

2349
Nr.

Laboratorium voor Chemische Technologie

Verslag behorende
bij het fabrieksvoorontwerp
van

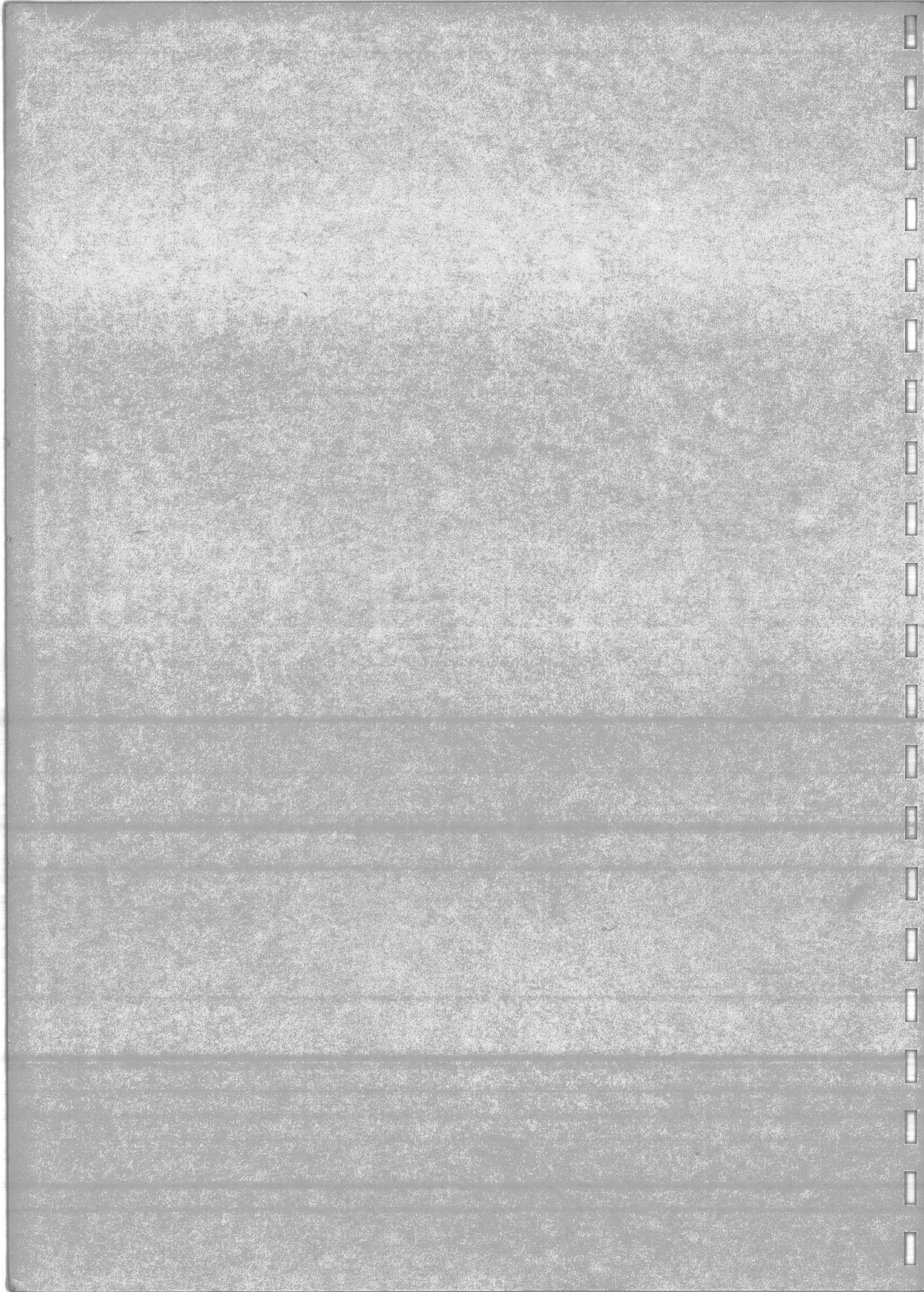
P. Bussemaker / R.R. Pas

onderwerp:

