



## Tervezés AspenTech programokkal bioetanol gyártás és biofinomítás témában

Dr. Fehér Csaba

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem  
Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

Budapest, 2018



## Előadásanyag, számonkérés

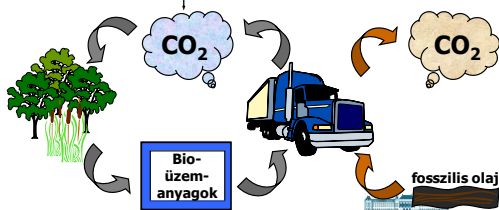
- Előadás dia a honlapon elérhető lesz, felkészülést segítő kérdések (friss)
- Első előadás: anyag ismertetés, második előadás: konzultációs óra, feladatok, felkészítő kérdések átbeszélése
- zh: 5 kérdés (10 pont), melyre rövid válaszokat várok, lehet benne egyszerű számpélda is



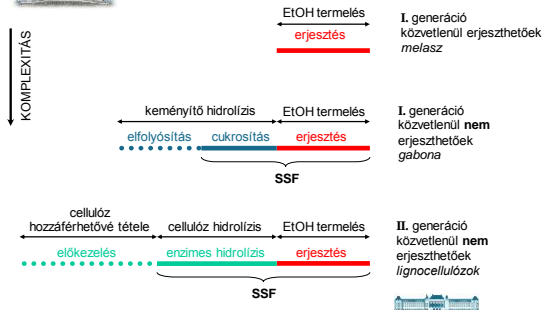
## Alkoholgyártás, upstream műveletek áttekintés

Bioetanol, CO<sub>2</sub> körforgás

A legnagyobb mennyiségben termelődő üvegházhatású gáz a széndioxid, ami bio- és fosszilis üzemanyagokból is keletkezik, de a bio-üzemanyagok esetében a széndioxid ciklus zárt.

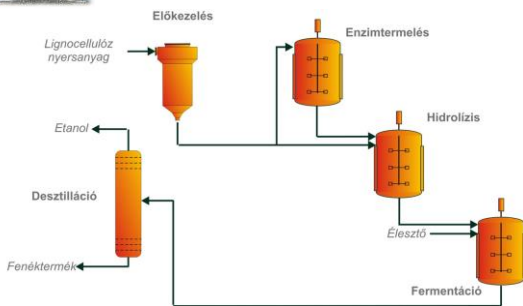


## Alkoholgyártás, upstream műveletek áttekintés



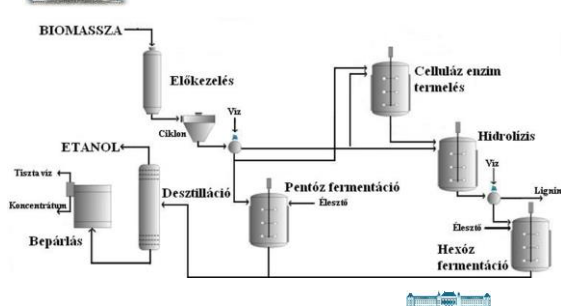
## Alkoholgyártás, upstream műveletek áttekintés

Első generációs folyamat, melléktermékek, biofinomítás



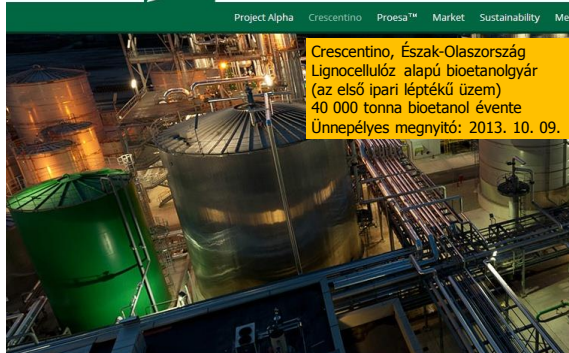
## Alkoholgyártás, upstream műveletek áttekintés

Első generációs folyamat, melléktermékek, biofinomítás





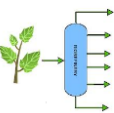
Project Alpha Crescentino Proesa™ Market Sustainability Me



Crescentino, Észak-Olaszország  
Lignocellulóz alapú bioetanolgyár  
(az első ipari léptékű üzem)  
40 000 tonna bioetanol évente  
Ünnepélyes megnyitó: 2013. 10. 09.



