξόδου	0,01 MPa

## 2.7 Αποτελέσματα Προσομοιώσεων

Μετά το τέλος των δύο προσομοιώσεων μπορούμε πλέον να εξετάσουμε από ενεργειακή άποψη τις ομοιότητες και τις διαφορές των μεθόδων κάνοντας νωρίτερα μια σύνοψη των παραδοχών.

- ΠΑΡΑΔΟΧΗ 1: Οι συνθήκες του αντιδραστήρα είναι 10 MPa, 200 °C στην χαμηλή πίεση και 30 MPa, 400 °C στην υψηλή ενώ το αέριο σύνθεσης βρίσκεται σε συνθήκες 5 MPa και 50 °C και στις δύο περιπτώσεις.
- ΠΑΡΑΔΟΧΗ 2: Οι βαθμοί μετατροπής των CO και CO<sub>2</sub> και στις δύο προσομοιώσεις θεωρήθηκαν ίσοι και παρουσιάζονται στον πίνακα 2.2.
- ΠΑΡΑΔΟΧΗ 3: Οι αντιδράσεις που υποθέτουμε ότι λαμβάνουν χώρα καθώς και οι βαθμοί μετατροπής παρουσιάζονται στον πίνακα 2.3.
- ΠΑΡΑΔΟΧΗ 4: Έχει υποτεθεί ότι όλες οι εγκαταστάσεις που είναι αναγκαίες για την παραγωγή του αερίου σύνθεσης είναι διαθέσιμες επί τόπου.
- ΠΑΡΑΔΟΧΗ 5: Κατά τη διάρκεια των προσομοιώσεων θεωρήθηκε ότι εμφανίζεται πτώση πίεσης 10% στις συσκευές μετά την διέλευση από τον συμπιεστή.
- ΠΑΡΑΔΟΧΗ 6: Το θερμοδυναμικό μοντέλο που χρησιμοποιήθηκε για την επίλυση των μαθηματικών εξισώσεων είναι αρχικά η καταστατική εξίσωση Soave-Redlich-Kwong και στη συνέχεια το θερμοδυναμικό μοντέλο UNIFAC.
- ΠΑΡΑΔΟΧΗ 7: Οι αντιδράσεις που υποθέτουμε ότι λαμβάνουν χώρα καθώς και οι βαθμοί μετατροπής παρουσιάζονται στον πίνακα 2.3.

- ΠΑΡΑΔΟΧΗ 8: Εξετάζοντας τα αποτελέσματα του προγράμματος παρατηρούμε ότι λόγω των εξώθερμων αντιδράσεων που συμβαίνουν στο αντιδραστήρα υπάρχει έκλυση ποσοτήτων θερμότητας οι οποίες δεν λαμβάνονται υπόψη στους υπολογισμούς.
- Παραδοχή 9: Μετά τον διαχωριστή το 10% της συνολικής αέριας φάσης «καθαρίζεται» ώστε να αποφευχθεί η συσσώρευση ακαθαρσιών στον αντιδραστήρα (purge).

Στον παρακάτω πίνακα παρουσιάζονται συγκεντρωτικά τα ποσά της ενεργειακής κατανάλωσης για τις δύο διεργασίες όπως δίνονται από το πρόγραμμα Aspen Plus.

Πίνακας 2.10 Αποτελέσματα ενεργειακής σύγκρισης

Μονάδα	ICI process	BASF process
<b>Εναλλάκτης θερμότητας 1</b>	<b>8.821 kW</b>	<b>20.676 kW</b>
<b>Συμπιεστής</b>	<b>5.624 kW</b>	<b>17.323 kW</b>
<b>Flash</b>	<b>7.525 kW</b>	<b>7.525 kW</b>
<b>Εναλλάκτης θερμότητας 2</b>	<b>6.055 kW</b>	<b>6.055 kW</b>
<b>Αποστακτική Στήλη 1</b>	<b>3.800 kW</b>	<b>3.800 kW</b>
<b>Αποστακτική Στήλη 2</b>	<b>3.200 kW</b>	<b>3.200 kW</b>
<b>Σύνολο</b>	<b>35.025 kW</b>	<b>58.579 kW</b>

Όπως παρατηρείται στον παραπάνω πίνακα οι δύο μέθοδοι διαφέρουν πρωτίστως ενεργειακά στον εναλλάκτη θερμότητας 1 (HX-1) και στο ποσό θερμότητας που δαπανάται σε αυτόν. Επίσης στον συμπιεστή C-1 και συγκεκριμένα στο έργο που καταναλίσκεται. Φαίνεται επίσης ότι οι δύο μέθοδοι καταναλίσκουν τα ίδια ποσά ενέργειας για τις υπόλοιπες μονάδες (Flash, HX-2, C-1, C-2).

Γίνεται λοιπόν φανερό ότι η μέθοδος της ICI υπερτερεί της μεθόδου της BASF. Η ενέργεια που καταναλίσκεται στον εναλλάκτη και το έργο που



απαιτείται στον συμπίεστή είναι σημαντικά μικρότερο στη μέθοδο ICI λόγω των βελτιωμένων καταλυτών που χρησιμοποιεί στον αντιδραστήρα. Έτσι προκύπτει μια διαφορά της τάξης των 23.554 kW που συνολικά μεταφράζεται σε 40,2% εξοικονόμηση ενέργειας.

### 3. Οικονομική Ανάλυση

Μετά την προσομοίωση των δύο διεργασιών, ακολουθεί και οικονομική τους ανάλυση, η οποία παρουσιάζεται αναλυτικά παρακάτω.

Σύμφωνα με τη βιβλιογραφία [9] το ετήσιο κόστος παραγωγής μπορεί να υπολογιστεί από την ακόλουθη εξίσωση:

$$K = 1,15 \square K_p + 2,6 \square L + 0,13 \square I \quad (\text{εξίσωση 12})$$

Στην οποία  $K_p$ : μεταβλητό κόστος παραγωγής

$L$ : εργατικά κόστη

$I$ : πάγιο κόστος επένδυσης

Το μεταβλητό κόστος παραγωγής αποτελείται από τα αρχικά και βοηθητικά υλικά καθώς και τις βοηθητικές παροχές (utilities) οι οποίες περιλαμβάνουν θέρμανση, ψύξη και ηλεκτρισμό.

Πριν ξεκινήσουμε τους υπολογισμούς γίνονται οι εξής παραδοχές:

- Ως υλικό κατασκευής χρησιμοποιήθηκε ανοξείδωτο ατσάλι SS400 και στις δύο αναλύσεις.
- Χρόνος λειτουργίας της κάθε μονάδας : 8000 ώρες/yr
- Η οικονομική ζωή των εγκαταστάσεων είναι 25 χρόνια
- Ο δείκτης κόστους κατασκευής πλήρων μονάδων (Chemical Engineering Plant Cost Index) είναι 549,5 [10]
- Οι τόκοι είναι το 10% του μισού κόστους πάγιας επένδυσης
- Τα εργατικά κόστη είναι 1,5 Μ€/yr [10]

### 3.1 Μεταβλητά κόστη

Τα μεταβλητά κόστη αποτελούνται από το κόστος των πρώτων υλών (raw materials) και το κόστος της ενεργειακής κατανάλωσης (energy consumption). Δηλαδή:

$$K_p = K_{r.m} + K_{e.c} \quad (\text{εξίσωση 13})$$

#### 3.1.1 Κόστος πρώτων υλών

Πολλά διαφορετικά υλικά μπορούν να χρησιμοποιηθούν ως τροφοδοσία στην παραγωγή μεθανόλης. Σε αυτή την εργασία θεωρήθηκε ότι χρησιμοποιείται το αέριο σύνθεσης η τιμή του οποίου είναι 67,5 €/ton [11]. Για να επιτευχθεί η παραγωγή 100 kton μεθανόλης ανά έτος, η τροφοδοσία του αερίου σύνθεσης, σύμφωνα με το Aspen Plus, πρέπει να είναι 168 kton/yr. Έτσι η τιμή των πρώτων υλών είναι 11,34 Μ€/yr. Οι αναλυτικοί υπολογισμοί παρουσιάζονται στον παρακάτω πίνακα.

Πίνακας 3.1 Κόστος Πρώτων Υλών

Πρώτες Ύλες	Τιμές Πρώτων Υλών	Μονάδες
Αέριο Σύνθεσης	67,5	€/ton
Παροχή Τροφοδοσίας (Αέριο Σύνθεσης)	168	kton/yr
Κόστος Πρώτων Υλών	11,34	Μ€/yr

#### 3.1.2 Ενεργειακή κατανάλωση

Επειδή στις προσομοιώσεις δεν έχει γίνει ενεργειακή βελτιστοποίηση οι διεργασίες απαιτούν μεγάλα ποσά ενέργειας για θέρμανση και ψύξη. Αυτό σημαίνει ότι ξοδεύονται πολλά χρήματα για θέρμανση (φυσικό αέριο ή ατμός) και ψύξη (νερό ψύξης κλπ.). Εδώ υποθέτουμε ότι η θέρμανση γίνεται με φυσικό αέριο. Η θερμοκρασία του νερού ψύξης θεωρείται πως είναι 10°C. Οι ανάγκες της κάθε διεργασίας σε θερμότητα και ηλεκτρισμό παρουσιάζονται στους πίνακες 3.2 και 3.3.