Modules Flowsheet Programma

adres: Ketelstraat 22
Koozmarkt 71

opdrachtdatum: sept 72
verslagdatum: jan 73



LABORATORIUM VOOR CHEMISCHE TECHNOLOGIE

Rapport van het
FABRIEKSVORONTWERP

UNIVERSELE MODULES EN AANSLUITENDE PROGRAMMAS VOOR EEN TE
ONTWIKKELEN ALGEMEEN FLOW-SHEET EXECUTIVE PROGRAMMA GETOETST
AAN HET FLOW-SHEET VAN DE "SYNTHESEGAS-BEREIDING VOOR EEN
METHANOLFABRIEK"

P. Bussemaker
R. R. Pas
september-januari '72/73

P. Bussemaker
Ketelstraat 22
Delft-130607

R. R. Pas
Koormarkt 71
Delft-124373

Opdracht.

Het schrijven van modules voor unit operations en unit processes en aanverwante programmas volgens geprogrammeerd model ter aanbieding aan een door COMPRIMO in samenwerking met de TH te ontwikkelen ALGEMEEN FLOW-SHEET EXECUTIVE PROGRAMMA aan de hand van een uitgewerkt Flow-Sheet van twee recente fabrieksvoortontwerpen voor de " Synthesegas-bereiding voor een methanol-fabriek " door A.de Bruijn en E.I.L.D.G.Margherita en door B.T.J.Jaski en M.D.van Weele.

Inleiding.

Dit rapport omvat een inventaris van de gebruikte modules en subroutines en een summiere beschrijving van de structuur van de gemaakte programmas voorzover de door COMPRIMO gepresenteerde voorbeelden daarin nog uitbreiding behoeven.

Indeling.

De opzet van de programmas is dusdanig dat weinig geefende FORTRAN-IV programmeurs in korte tijd de werking van de programmas kunnen begrijpen zonder uitgebreide gebruikershandleidingen te hoeven raadplegen naast het programma. Daartoe is de volgende indeling aangehouden:

- vooraan het programma,

1. - Type programma en naam waaronder het aangeroepen kan worden
2. - Korte typering van de werking
3. - Naam programmeur, huisadres en afstudeerafdeling met telefoonnummers.
- Datum van het programma
4. - Aannamen bij een toegepast overdrachtsmodel (facultatief)
5. - Lijst van mede aan te sluiten subroutines en function-subroutines
6. - Volledige variabelen-lijst (omschrijving van de functie en gebruikte dimensies), en

- binnen het programma waar nodig ter plaatse identificatie van de soort berekening met literatuuropgave.

Inventarisatie.

Voor het inventariseren van de gemaakte programmas lijkt een vermelding van de volgende kenmerken zinvol:

1. NAAM - programmanaam
2. TYPE - soort programma; module, subroutine, function-subroutine
3. KORTE BESCHRIJVING - omschrijving van het model voor het programma
4. ACTIE - opgave van het soort berekeningen dat uitgevoerd wordt
5. BEPERKINGEN - eisen die het model stelt
6. ALARMERINGEN - ingebouwde beveiligingen
7. UITBREIDING/
VOORSTELLEN TOT
VERBETERING - verruiming van de mogelijkheden van het programma

Verantwoording.

Een ruimere beschrijving van de programmas lijkt in een later stadium van dit project wel gewenst, doch nu nog niet absoluut noodzakelijk omdat elke gebruiker zich toch terdege in de structuur van het beschouwde programma moet verdiepen om het ontwerp van een bepaalde module te kunnen onderschrijven: de modules verkeren ook nog in een ontwikkelingsfase. Bovendien lieten het aantal modules en hulp-programmas het niet toe om binnen het bestek van dit fabrieksvoortwerp tevens uitgebreide gebruikershandleidingen te schrijven.