**Biofinomítás**



- Most of the chemical products used in the industry are derived from fossil resources.
- The replacement of fossil resources in the production of chemicals can be solved only by biomass utilization.



**Biofinomítás**

**Biorefinery**

is defined by the IEA Bioenergy Task 42 (International Energy Agency, 2009) as the sustainable processing of biomass into a wild spectrum of bio-based products (food, feed, chemicals and/or materials) and bioenergy (biofuels, power and/or heat). Biorefinery is a facility (or a cluster of facilities) that integrates biomass conversion processes and equipment to produce transportation biofuels, power, chemicals and materials from biomass.

**Biomass:**

organic materials produced by the growth of microorganisms, plants and animals.

**BiOrefinery:**

utilize BIOMass by using green (sustainable?) technologies. (biotechnology)

- Feedstocks, processes, platforms and building block chemicals, products

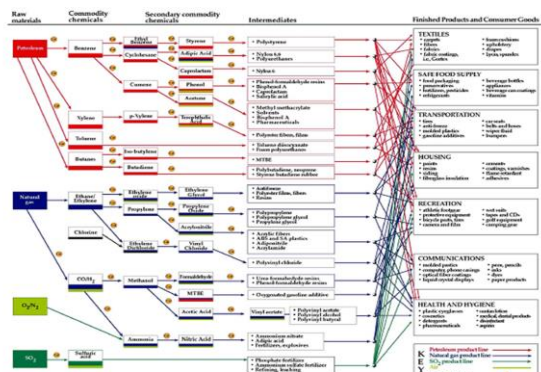


Figure 2 – An Example of a Flow-Chart for Products from Petroleum-based Feedstocks

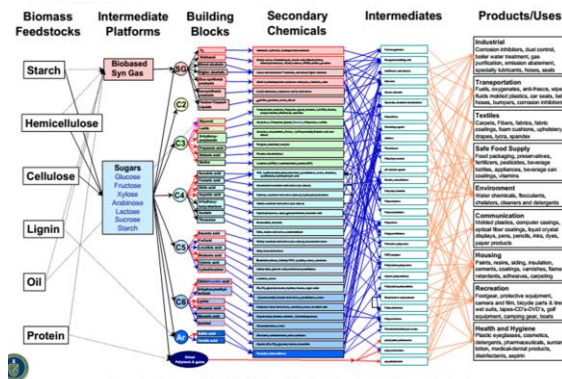
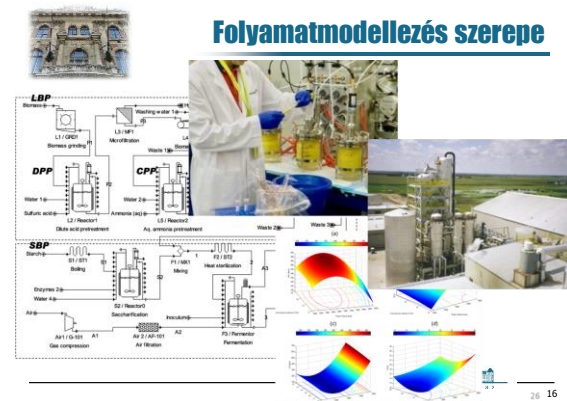
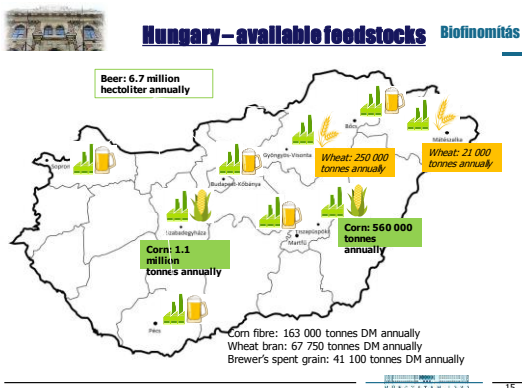
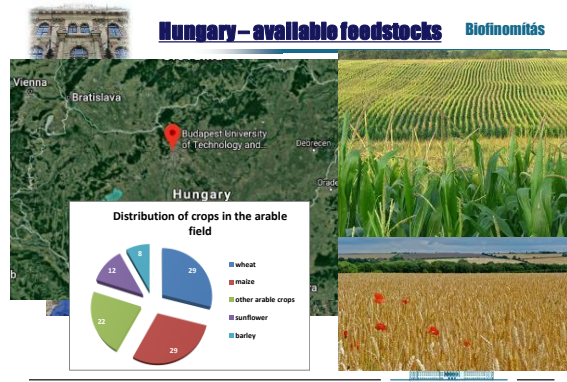
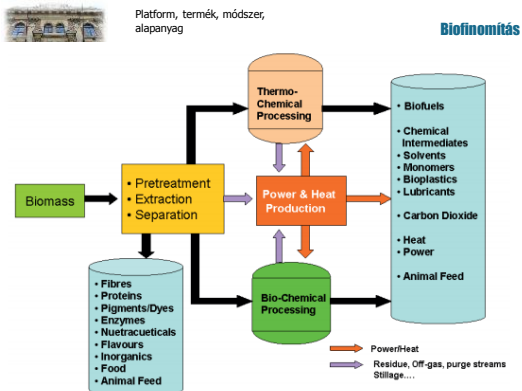
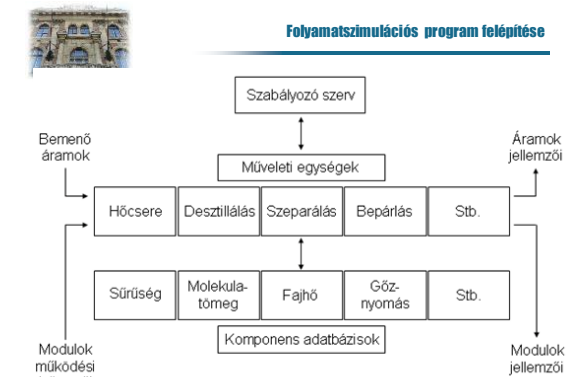