Και στις δύο περιπτώσεις η μεγαλύτερη κατανάλωση ηλεκτρισμού γίνεται στο συμπιεστή. Σε αυτούς τους υπολογισμούς η πίεση της τροφοδοσίας υποτίθεται πως είναι 5 MPa και πρέπει να συμπιεστεί στα 10 MPa για την διεργασία ICI και στα 30 MPa για τη διεργασία BASF (πιέσεις στις οποίες λειτουργούν οι αντιδραστήρες). Στους πίνακες 3.4 και 3.5 υπολογίζεται το συνολικό κόστος των ενεργειακών καταναλώσεων της κάθε διεργασίας.

Πίνακας 3.2 Διεργασία ICI

Συσκευές	Κατανάλωση (MJ/hr)	Ώρες λειτουργίας	Κατανάλωση (MJ/yr)
Flash	27.081	8.000	216.648.000
Αποστακτική στήλη 1	13.812	8.000	110.496.000
Αποστακτική στήλη 2	27.052	8.000	216.416.000
Εναλλάκτης θερμότητας 1	31.755	8.000	254.040.000
Εναλλάκτης θερμότητας 2	21.798	8.000	174.384.000
Σύνολο			971.984.000

Βοηθητικές διεργασίες	Κατανάλωση (kW)	Ώρες λειτουργίας	Κατανάλωση (kWh/yr)
Ηλεκτρική ενέργεια	5.624	8.000	44.992.000

Πίνακας 3.3 Διεργασία BASF

Συσκευές	Κατανάλωση (MJ/hr)	Ώρες λειτουργίας	Κατανάλωση (MJ/yr)
Flash	27.081	8.000	216.648.000
Αποστακτική στήλη 1	13.812	8.000	110.496.000
Αποστακτική στήλη 2	27.052	8.000	216.416.000
Εναλλάκτης θερμότητας 1	74.433	8.000	595.464.000
Εναλλάκτης θερμότητας 2	21.798	8.000	174.384.000
Σύνολο			1.313.408.000

Βοηθητικές διεργασίες	Κατανάλωση (kW)	Ώρες λειτουργίας	Κατανάλωση (kWh/yr)
Ηλεκτρική ενέργεια	17.323	8.000	138.584.000

Πίνακας 3.4 Κόστος ενεργειακής κατανάλωσης διεργασίας ICI [12]

	Κατανάλωση	Κόστος (€/μονάδα)	Συνολικό κόστος (M€/yr)
Φυσικό αέριο	971.984.000	0,025	4,859
Ηλεκτρική ενέργεια	44.992.000	0,04	1,799
Σύνολο			6,658

Πίνακας 3.5 Κόστος ενεργειακής κατανάλωσης διεργασίας BASF

	Κατανάλωση	Κόστος (€/μονάδα)	Συνολικό κόστος (M€/yr)
Φυσικό αέριο	1.313.408.000	0,025	6,567
Ηλεκτρική ενέργεια	138.584.000	0,04	5,543
Σύνολο			12,11

Τώρα μπορούμε από την εξίσωση 13 να υπολογίσουμε τα μεταβλητά κόστη.

$$K_{p,ICI} = K_{r,m} + K_{e,c} = 11,34 + 6,658 = 17,998 \text{ M€/yr}$$

$$K_{p,BASF} = K_{r,m} + K_{e,c} = 11,34 + 12,11 = 23,45 \text{ M€/yr}$$

### 3.2 Εργατικά κόστη

Τα εργατικά κόστη υποτίθεται πως είναι 1,5 M€/yr για πέντε βάρδιες όπως δίνεται στη βιβλιογραφία και για τις δύο διεργασίες [10].

### 3.3 Κόστος πάγιας επένδυσης

Το κόστος πάγιας επένδυσης υπολογίζονται με τη μέθοδο Zevnik-Buchanan [9]. Η μέθοδος απαιτεί ως δεδομένα πληροφορίες σχετικά με τον αριθμό των λειτουργικών μονάδων, την ικανότητα παραγωγής, εκτίμηση για

τον δείκτη κατασκευαστικού κόστους καθώς επίσης και εκτίμηση για την πολυπλοκότητα της διεργασίας. Η εξίσωση για τον υπολογισμό του πάγιου κόστους παρουσιάζεται παρακάτω ενώ λεπτομερείς υπολογισμοί παρατίθενται στο Παράρτημα IV.

$$I = N \square CPF \square 1,33 \square [CCI/300] \quad (\text{εξίσωση 14})$$

Όπου N: αριθμός λειτουργικών μονάδων

CPF: κόστος ανά λειτουργική μονάδα

CCI: δείκτης κόστους κατασκευής

Η συνολική ικανότητα παραγωγής των διεργασιών είναι 100kton/yr (222Mlb/yr). Ο συντελεστής πολυπλοκότητας (complexity factor) της διεργασίας ICI υπολογίζεται πως είναι 4,4 και το άμεσο κόστος πάγιας επένδυσης ανά λειτουργική μονάδα (CPF) 0,8 M\$. Αντίστοιχα ο συντελεστής πολυπλοκότητας της διεργασίας BASF είναι 7,6 και το CPF = 1,4 M\$.

Οι λειτουργικές μονάδες είναι επτά και περιλαμβάνουν τον συμπιεστή, τον αντιδραστήρα, δύο αποστακτικές στήλες, ένα flash καθώς και δύο μονάδες για αποθήκευση και για απόθεση (disposal). Ο δείκτης κόστους κατασκευής για 2005 δίνεται 549,5 [10].

Άρα από την εξίσωση 14:

$$I_{ICI} = 7 \square 0,8 \square 1,33 \square (549,5/300) = 13,64 \text{ M\$/yr}$$

$$I_{BASF} = 7 \square 1,4 \square 1,33 \square (549,5/300) = 23,87 \text{ M\$/yr}$$

Το πάγιο κόστος υπολογίζεται  $I_{ICI} = 13,64 \text{ M\$/yr}$  και  $I_{BASF} = 23,87 \text{ M\$/yr}$  το οποίο αν μετατραπεί σε ευρώ με ισοτιμία  $1\text{€} = 1,21\text{\$}$  [13] προκύπτει  $I_{ICI} = 11,27 \text{ M€/yr}$  και  $I_{BASF} = 23,87 \text{ M€/yr}$ .

### 3.4 Ετήσια κόστη παραγωγής

Η εξίσωση 4.1 μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να βρούμε την αξία από τα ετήσια κόστη παραγωγής:

$$K_{ICI} = 1,15 \square 17,998 + 2,6 \square 1,5 + 0,13 \square 11,27 = 26,06 \text{ M€}/\text{yr}$$

$$K_{BASF} = 1,15 \square 23,45 + 2,6 \square 1,5 + 0,13 \square 23,87 = 33,97 \text{ M€}/\text{yr}$$

Το  $K$  περιλαμβάνει τα κόστη των υλικών, των εργατικών και της πάγιας επένδυσης αλλά δεν περιλαμβάνει το επιτόκιο (interest costs) και την απόσβεση (depreciation).

### 3.5 Κόστος παραγωγής του προϊόντος

Υποθέτουμε πως το επιτόκιο είναι το 10% του μισού κόστους πάγιας επένδυσης κόστους (Κ.Π.Ε.).

$$\text{Επιτόκιο}_{ICI} = 0,10 \square (\text{Κ.Π.Ε.}_{ICI}/2) = 0,10 (11,27/2) = 0,564 \text{ M€}/\text{yr}$$

$$\text{Επιτόκιο}_{BASF} = 0,10 \square (\text{Κ.Π.Ε.}_{BASF}/2) = 0,10 (23,87/2) = 1,194 \text{ M€}/\text{yr}$$

Υποθέτουμε επίσης ότι η οικονομική ζωή του εργοστασίου είναι 25 χρόνια και αποσβένεται γραμμικά [8]:

$$\text{Απόσβεση}_{ICI} = \text{Κ.Π.Ε.}_{ICI}/25 = 11,27/25 = 0,4508 \text{ M€}/\text{yr}$$

$$\text{Απόσβεση}_{BASF} = \text{Κ.Π.Ε.}_{BASF}/25 = 23,87/25 = 0,9548 \text{ M€}/\text{yr}$$

Το συνολικό κόστος παραγωγής του προϊόντος συμπεριλαμβανομένων των επιτοκίων και της απόσβεσης είναι, για τη διεργασία ICI:

$$K_{\text{total}} = K + \text{Επιτόκιο} + \text{Απόσβεση} = 26,06 + 0,564 + 0,4508 = 27,07 \text{ M€}/\text{yr}$$

Για τη διεργασία BASF:

$$K_{\text{total}} = K + \text{Επιτόκιο} + \text{Απόσβεση} = 33,97 + 1,194 + 0,9548 = 36,12 \text{ M€}/\text{yr}$$

Η ροή προϊόντος από την τελευταία αποστακτική στήλη είναι 100 kton/yr. Η τιμή κόστους του προϊόντος μπορεί να υπολογιστεί διαιρώντας το  $K_{total}$  με την ετήσια παραγωγή.

$$ICI: \text{Τιμή προϊόντος} = (27,07 \text{ M€}/\text{yr}) / (100 \text{ kton}/\text{yr}) = 270,7 \text{ €/ton}$$

$$BASF: \text{Τιμή προϊόντος} = (36,12 \text{ M€}/\text{yr}) / (100 \text{ kton}/\text{yr}) = 361,2 \text{ €/ton}$$

### 3.6 Αποτελέσματα Οικονομικής Ανάλυσης

Μετά το τέλος της οικονομικής ανάλυσης ακολουθεί μια σύντομη σύνοψη των αποτελεσμάτων καθώς και κάποιες προτάσεις για τη βελτίωση των διεργασιών. Στους πίνακες 4.5 και 4.6 παρουσιάζεται η τιμή της παραχθείσας μεθανόλης και το σύνολο του κάθε κόστους που επηρεάζει την τιμή.