Naast de consequent aangehouden simpele structuur van de programmas moet het grote aantal COMMENTS voor en in het programma helpen garanderen de taak van een analyse van het programma te verlichten.

INVENTARIS VAN PROGRAMMAS

MODULES

- HEEEX1
- SPLITT
- MIXER
- COMPR
- ITER1
- FLUBED
- GNER8R
- EVAPO
- CONDNS
- PUMP

SUBROUTINES

- FYSPRO
- EQST8
- VISCG
- CONDUQ

FUNCTION-SUBROUTINES

- ENTHAL
- UNINFL
- UMAX
- ZWERM
- REYNOL
- FNUSSL

NAAM - HEEX1

TYPE - MODULE warmtewisselaar

KORTE BESCHRIJVING - Bekend zijn 2 ingangs- en 1 uitgangstemperatuur
De tweede uitgangstemperatuur wordt berekend
- Uitvoer van UxA en het log.temp.gemiddelde

ACTIE - Warmtebalans
- Iteratie naar de uitgangstemperatuur

BEPERKINGEN -

ALARMERINGEN - Bij verkeerd gekozen temperatuur waarschuwing,
doch geen stop, uitgangstemperatuur wordt ge-
lijk gemaakt aan ingangstemperatuur andere
stroom

UITBREIDING/
VOORSTELLEN TOT
VERBETERING - De module is universeel en bruikbaar voor de
eerste doorrekening van een Flow-Sheet. Aan
de hand van de uitkomsten kan hij dan vervangen
worden door een aantal modules voor specifieke
warmtewisselaars die uiteraard een groot aan-
tal gegevens vragen

NAAM

- SPLITT

TYPE

- MODULE splitter

KORTE BESCHRIJVING

- 1 Stroom wordt gesplitst in 2 stromen. Van 1 van de uitgaande stromen is de molflow of de fractie van de hoofdstroom bekend

ACTIE

- Massabalans

BEPERKINGEN

-

ALARMERINGEN

-

UITBREIDING/
VOORSTELLEN TOT
VERBETERING

NAAM - MIXER

TYPE - MODULE mixer

KORTE BESCHRIJVING - Aantal stromen wordt samengevoegd: de molfrac-
ties en de uitgangstemperatuur worden berekend

ACTIE - Massabalans
- Warmtebalans
- Iteratie naar uitgangstemperatuur

BEPERKINGEN - Alle stromen dezelfde fase

ALARMERINGEN - STOP als ingaande drukken ongelijk.
- STOP als iteratie fout loopt

UITBREIDING/
VOORSTELLEN TOT
VERBETERING

NAAM

- COMPR

TYPE

- MODULE compressor

KORTE BESCHRIJVING

- Berekening uitgangstemperatuur, vermogen en koelvermogen compressor; keuze uit isentrope, isotherme en isentrope compressie in trappen met tussenkoeling

ACTIE

- Berekening vermogens
- Temperatuurberekening

BEPERKINGEN

- Gerekend met ideaal gas; wordt geverifieerd

ALARMERINGEN

- Indien geen ideaal gas; er wordt doorgerekend alsof wel ideaal gas

UITBREIDING/
VOORSTELLEN TOT
VERBETERING

- Mogelijkheden i.v.m. trappen en koeling kunnen uitgebreid worden. Bruikbaar voor de eerste doorrekening van het Flow-Sheet, daarna aan de hand van de uitvoer vervangen door modules van specifieke compressoren welke natuurlijk veel meer gegevens vragen.