Figure 3 – Analogous Model of a Bio-based Product flow-chart for Biomass Feedstocks



- A technológiai-gazdaságossági elemzés eszközei**
- Aspen Plus**
    - Folyamatmodell, anyag- és energiamérleg megoldása
    - Előnye:
      - nagy komponens adatbázis (elsődleges a megfizethető eredményekhez)
      - gőz-folyadék fázisegyensúlyok pontos modellezése (pl. desztillálásnál fontos)
    - Hiányosságai:
      - Nem tud pH-t számolni, és fermentációs területre egyáltalán nem specializált (a SuperPro Designerrel szemben)
  - Aspen HX-net / Aspen Energy Analyzer**
    - Hőintegráció, a hőcserélő hálózat optimalizálása
  - Aspen Icarus / Aspen Economic Analyzer**
    - Méretezés
    - Beruházási költség becslése





## Mit várhatunk egy technológiai-gazdaságossági tanulmánytól?

- ÖSSZEHASONLÍTHATÓ ESETEK
- Energiaigény, energiahatékonyság
- Gazdaságossági paraméterek:
  - éves költségek, bevételek, profit
  - előállítási költség adott termékre
  - megtérülési idő



A gazdaságossági rész sokkal bizonytalanabb, mint a technológiai

## Mi szükséges egy jó technológiai-gazdaságossági tanulmányhoz?

- Megbízható kísérleti eredmények
- Ökölszabályok alkalmazása
- Konzervatív feltételezések



19



## Miért fontos a folyamattervezés?

•Kísérleteket az egyes lépésekre végzünk, azonban fontos a lépések közötti lehetséges kölcsönhatások (integráció) vizsgálata is

- visszaforgatás
- ezzel a vízigény csökkenthető

- hőintegráció
- egy anyagáram fűtése úgy történik, hogy közben egy másik anyagáram hűl, így a hőigény csökkenthető

•Komplex folyamatoknál nagyon sokféle elrendezés (folyamatkonfiguráció) képzelhető el, ezért célszerű folyamattervező szoftver használata