Πίνακας 3.5 Αναλυτικά κόστη για τη διεργασία ICI

Κόστη	M€/yr
Μεταβλητά κόστη, $K_P$	17,998
Εργατικά κόστη, $L$	1,5
Κόστος πάγιας επένδυσης, $I$	11,27
Ετήσια κόστη παραγωγής, $K(=1,15 \cdot K_P \cdot 2,6 \cdot L \cdot 0,13 \cdot I)$	26,06
Επιτόκιο	0,564
Απόσβεση	0,4508
$K_{total}$	27,07

Πίνακας 3.6 Αναλυτικά κόστη για τη διεργασία BASF

Κόστη	M€/yr
Μεταβλητά κόστη, $K_P$	23,45
Εργατικά κόστη, $L$	1,5
Κόστος πάγιας επένδυσης, $I$	23,87
Ετήσια κόστη παραγωγής, $K(=1,15 \cdot K_P \cdot 2,6 \cdot L \cdot 0,13 \cdot I)$	33,97
Επιτόκιο	1,194
Απόσβεση	0,9548
$K_{total}$	36,12



Είναι φανερό πως η διεργασία ICI είναι κατά πολύ οικονομικότερη από τη διεργασία BASF. Πιο συγκεκριμένα το κόστος της διεργασίας ICI είναι 270,7 €/ton ενώ της BASF 361,2 €/ton (διαφορά 25,06%). Σε αυτό το σημείο αξίζει να σημειωθεί η εμπορική αξία της μεθανόλης αυτή τη στιγμή είναι 276 €/ton. Αυτό σημαίνει ότι η διεργασία BASF δεν είναι οικονομικώς αποδεκτή. Αντίθετα η διεργασία ICI είναι οικονομικώς βιώσιμη.

### 3.7 Προτάσεις για Ενεργειακή Βελτιστοποίηση

Από την περιγραφή της διανομής των βοηθητικών διεργασιών μπορούμε να δούμε ότι έχει η χρήση του ηλεκτρισμού που χρησιμοποιείται για θέρμανση, ψύξη καθώς και στην κανονική του μορφή έχει μεγάλη επιρροή στην τελική τιμή του προϊόντος. Υπάρχουν πολλές θερμάνσεις και ψύξεις στις δύο διεργασίες οι οποίες αν συνδυαστούν μεταξύ τους με εναλλάκτες θερμότητας οι ποσότητες ηλεκτρισμού για θέρμανση και ψύξη θα μειωθούν (Ενεργειακή Βελτιστοποίηση του συστήματος).

Ειδικότερα για την διεργασία ICI:

- Το ρεύμα RECYCLE που τροφοδοτεί το flash βρίσκεται στους 104,9 °C και το ρεύμα 11 που απομακρύνεται από το flash έχει θερμοκρασία 25 °C και περνάει από τον εναλλάκτη θερμότητας HX-2 ο οποίος το θερμαίνει στους 243,4 °C. Πιθανώς αυτές οι δύο ροές θα μπορούσαν να χρησιμοποιηθούν για εναλλαγή θερμότητας πριν την είσοδο στον εναλλάκτη HX-2 με σκοπό την μείωση της απαιτούμενης εναλλαγής θερμότητας σε αυτόν [14].
- Επίσης το ρεύμα 13 θα μπορούσε να χρησιμοποιηθεί ως καύσιμη ύλη, υποκαθιστώντας μέρος του φυσικού αερίου, καθώς η σύσταση του επιτρέπει αυτή τη χρήση [14], [15] .

## 4. Συμπεράσματα

Πίνακας 4.1 Συγκριτικά αποτελέσματα ενεργειακής και οικονομικής ανάλυσης

	<b>BASF</b>	<b>ICI</b>	<b>Ποσοστό Μείωσης</b>
<b>Ενεργειακή κατανάλωση</b>	<b>58.579 kW</b>	<b>35.025 kW</b>	<b>40,2%</b>
<b>Κόστος Παραγόμενης Μεθανόλης</b>	<b>361,2 €/ton</b>	<b>261,5 €/ton</b>	<b>25,06%</b>

Είναι φανερό από τα αποτελέσματα της ενεργειακής και οικονομικής ανάλυσης ότι η διεργασία της ICI υπερτερεί σε όλα τα σημεία αυτής της BASF. Η χρήση του νέου καταλύτη που πρώτη χρησιμοποίησε η ICI οδήγησε σε ηπιότερες συνθήκες αντίδρασης (10 MPa και 200 °C έναντι 30MPa και 400 °C ) με άμεση συνέπεια αυτό να επιφέρει μείωση της συνολικής ενέργειας που απαιτεί η διεργασία κατά 40,2% σύμφωνα με τα αποτελέσματα που λήφθηκαν από το πρόγραμμα Aspen Plus.

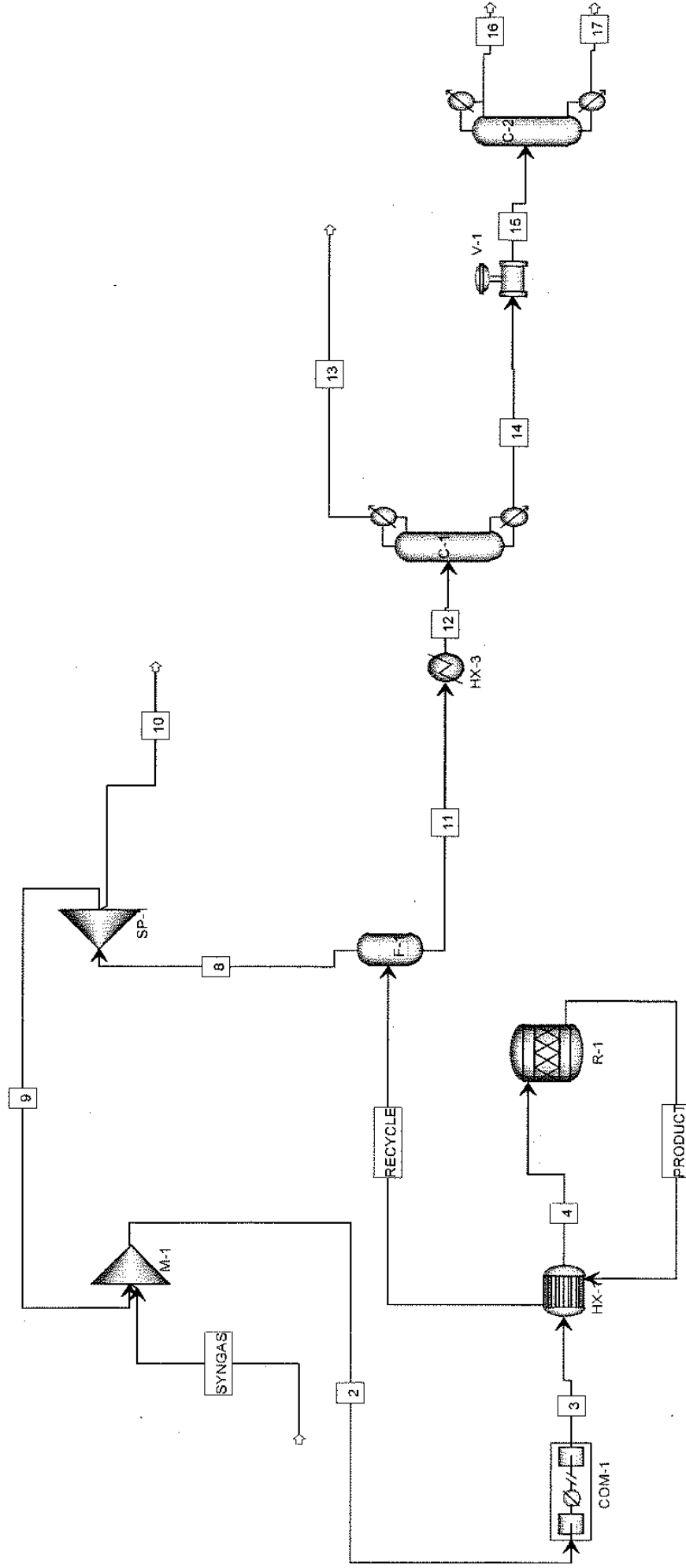
Επιπλέον η οικονομική ανάλυση που ακολούθησε οδήγησε στη διαπίστωση ότι η μεθανόλη που παράγεται με τη μέθοδο ICI είναι κατά 25,06% οικονομικότερη από τη μεθανόλη με τη μέθοδο BASF. Συγκρίνοντας την εμπορική τιμή της μεθανόλης σήμερα, που είναι 276 €/ton, με τα κόστη που προέκυψαν από την οικονομική ανάλυση, προκύπτει το συμπέρασμα ότι μόνο η μέθοδος της ICI είναι οικονομικά ανταγωνιστική. Βέβαια το κόστος παραγωγής των 270,7 €/ton της μεθόδου ICI θα μπορούσε να μειωθεί περαιτέρω αν γίνει ενεργειακή βελτιστοποίηση του συστήματος.