NAAM - ITER1

TYPE - MODULE iteratie

KORTE BESCHRIJVING -- Vergelijkt temperaturen van 2 stromen, waarbij 1 van deze temperaturen is vastgelegd. Geeft nieuwe waarde aan temperatuur van andere stroom. Geeft nummer volgende UNIT door aan EXEC

ACTIE - Vergelijking
- Berekening nieuwe startwaarde

BEPERKINGEN - Berekening nieuwe startwaarde is specifiek voor het Flow-Sheet

ALARMERINGEN - Na 15 iteraties wordt doorgedaan met vervolg Flow-Sheet berekeningen

UITBREIDING/
VOORSTELLEN TOT
BERBETERING - Voor iedere specifieke iteratie een eenvoudige iteratie-module schrijven

NAAM - FLUBED

TYPE -- MODULE fluid bed reactor

KORTE BESCHRIJVING -- Fluid bed reactor met interne warmteoverdracht door een in tegenstroom bewegende vaste warmtedrager

ACTIE

- Warmtebalans
- Massabalans
- Ontwerp
- Doorzet
- Drukval
- Warmteoverdracht
- Zwerm-snelheid

BEPERKINGEN

- Voeding en product qua samenstelling bekend
- Iteratie op de hand naar uitlaattemperatuur warmtedrager na keuze bedrijfsfluidisatiesnelheid
- Warmteoverdrachtsmodel primitief

ALARMERINGEN

- Fluidisatie van warmtedrager
- Uitgangssnelheid groter dan maximum fluidisatiesnelheid
- Aantal iteraties voor correctie van de zwerm-snelheid

UITBREIDING/
 VORSTELLEN TOT
 VERBETERING

- Controle op mechanisme van de warmteoverdracht (vlg. Fourier)
- Typebepaling fluidisatie afgaande op daarvoor in aanmerking komende criteria
- Automatische iteratie

NAAM - GNERSR

TYPE - MODULE fluid bed generator

KORTE BESCHRIJVING - Fluid bed generator voor thermische regeneratie van de vaste stof-inhoud

ACTIE - Massabalans
- Warmtebalans
- Ontwerp
- Doorzet
- Drukval

BEPERKINGEN - Voeding en product qua samenstelling bekend

ALARMERINGEN - Uitgangssnelheid groter dan maximum fluidisatiesnelheid

UITBREIDING/
VOORSTELLEN TOT
VERBETERING - Warmteoverdracht en controle op mechanisme (vlgs. Fourier)
- Typebepaling fluidisatie afgaande op daarvoor in aanmerking komende criteria

NAAM - EVAPO

TYPE - MODULE verdamper/warmtewisselaar

KORTE BESCHRIJVING - Verdamper/warmtewisselaar waarin de hoeveelheid te verdampen vloeistof bepaald wordt

ACTIE - Massabalans
- Warmtebalans

BEPERKINGEN - Van fase veranderende stroom moet unair/ te karakteriseren zijn

ALARMERINGEN -

UITBREIDING/
VOORSTELLEN TOT
VERBETERING - Eventueel als smelter te gebruiken
- Warmteoverdracht
- Ontwerp

NAAM - CONDENS

TYPE - MODULE condensator/warmtewisselaar

KORTE BESCHRIJVING - Condensator/warmtewisselaar waarin de hoeveelheden bepaald worden van de te condenseren component en het daarvoor benodigde koelmedium

ACTIE - Massabalans
- Warmtebalans
- Op te geven component tot elk gewenst percentage condenseerbaar

BEPERKINGEN - Slechts een component condenseerbaar per aanroep
- Controle partiaalspanning en ovenwichts-dampspanning op de hand

ALARMERINGEN -

UITBREIDING/
VOORSTELLEN TOT
VERBETERING - Eventueel als kristallisator te gebruiken
- Warmteoverdracht
- Ontwerp

NAAM - PUMP

TYPE - MODULE pomp

KORTE BESCHRIJVING - Berekening van een pomp aan de hand van rendementen

ACTIE - Massabalans
- Vermogensdissipatie

BEPERKINGEN - Vloeistofstroom moet door een component te karakteriseren zijn

ALARMERINGEN -

UITBREIDING/
VOORSTELLEN TOT
VERBETERING - Keuze type pomp automatisch laten geschieden op grond van debiet en opvoerhoogte
- Bepaling rendementen, kental waaijer, specifiek toerental naar aanleiding van het voorgaande
- Ontwerp bij convergentie van de iteratie over de twee vorige stappen
- N.P.S.H.