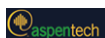
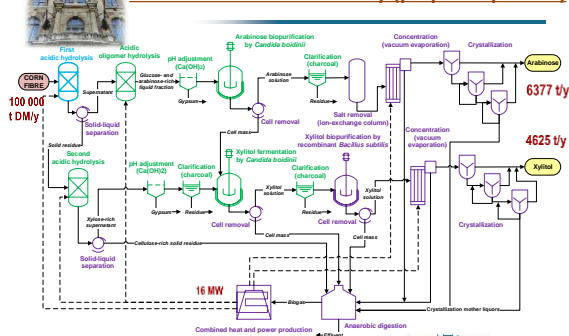
•A technológiai modell az alapja a gazdaságossági számításoknak is



20



## Corn-fibre-based biorefinery (proposed process)

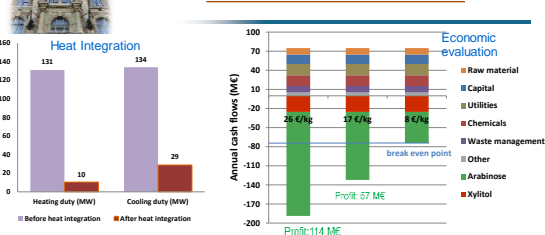


Process steps that are modelled based on laboratory exp. Process steps that are modelled based on literature data

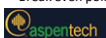
21



## Techno-economic evaluation



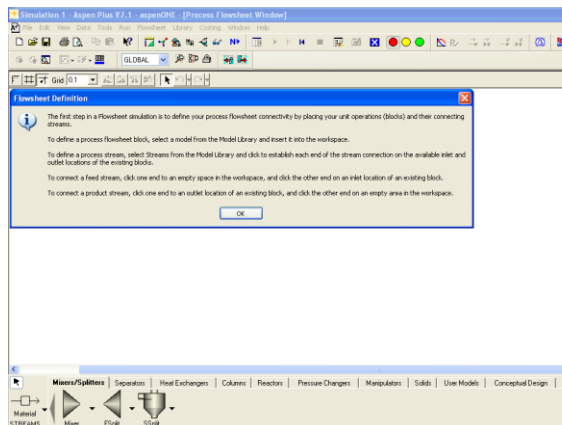
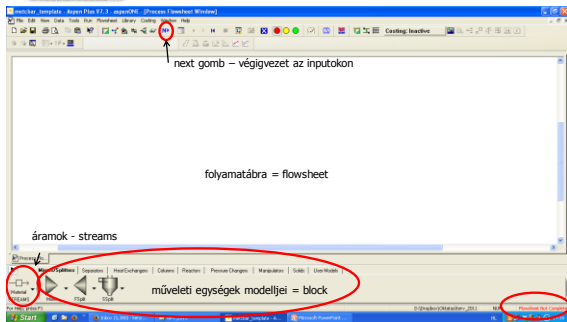
- Process simulation: Aspen Plus V8.0, Heat integration: Aspen Energy Analyzer V8.0, Economic evaluation: Aspen Process Economic Analyzer V8.0 (Aspen Tech. Cambridge) and vendor quotation.
- After heat integration the proposed biorefinery process can satisfy its own heat demand.
- Assumed prices: corn fibre: 100 €/tonne DM, xylose: 6 000 €/tonne.
- Break even point requires an arabinose price of 8 €/kg.



22



## Aspen Plus



### BLOCK ELHELYEZÉSE

Kötelező belépési pont      Kötelező kilépési pont

•Heater – a hőcsere egyik oldala érdekes, és az ahhoz szükséges teljesítmény

•HeatX – a hőcsere hideg és meleg oldala is (2 belépési, 2 kilépési pont) megbonyolítja a számolást → kerüljük a használatát

Process Flow: Mixer/Splitters, Separators, Heat Exchangers, Columns, Reactors, Pressure Changes, Manipulators, Solids, User Models

### Belépő áram bekötése

belépő áram bekötése

### Kilépő áram bekötése

Lépcsőenként (műveletenként) célszerű haladni, mert így könnyebb a hibakeresés

kilépő áram bekötése

Ez azt jelzi, hogy a flowsheet kapcsolatai rendezben vannak, az inputok hiányoznak

### Setup: Data Browser

a proszakat ki kell tölteni

Global settings:

- Input data: ZSOLTI
- Run type: Fullbatch
- Input mode: Process stream
- Output results: ZSOLTI
- Stream class: **FLUIDITY**
- Flow basis: Mass
- Units of measurement: kg, m<sup>3</sup>, s
- Pressure units: bar
- Valid phases: LIQ, VAP
- Free water: No
- Operational year: 2010