## 5. Βιβλιογραφία

- [1] <http://en.wikipedia.org/wiki/Methanol>
- [2] <http://www.corporate.basf.com>
- [3] Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology, 2<sup>nd</sup> edition, Volume 14, p. 100-102.
- [4] Ulmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry, 7<sup>th</sup> edition, New York, 2005.
- [5] <http://www.eere.energy.gov/afdc/altfuel/methanol.html>
- [6] [http://www.chemicals-technology.com/projects/atlas\\_methanol/index.html#atlas\\_methanol3](http://www.chemicals-technology.com/projects/atlas_methanol/index.html#atlas_methanol3)
- [7] Aspen Plus v.12.1, helping toolkit
- [8] Α.Ι. Καράμπελας, “Σχεδιασμός Χημικών Εγκαταστάσεων”, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης
- [9] F.C. Zevnik, R.L. Buchanan, Generalized Correlation of Process Investment; Chemical Engineering Progress, vol.59, No.2, 1963, 70-77
- [10] W.D. Seider, J.D. Seader, D.R. Lewin, Product & Process Design Principles, John Wiley and sons, Inc., New York, 2004
- [11] Εταιρεία Παροχής Αερίου Θεσσαλονίκης
- [12] [http://www.energia.gr/prices\\_gas\\_gr.php](http://www.energia.gr/prices_gas_gr.php),  
[http://www.energia.gr/prices\\_electric\\_gr.php](http://www.energia.gr/prices_electric_gr.php)

- [13] <http://www.x-rates.com/d/USD/EUR/data30.html>
- [14] Π.Α. Πηλαβάκης, “Μοντελοποίηση και Βελτιστοποίηση Βιομηχανικών Συστημάτων”, Πανεπιστήμιο Δυτικής Μακεδονίας
- [15] [www.ylg.ac.be/lasc/bibli/heyen-1997-1.pdf](http://www.ylg.ac.be/lasc/bibli/heyen-1997-1.pdf)

## Παράρτημα Ι. Διάγραμμα Ροής



## Παράρτημα ΙΙ. Ισοζύγια Μάζας-Ενέργειας (ICI Process)

Πίνακας Π-1 Αποτελέσματα των ροών της προσομοίωσης

Stream Name	2	3	4	8	9
T, C	33,2	40	185	25	25,3
P, bar	50	101,33	101,33	97	97
Vapor Frac	1	1	1	1	1
Mole Flow, kmol/hr	7084	7084	7084	5498	4948
Mass Flow, kg/hr	42007	42007	42007	23659	21294
Volume Flow, cum/hr	4102	2197	2773	1481	1954
Enthalpy, MMBtu/hr	-157	-155,8	-125,7	-63	-56,9
Mole Flow, kmol/hr					
CO	460,60	460,60	460,60	155,72	140,15
CO <sub>2</sub>	191,77	191,77	191,77	23,17	20,86
H <sub>2</sub>	5895,55	5895,55	5895,55	4794,02	4314,62
CH <sub>3</sub> OH	8,87	8,87	8,87	9,86	8,87
H <sub>2</sub> O	0,82	0,82	0,82	0,91	0,82
CH <sub>4</sub>	525,74	525,74	525,74	512,94	461,65
Ethanol	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Dimethyl-ether	1,02	1,02	1,02	1,14	1,02
Propanol	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00

Πίνακας Π-1 Συνέχεια

Stream Name	10	11	12	13	14	15
T, C	25,3	25	243,4	218,6	264,1	73,9
P, bar	97	97	100	97	97	1
Vapor Frac	1	0	0,3	1	0	0,774
Mole Flow, kmol/hr	550	656	656	109	547	547
Mass Flow, kg/hr	2366	18347	18347	3165	15182	15182
Volume Flow, cum/hr	217	23	78	29	47	12077
Enthalpy, MMBtu/hr	-6,32	-153,2	-132,5	-18,5	-114,2	-114,2
Mole Flow, kmol/hr						
CO	15,57	4,37	4,37	4,37	0,00	0,00
CO <sub>2</sub>	2,32	3,67	3,67	3,67	0,00	0,00
H <sub>2</sub>	479,40	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
CH <sub>3</sub> OH	0,99	455,01	455,01	76,46	378,56	378,56
H <sub>2</sub> O	0,09	172,66	172,66	4,70	167,95	167,95

CH <sub>4</sub>	51,29	18,55	18,55	18,55	0,00	0,00
Ethanol	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Dimethyl-ether	0,11	1,04	1,04	0,99	0,05	0,05
Propanol	0,00	0,46	0,46	0,06	0,40	0,40

Πίνακας Π-1 Συνέχεια

Stream Name	16	17	PRODUCT	RECYCLE	SYNGAS
T, C	64,2	98	200	104,9	50
P, bar	1	1	100	98	50
Vapor Frac	0	0	1	0,942	1
Mole Flow, kmol/hr	378	168	6154	6154	2136
Mass Flow, kg/hr	12121	3061	42007	42007	20713
Volume Flow, cum/hr	16	3	2833	3431	1172
Enthalpy, MMBtu/hr	-84,2	-44,7	-160,7	-190,9	-100,3
Mole Flow, kmol/hr					
CO	0,00	0,00	160,09	160,09	320,46
CO <sub>2</sub>	0,00	0,00	26,85	26,85	170,91
H <sub>2</sub>	0,00	0,00	4794,02	4794,02	1580,93
CH <sub>3</sub> OH	377,93	0,63	464,87	464,87	0,00
H <sub>2</sub> O	0,52	167,44	173,56	173,56	0,00
CH <sub>4</sub>	0,00	0,00	531,50	531,50	64,09
Ethanol	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Dimethyl-ether	0,05	0,00	2,18	2,18	0,00
Propanol	0,00	0,40	0,46	0,46	0,00

## Παράρτημα III. Ισοζύγια Μάζας-Ενέργειας (BASF Process)

Πίνακας Π-2 Αποτελέσματα ροών της προσομοίωσης

Stream Name	2	3	4	8	9
T, C	33,2	40	370	25	25,3
P, bar	50	304	304	97	97
Vapor Frac	1	1	1	1	1
Mole Flow, kmol/hr	7084	7084	7084	5498	4948
Mass Flow, kg/hr	42007	42007	42007	23659	21294
Volume Flow, cum/hr	4102	991,4	1361,7	1481	1954
Enthalpy, MMBtu/hr	-157	-155,101	-84,55	-63,274	-56,94
Mole Flow, kmol/hr					
CO	460,60	460,60	460,60	155,72	140,15
CO <sub>2</sub>	191,77	191,77	191,77	23,17	20,86
H <sub>2</sub>	5895,55	5895,55	5895,55	4794,02	4314,62
CH <sub>3</sub> OH	8,87	8,87	8,87	9,86	8,87
H <sub>2</sub> O	0,82	0,82	0,82	0,91	0,82
CH <sub>4</sub>	525,74	525,74	525,74	512,94	461,65
Ethanol	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Dimethyl-ether	1,02	1,02	1,02	1,14	1,02
Propanol	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00

Πίνακας Π-2 Συνέχεια

Stream Name	10	11	12	13	14	15
T, C	25,3	25	243,4	218,6	264,1	73,9
P, bar	97	97	100	97	97	1
Vapor Frac	1	0	0.3	1	0	0.774
Mole Flow, kmol/hr	550	656	656	109	547	547
Mass Flow, kg/hr	2366	18347	18347	3165	15182	15182
Volume Flow, cum/hr	217	23	78	29	47	12077
Enthalpy, MMBtu/hr	-6,327	-153,23	-132,6	-18,55	-114,21	-114,21
Mole Flow, kmol/hr						
CO	15,57	4,37	4,37	4,37	0,00	0,00
CO <sub>2</sub>	2,32	3,67	3,67	3,67	0,00	0,00
H <sub>2</sub>	479,40	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
CH <sub>3</sub> OH	0,99	455,01	455,01	76,46	378,56	378,56
H <sub>2</sub> O	0,09	172,66	172,66	4,70	167,95	167,95
CH <sub>4</sub>	51,29	18,55	18,55	18,55	0,00	0,00



Ethanol	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Dimethyl-ether	0,11	1,04	1,04	0,99	0,05	0,05
Propanol	0,00	0,46	0,46	0,06	0,40	0,40