NAAM - FYSPRO

TYPE - SUBROUTINE invoer gebruiker

KORTE BESCHRIJVING - Inlezen diverse gegevens in COMMONS welke in FUNCTION-/SUBROUTINES gebruikt worden. Gegevens worden door gebruiker op kaarten gezet

ACTIE - Inlezen en printen gegevens van kaarten

BEPERKINGEN -

ALARMERINGEN -

UITBREIDING/
VOORSTELLEN TOT
VERBETERING - Iedere gebruiker kan FYSPRO uitbreiden en aanpassen aan de wensen van de gebruikte SUBROUTINES in het Flow-Sheet

NAAM - EQST8

TYPE - SUBROUTINE toestandsvergelijking

KORTE BESCHRIJVING - Vergelijking van Redlich en Kwong (van het twee-constanten type analoog aan Van der Waals) voor gasmengsels

ACTIE - Kritische grootheden van het mengsel
- Compressibiliteit
- Totale massastroom en debiet
- Dichtheid mengsel
- Waterstof eventueel als inert te beschouwen

BEPERKINGEN -

ALARMERINGEN - Som van de molfracties niet kloppend
- Bij drukken onder 50 atm automatisch ideaal gas-aanname
- Bij compressibiliteit groter dan .995 gelijk stellen aan 1.

UITBREIDING/
VOORSTELLEN TOT
VERBETERING -

NAAM - VISC6

TYPE - SUBROUTINE viscositeit van gasmengsels

KORTE BESCHRIJVING - Vergelijking van Herning en Zipperer voor lage druk en het principe van de gereduceerde viscositeit volgens Dean en Stiel voor hoge druk voor gasmengsels al of niet onder druk

ACTIE - Kritische grootheden van het mengsel
- Viscositeit

BEPERKINGEN - Component-gegevens bij twee temperaturniveaus in te voeren via SUBROUTINE FYSPRO

ALARMERINGEN - Ontbreken van viscositeitsgegevens
- Som van de molfracties niet kloppend
- Van methode (Dean-Stiel) gebruik gemaakt die viscositeitsgegevens niet verwerkt

UITBREIDING/
VOORSTELLEN TOT
VERBETERING - Inbouwen in een uitgebreid Physical Properties System

NAAM - CONDUQ

TYPE - SUBROUTINE warmtegeleidingsvermogen van
gasmengsels

KORTE BESCHRIJVING - Warmtegeleidingsvermogen volgens een mole-
cuulgewichtsgemiddelde-regel

ACTIE - Warmtegeleidingsvermogen

BEPERKINGEN - Componentgegevens bij twee temperatuurniveaus
in te voeren via SUBROUTINE FYSPRO

ALARMERINGEN - Ontbreken van warmtegeleidingsvermogen-
gegevens
- Som van de molfracties niet kloppend

UITBREIDING/
VOORSTELLEN TOT
VERBETERING - Inbouwen in een uitgebreid Physical Properties
System

NAAM - ENTHAL

TYPE - FUNCTION-SUBROUTINE enthalpieberekening

KORTE BESCHRIJVING - Berekening van de enthalpie van een stroom t.o.v. 298.15 K; de vormingsenthalpie wordt buiten beschouwing gelaten

ACTIE - Berekening enthalpie met 5-constanten functie
 - " " " 3- " "
 - " " " 1,2, of 3 vaste Cp-waarden

BEPERKINGEN - Reactiewarmten kunnen niet berekend worden omdat vormingsenthalpieen ontbreken
 - Iedere fase van een component wordt als een nieuwe fase van een nieuwe component beschouwd doordat de verdampingswarmte niet in de berekening is opgenomen