•Mass-ra állítjuk (tömegáramokat használunk)

•Légköri nyomás: 1,01325 bar, de az egyszerűség kedvéért az előadásban 1 bar-nak veszem

### Specifications: Data Browser

Component ID-nál írjuk be angolul a komponents nevét akkor ismeri fel, ha mind a 4 oszlopot kitölti

Vagy Find-dal megkereshetjük

Component ID	Type	Component name	Alias
WATER	Conventional	WATER	H2O
SEUCOSHE	Conventional	SEUCOSHE	SEUCOSHE-F

Component ID: If data are to be retrieved from database, enter either Component Name or Formula. See Help.

### Specifications: Data Browser

Interaktív súgó a módszerválasztáshoz

NRTL: Non-Random Two Liquid biotechnológiai modelleknél (vizes közeg) ezt használják

NRTL: Flowsheet with liquid gas and Henry's law. Uses record set of binary parameters.

**Bélpé (1-es) áram specifikáció**

összetétel megadása tömegárral

a kilepő (2-es) áramot nem szabad kitölteni, azt a B1 block specifikációja alapján számolja a program a szimuláció futtatása során

**Bélpé (1-es) áram specifikáció**

összetétel megadása a komponensek tömegáramával

**(B1 jelű) hőcserélő specifikáció**

kilepő hőmérséklet megadása

Let us you type the outlet temperature for help.

**(B1 jelű) hőcserélő specifikáció**

nyomás: az érték > 0, kilepő nyomást adunk meg az érték = 0, nincs nyomásesés az érték < 0, nyomásesést adunk meg

Let us you type the pressure. Absolute units: outlet pressure if value > 0. Gauge units: outlet pressure for all values. See H...