Πίνακας Π-2 Συνέχεια

Stream Name	16	17	PRODUCT	RECYCLE	SYNGAS
T, C	64,2	98	400	101,6	50
P, bar	1	1	300	98	50
Vapor Frac	0	0	1	0.942	1
Mole Flow, kmol/hr	378	168	6154	6154	2136
Mass Flow, kg/hr	12121	3061	42007	42007	20713
Volume Flow, cum/hr	16	3	1226,7	3380	1172
Enthalpy, MMBtu/hr	-84,12	-44,7	-121,9	-192,517	-25
Mole Flow, kmol/hr					
CO	0,00	0,00	160,09	160,09	320,46
CO <sub>2</sub>	0,00	0,00	26,85	26,85	170,91
H <sub>2</sub>	0,00	0,00	4794,02	4794,02	1580,93
CH <sub>3</sub> OH	377,93	0,63	464,87	464,87	0,00
H <sub>2</sub> O	0,52	167,44	173,56	173,56	0,00
CH <sub>4</sub>	0,00	0,00	531,50	531,50	64,09
Ethanol	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Dimethyl-ether	0,05	0,00	2,18	2,18	0,00
Propanol	0,00	0,40	0,46	0,46	0,00

## Παράρτημα IV. Κόστος Πάγιας Επένδυσης

Το συνολικό κόστος πάγιας επένδυσης υπολογίζεται με τη μέθοδο Zevnik-Buchanan. Η εξίσωση της μεθόδου είναι η εξής:

$$I = N \square CPF \square 1,33 \square [CCI/300] \quad (\text{εξίσωση Π-1})$$

Όπου  $N$  = αριθμός λειτουργικών μονάδων

$CPF$  = κόστος ανά λειτουργική μονάδα

$CCI$  = δείκτης κατασκευαστικού κόστους

Για τον υπολογισμό του κόστους ανά λειτουργική μονάδα χρειάζεται μια εκτίμηση για την πολυπλοκότητα της μονάδας (complexity factor) η οποία μπορεί να δοθεί από την ακόλουθη εξίσωση:

$$CF = 2 \square 10^{(F_t + F_p + F_a)} \quad (\text{εξίσωση Π-2})$$

Όπου  $F_t$ : Συντελεστής Θερμοκρασίας

$F_p$ : Συντελεστής Πίεσης

$F_a$ : Συντελεστής Υλικού Κατασκευής

Η μέγιστη θερμοκρασία της διεργασίας είναι αυτή του αντιδραστήρα 473 K για την ICI και 673 K για την BASF. Από το σχήμα 1 στο [9] μπορούμε να δούμε ότι ο συντελεστής θερμοκρασίας είναι  $F_T = 0,04$  και  $F_T = 0,08$  αντίστοιχα.

Η μέγιστη πίεση της διεργασίας ICI είναι 10 MPa και από το σχήμα 2 στο [9] βλέπουμε ότι ο συντελεστής πίεσης  $F_P = 0,2$ . Αντίστοιχα, η μέγιστη πίεση της διεργασίας BASF είναι 30 MPa και από ο συντελεστής πίεσης  $F_P = 0,4$ .

Το υλικό που χρησιμοποιείται είναι ανοξείδωτο ατσάλι SS400 από το οποίο παίρνουμε συντελεστή κράματος (alloy factor)  $F_a = 0,1$  από τον πίνακα 1 στο [9].

Έτσι η τιμή του CF προκύπτει  $CF = 4,37$  για τη διεργασία ICI και  $CF = 7,6$  για αυτή της BASF.

Τα αποτελέσματα της προσομοίωσης δίνουν δυνατότητα παραγωγής του κυρίου προϊόντος 100kton/yr (222Mlb/yr). Από το σχήμα 3 στο [9] υπολογίζεται ότι το άμεσο κόστος πάγιας επένδυσης ανά λειτουργική μονάδα (CPF) για συντελεστή πολυπλοκότητας 4,37 και ετήσια παραγωγή 222Mlb/yr είναι 0,8 M\$ για τη διεργασία ICI. Ανάλογα το άμεσο κόστος πάγιας επένδυσης ανά λειτουργική μονάδα για τη διεργασία BASF είναι 1,4 M\$ (για συντελεστή πολυπλοκότητας 7,6 και την ίδια ετήσια παραγωγή).

Ο δείκτης κατασκευαστικού κόστους (CCI) δίνεται στη βιβλιογραφία όπου υποθέτουμε ότι είναι 549,5 για το 2005 και για τις δύο διεργασίες. Ο δείκτης αυτός χρειάζεται για να φέρουμε τους υπολογισμούς στη σημερινή ημερομηνία.

Ο αριθμός των λειτουργικών μονάδων (N) είναι το νούμερο των σημαντικών λειτουργιών της διεργασίας. Οι στήλες και οι αντιδραστήρες είναι σημαντικές λειτουργίες, αλλά οι εναλλάκτες θερμότητας και οι splitters δεν θεωρούνται ως λειτουργικές μονάδες. Και στις δύο διεργασίες υπάρχουν πέντε λειτουργικές μονάδες: 2 αποστακτικές στήλες, ένας αντιδραστήρας, ένας συμπιεστής και ένα flash. Προτίθενται δύο μονάδες για αποθήκευση και απόθεση. Έτσι συνολικά επτά λειτουργικές μονάδες χρησιμοποιούνται στους υπολογισμούς.

Το συνολικό κόστος πάγιας επένδυσης μπορεί τώρα να υπολογιστεί από την εξίσωση Π-1

$$I_{ICI} = 7 \cdot 0,8 \cdot 1,33 \cdot (549,5/300) = 13,64 \text{ M\$/yr}$$

Το πάγιο κόστος της διεργασίας ICI υπολογίζεται  $I = 13,64 \text{ M\$/yr}$  το οποίο αν μετατραπεί σε ευρώ με ισοτιμία  $1\text{€} = 1,21\text{\$}$  προκύπτει  $11,27 \text{ M€/yr}$ .

$$I_{\text{BASF}} = 7 \times 1,4 \times 1,33 \times (549,5/300) = 23,87 \text{ M\$/yr}$$

Το πάγιο κόστος της διεργασίας BASF υπολογίζεται  $I = 23,87 \text{ M\$/yr}$  δηλαδή  $19,73 \text{ M€/yr}$ .

## Παράρτημα V. Aspen Plus

Σε αυτό το παράρτημα παρουσιάζονται μερικές εικόνες από το πρόγραμμα Aspen Plus στο οποίο έγινε η προσομοίωση των διεργασιών.

Εικόνα Π-1: Προσδιορισμός της σύστασης και των συνθηκών του αερίου σύνθεσης.

Aspen Plus - methanol\_lowP\_T\_v1.apw - [Stream SYNGAS (MATERIAL) - Data Browser]

File Edit View Data Tools Run Plot Library Window Help

SYNGAS MET Input

Specifications Flash Options PSD Component Attr. EO Options

Substream name: MIXED Ref Temperature

State variables:

Temperature: 50 C

Pressure: 5 MPa

Total flow: 2400 kmol/hr

Solvent:

Composition:

Component	Value
CARBO-01	0,15
CARBO-02	0,08
HYDRO-01	0,74
METHA-01	
WATER	
METHA-02	0,03
ETHAN-01	
DIMET-01	
1-PRO-01	
Total:	1

Lets you type the component flow, fraction or concentration. See Help.

Results Available. Unreconciled.

Mixers/Splitters Separators Heat Exchangers Columns Reactors Pressure Changers Manipulators Solids User Models