ALARMERINGEN -

UITBREIDING/
 VOORSTELLEN TOT
 VERBETERING - Invoering fasecode voor iedere component, zodat 1 component 1 plaats inneemt in de COMPO-tabel
 - Berekening absolute enthalpieen door invoering vormingsenthalpieen
 - Universele polynoombenadering als enige Cp-waarden gegeven zijn

NAAM - UMINFL

TYPE - FUNCTION-SUBROUTINE minimum fluidisatie

KORTE BESCHRIJVING - Bepaling minimum fluidisatie snelheid

ACTIE - Minimum fluidisatie snelheid onafhankelijk
of minimum fluidisatie porositeit en vorm-
factor bekend zijn of niet

BEPERKINGEN -

ALARMERINGEN - Dichtheid fluidum groter dan die van vaste
stof
- Minimum fluidisatie porositeit of/en vorm-
factor onbekend

UITBREIDING/
VOORSTELLEN TOT
VERBETERING

NAAM - UMAX

TYPE - FUNCTION-SUBROUTINE maximum fluidisatie

KORTE BESCHRIJVING - Bepaling maximale stationaire snelheid afhankelijk van het stromingspatroon

ACTIE - Bepaling maximum fluidisatie snelheid of stationaire valsnelheid

BEPERKINGEN -

ALARMERINGEN - Dichtheid van fluidum groter dan die van vaste stof
- Reynolds groter dan 200000.

UITBREIDING/
VOORSTELLEN TOT
VERBETERING

NAAM - ZWERM

TYPE - FUNCTION-SUBROUTINE zwermnelheid

KORTE BESCHRIJVING - Zwermnelheid volgens Richardson en Zaki

ACTIE - Bepaling zwermnelheid uit valsnelheid enkel deeltje

BEPERKINGEN -

ALARMERINGEN -

UITBREIDING/
VOORSTELLEN TOT
VERBETERING

NAAM - REYNOL

TYPE - FUNCTION-SUBROUTINE kengetal Reynolds

KORTE BESCHRIJVING - Bepaling kengetal van Reynolds

ACTIE -

BEPERKINGEN -

ALARMERINGEN -

UITBREIDING/
VOORSTELLEN TOT
VERBETERING

NAAM - FNUSSL

TYPE - FUNCTION-SUBROUTINE kengetal Nusselt.