## Futtatható a szimuláció

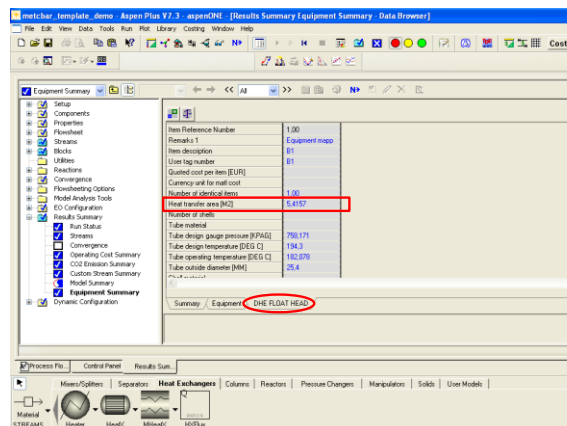
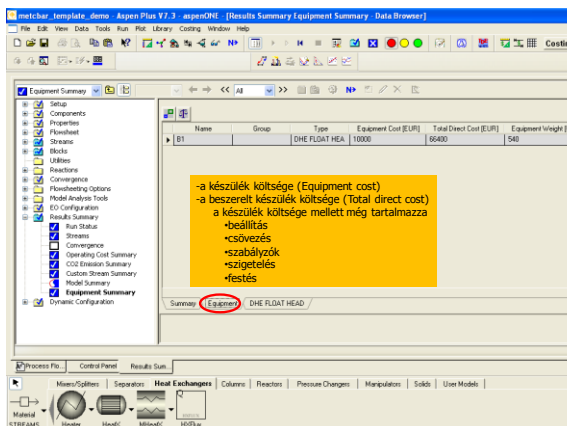
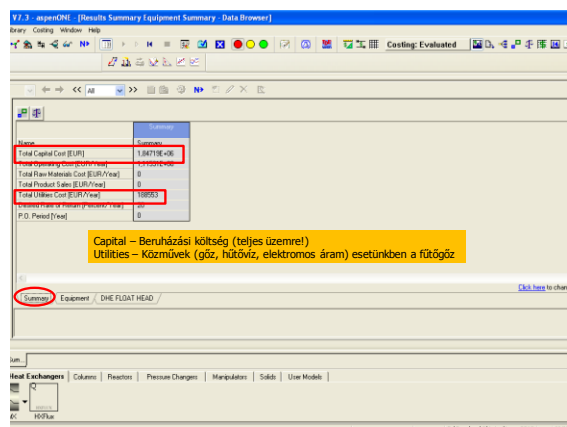
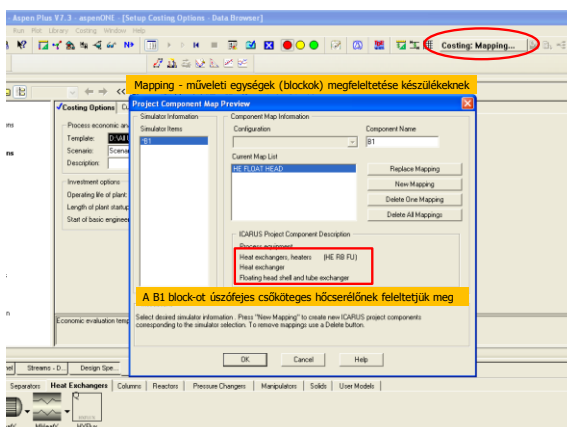
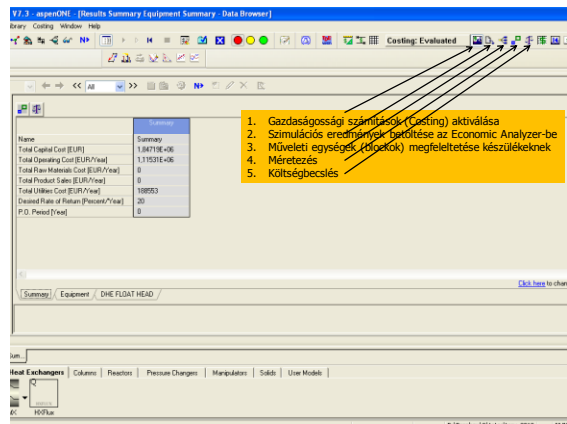
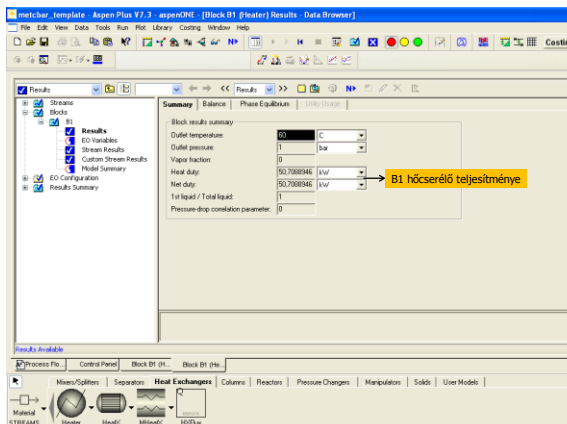
Required Input Complete

Run

**Flowsheet eredmények**

Temperature (C)  
Pressure (bar)  
Mass Flow Rate (kg/hr)

Results available



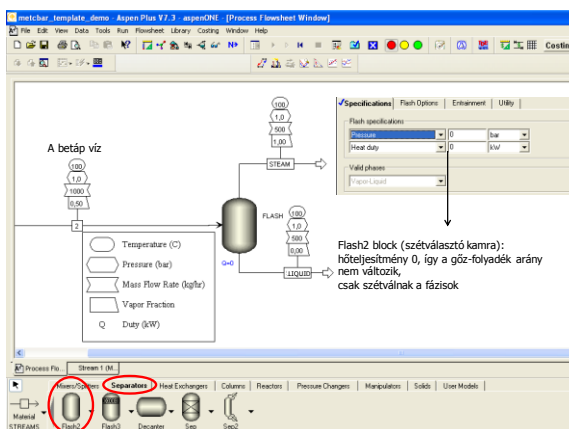
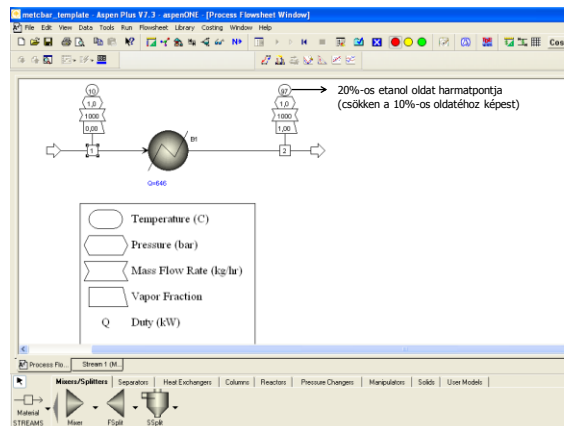
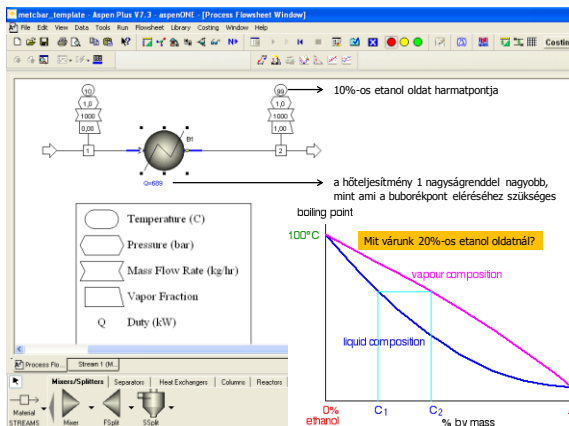