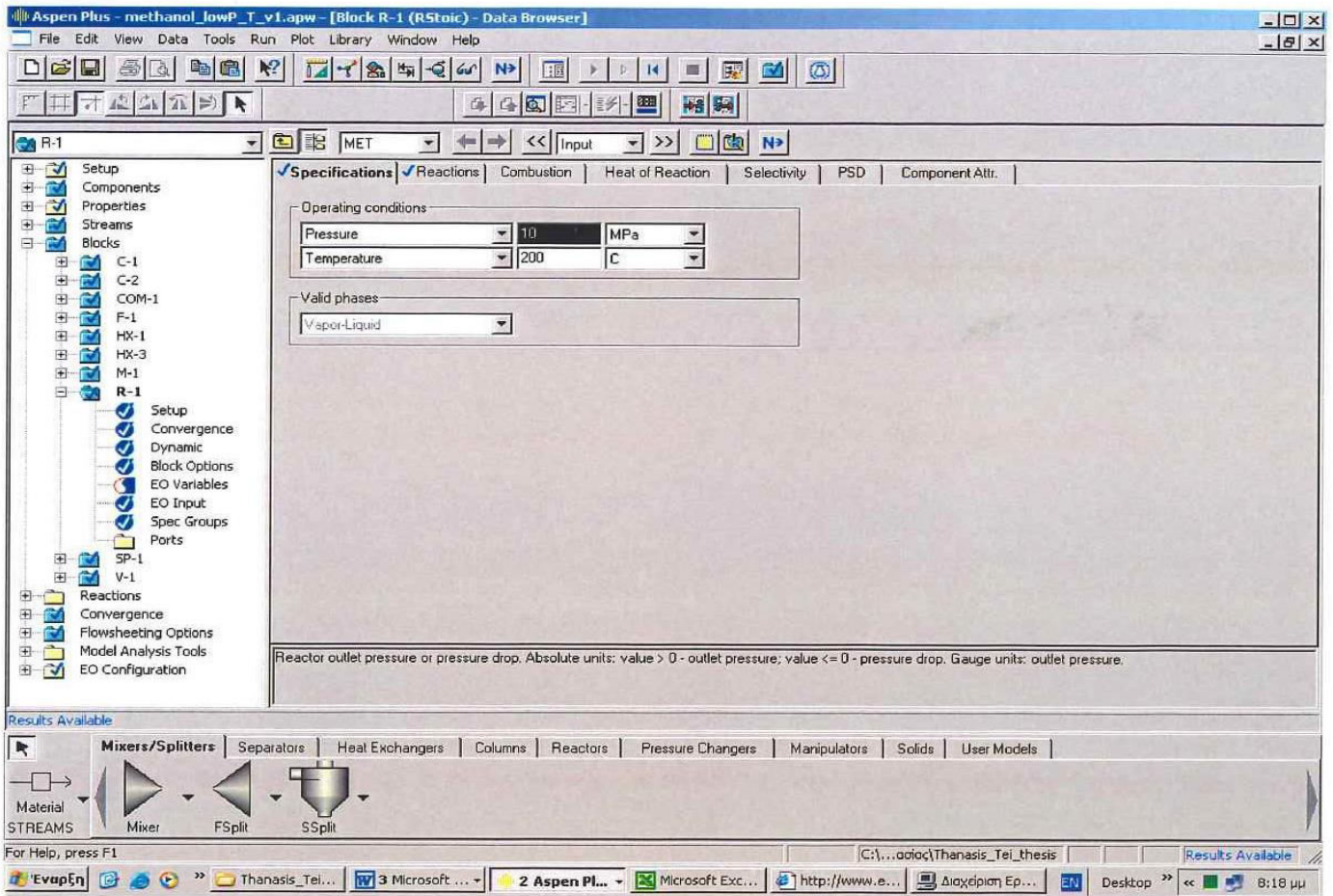
Material STREAMS Mixer FSplit SSplit

For Help, press F1

C:\...σσιος\Thanasis\_Tei\_thesis Results Available

Εναρξη Thanasis\_Tei... 3 Microsoft ... 2 Aspen Pl... Microsoft Exc... http://www... Διαχείριση Ερ... Desktop 8:14 μμ

Εικόνα Π-2: Προσδιορισμός των συνθηκών λειτουργίας του αντιδραστήρα (ICI process)



Εικόνα Π-3: Ορισμός των αντιδράσεων που λαμβάνουν χώρα στον αντιδραστήρα (ICI & BASF process)

The screenshot displays the Aspen Plus 'Data Browser' for Block R-1. The 'Reactions' tab is active, showing a table of five reactions. The table columns are 'Rxn No.', 'Specification type', and 'Stoichiometry'. Below the table are buttons for 'New...', 'Edit', and 'Delete'. A checkbox for 'Reactions occur in series' is present but unchecked. The bottom of the window shows a toolbar with icons for 'Mixer', 'FSplit', and 'SSplit', and a Windows taskbar at the very bottom.

Rxn No.	Specification type	Stoichiometry
1	Frac. conversion	CARBO-01 + 2 HYDRO-01 → METHA-01
2	Frac. conversion	CARBO-02 + HYDRO-01 → CARBO-01 + WATER
3	Frac. conversion	3 CARBO-01 + 6 HYDRO-01 → 1-PRO-01 + 2 WATER
4	Frac. conversion	CARBO-02 + 4 HYDRO-01 → METHA-02 + 2 WATER
5	Frac. conversion	2 CARBO-01 + 4 HYDRO-01 → DIMET-01 + WATER

Εικόνα Π-4: Ορισμός στοιχειομετρίας αντίδρασης

The screenshot displays the Aspen Plus interface for defining reaction stoichiometry. The main window shows a process flow diagram with a reactor block 'R-1' selected. The 'Edit Stoichiometry' dialog box is open, showing the following details:

- Reaction No.:** 1
- Reactants:**

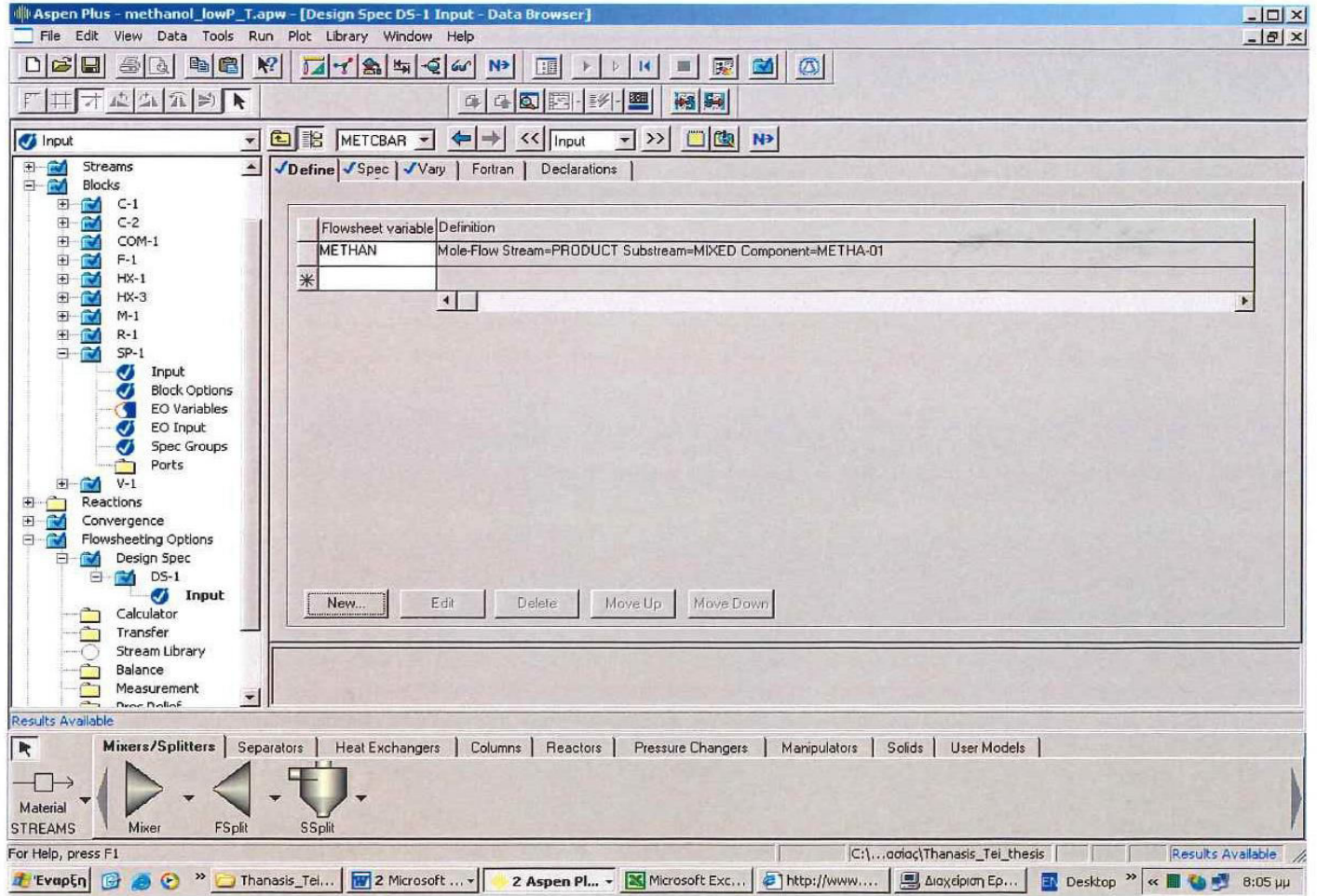
Component	Coefficient
CARBO-01	-1
HYDRO-01	-2
- Products:**

Component	Coefficient
METHA-01	1
- Products generation:**
  - Molar extent: [ ] [ ] mol/hr
  - Fractional conversion: 0.99 of component CARBO-01

The bottom of the window shows the 'Mixer/Splitters' toolbar with icons for Material, Mixer, FSplit, and SSplit. The Windows taskbar at the bottom indicates the system time as 8:21 μμ.



Εικόνες Π-5, Π-6, Π-7: Δημιουργία Design Specification για τον υπολογισμό του αερίου σύνθεσης που απαιτείται για την παραγωγή 100 kton μεθανόλης/yr



Aspen Plus - methanol\_lowP\_T\_v1.apw - [Design Spec DS-1 Input - Data Browser]

File Edit View Data Tools Run Plot Library Window Help

Input

Define Spec Vary Fortran Declarations

Design specification expressions

Spec: METHAN

Target: 465

Tolerance: 1

Specification: Constant, or Fortran expression in terms of Flowsheet vars on Define / Fortran sheets. Right-click to select Variable List, then use drag-and-drop to copy variables defined on Define sheets.