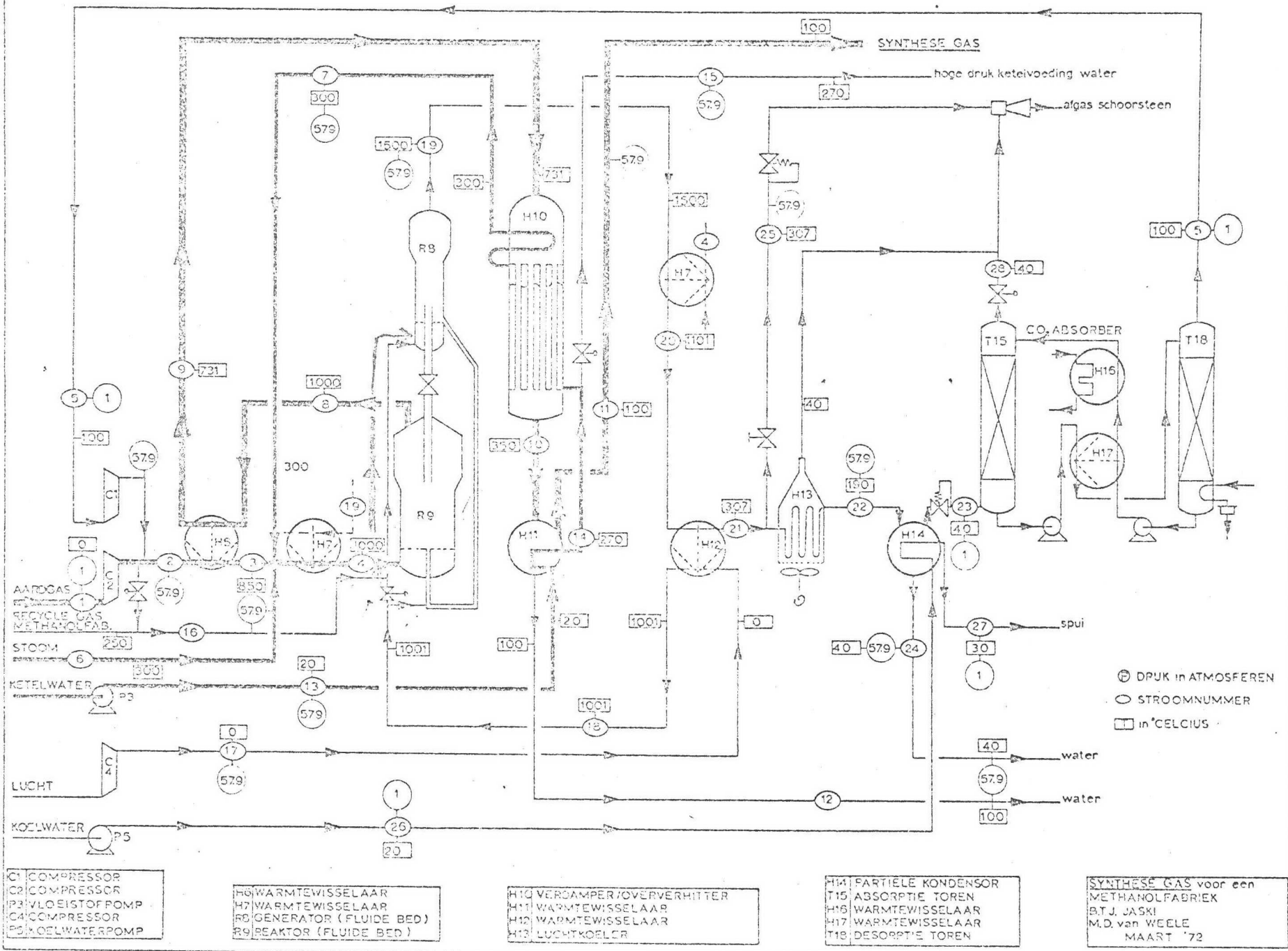
KORTE BESCHRIJVING - Bepaling kengetal van Nusselt

ACTIE -

BEPERKINGEN -

ALARMERINGEN -

UITBREIDING/
VOORSTELLEN TOT
VERBETERING



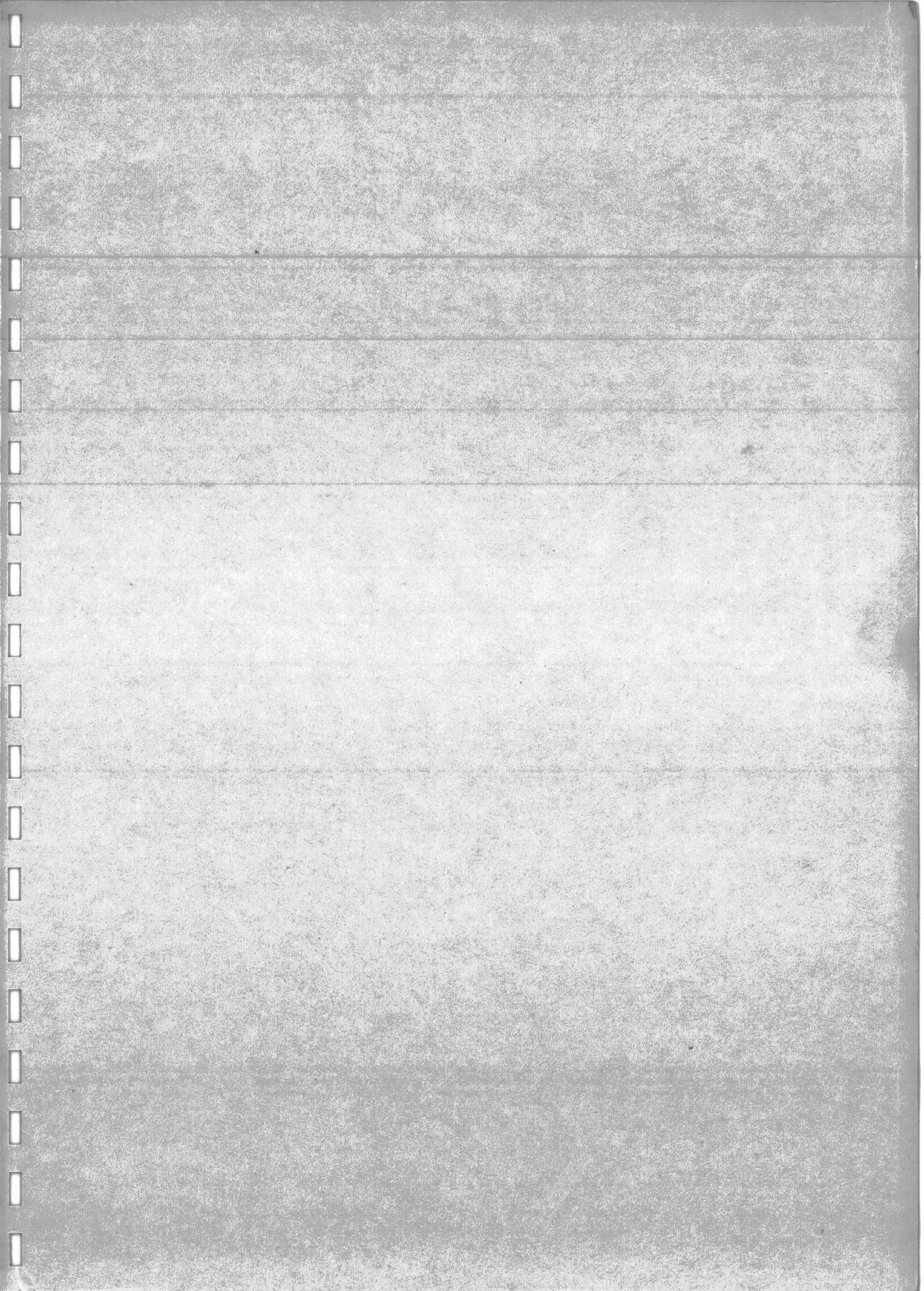
C1 COMPRESSOR
 C2 COMPRESSOR
 P3 VLOEISTOF POMP
 C4 COMPRESSOR
 P5 KOELWATERPOMP

H5 WARMTEWISSELAAR
 H7 WARMTEWISSELAAR
 R8 GENERATOR (FLUIDE BED)
 R9 REAKTOR (FLUIDE BED)

H10 VERDAMPERS/OVERVERHITTER
 H11 WARMTEWISSELAAR
 H12 WARMTEWISSELAAR
 H13 LUCHTKOELER

H14 PARTIELE KONDENSOR
 T15 ABSORPTIE TOREN
 H16 WARMTEWISSELAAR
 H17 WARMTEWISSELAAR
 T18 DESORPTIE TOREN

SYNTHESE GAS voor een
 METHANOLFABRIEK
 B.T.J. JASKI
 M.D. van WEELE
 MAART '72



$$V = C + 2 - F$$

$$1C \quad 1F \Rightarrow V = 2 \quad PT$$

$$2F \Rightarrow V = 1 \quad T$$

$$2C \quad 1F \rightarrow 3 \quad 1C \quad PT$$

$$2 \quad 2F \rightarrow 2 \quad 1C \quad PT$$