Results Available

Mixers/Splitters Separators Heat Exchangers Columns Reactors Pressure Changers Manipulators Solids User Models

Material STREAMS Mixer FSplit SSplit

For Help, press F1

C:\...ασιας\Thanasis\_Tei\_thesis Results Available

EvapEn Thanasis\_Tei... 3 Microsoft ... 2 Aspen Pl... Microsoft Exc... http://www... Διαχείριση Ερ... Desktop 8:08 μμ

Aspen Plus - methanol\_lowP\_T\_v1.apw - [Design Spec DS-1 Input - Data Browser]

File Edit View Data Tools Run Plot Library Window Help

Input

Define Spec Vary Fortran Declarations

Manipulated variable

Type: Stream-Var

Stream name: SYNGAS

Substream: MXED

Variable: MOLE-FLOW

Manipulated variable limits

Lower: 0

Upper: 3000

Report labels

Line 1: Line 2: Line 3: Line 4:

Step size parameters

Step size:

Maximum step size:

Access a non-component-dependent stream variable, such as temperature or total flow.

Results Available

Mixers/Splitters Separators Heat Exchangers Columns Reactors Pressure Changers Manipulators Solids User Models

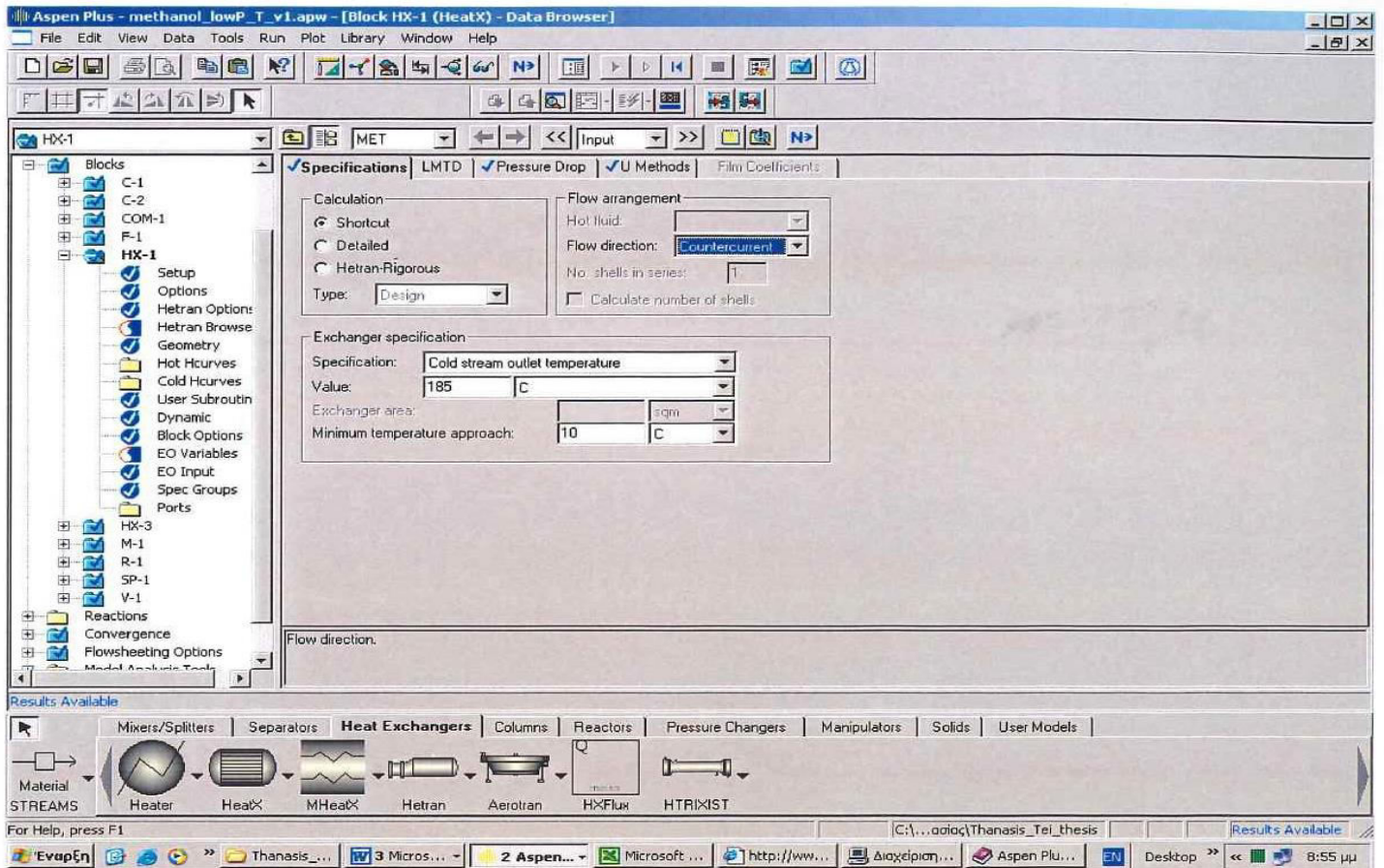
Material STREAMS Mixer FSplit SSplit

For Help, press F1

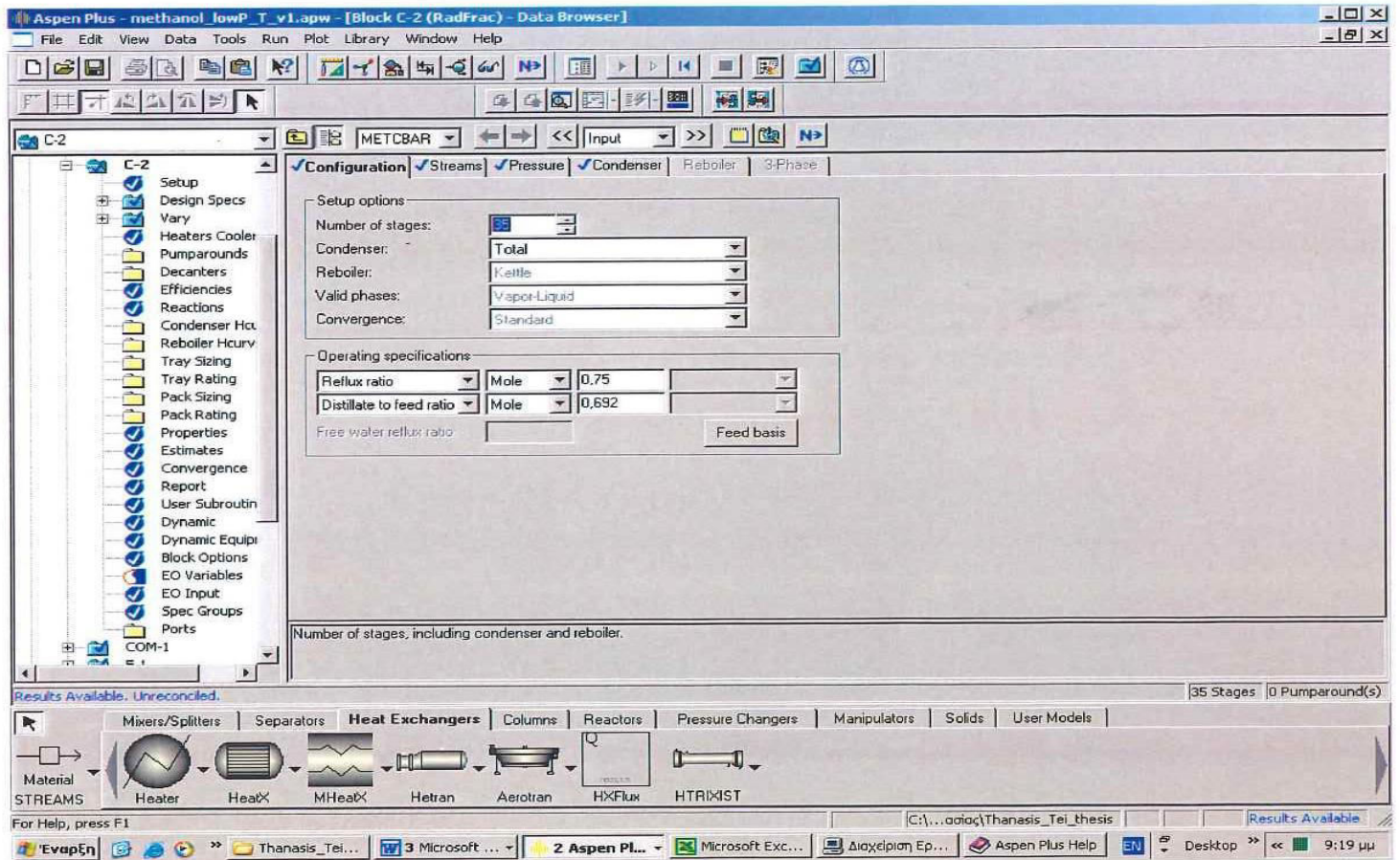
C:\...ασιας\Thanasis\_Tei\_thesis Results Available

EvapEn Thanasis\_Tei... 3 Microsoft ... 2 Aspen Pl... Microsoft Exc... http://www... Διαχείριση Ερ... Desktop 8:08 μμ

Εικόνα Π-8: Εισαγωγή δεδομένων για τον εναλλάκτη θερμότητας 1 (HX-1)



Εικόνες Π-9, Π-10: Εισαγωγή δεδομένων για την αποστακτική στήλη 2 (C-2)



Aspen Plus - methanol\_lowP\_T\_v1.apw - [Block C-2 (RadFrac) - Data Browser]

File Edit View Data Tools Run Plot Library Window Help

METCBAR << Input >>

Configuration Streams Pressure Condenser Reboiler 3-Phase

Feed streams:

Name	Stage	Convention
15	2	Above-Stage

Product streams:

Name	Stage	Phase	Basis	Flow	Units	Flow ratio	Feed specs
16	1	Liquid	Mole		kmol/hr		Feed basis
17	35	Liquid	Mole		kmol/hr		Feed basis

Feed stage number:

Results Available. Unreconciled. 35 Stages 0 Pumparound(s)

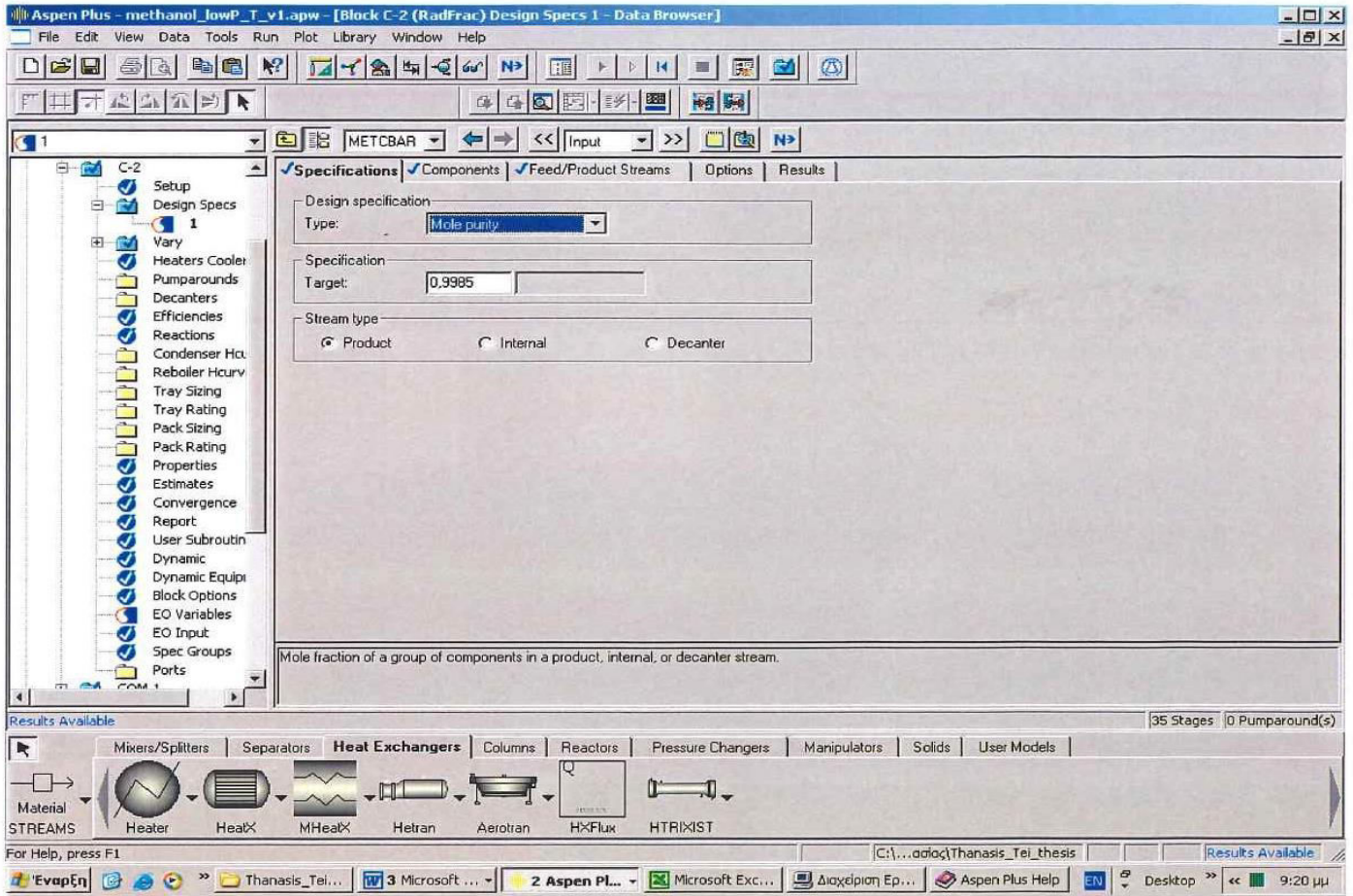
Mixers/Splitters Separators Heat Exchangers Columns Reactors Pressure Changers Manipulators Solids User Models

Material STREAMS Heater HeatX MHeatX Heltran Aerotran HXFlux HTRIXIST

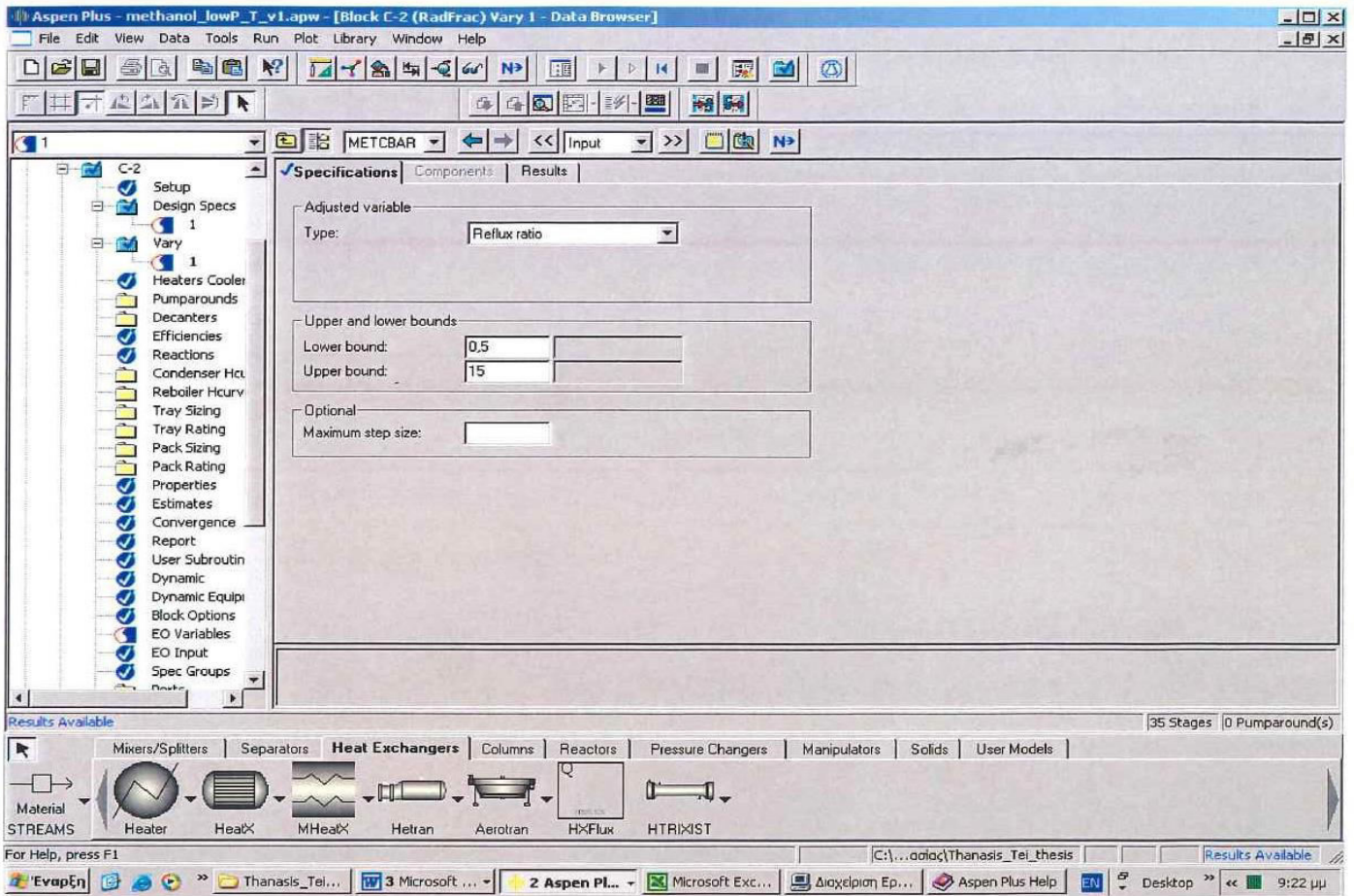
For Help, press F1 C:\...ασίας\Thanasis\_Tei\_thesis Results Available

Ενάρξη Thanasis\_Tei... 3 Microsoft ... 2 Aspen Pl... Microsoft Exc... Διαχείριση Ερ... Aspen Plus Help Desktop 9:19 μμ

Εικόνες Π-11, Π-12, Π-13, Π-14: Δημιουργία σχεδιαστικού προσδιορισμού για την αποστακτική στήλη 2 (C-2)









Εικόνα Π-15: το λειτουργικό περιβάλλον του Aspen Plus μαζί με το διάγραμμα ροής της διεργασίας