- Mekkora hőcserélő teljesítmény szükséges 1000 kg/h, 10%-os etanol oldat buborékpontra és harmatpontra történő melegítéséhez légköri nyomáson?
- 10% konvencionálisan tömegszázalékot jelent
- buborékpont?
- harmatpont?



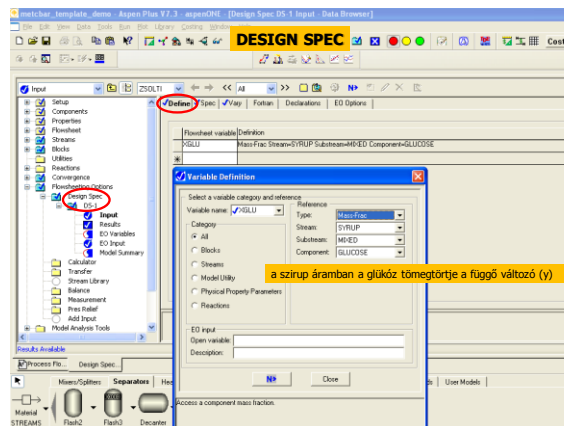
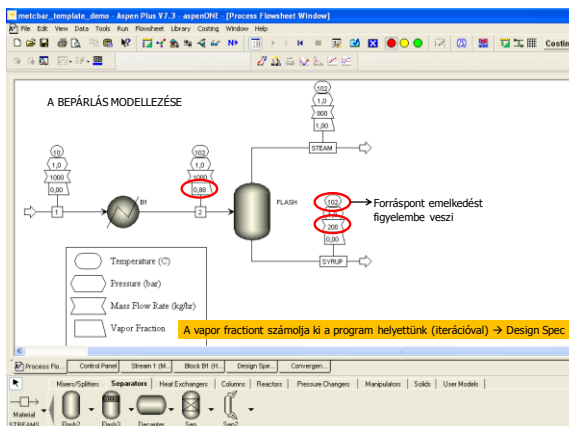
Component ID	Type	Component name	Alias
WATER	Conventional	WATER	H2O
GLUCOSE	Conventional	GLUCOSE	CBH10DE1
ETHANOL	Conventional	ETHANOL	CHHO-2





## Bepárlás

- Bepárlás:  
10°C-os, 1000 kg/h, 10%-os glükóz oldat bepárlása 50%-osra légtörési nyomáson
- Nincs bepárló block
- Helyette: hőcserélő + flash2 block kombinálása
- Számolás vapor fraction alapján
- 100 kg/h glükóz mellett 100 kg/h víz lesz a szirupban  
800 kg/h vizet kell elpárologtatni a kiindulási 900 kg/h-ból csak a víz válik gőzzé →  $800/900 = 0,88$  a vapor fraction



Design specification expression:  
 Spec:  $\frac{G}{GLU}$   
 Target: 0.5  
 Tolerance: 0.01

a glükóz tömegfrójtja 0,5  
 a tolerancia abszolút, azaz megengedünk 0,499 és 0,501 közötti értékeket

Manipulated variable:  
 Block: B1  
 Variable: VFRAC  
 Sentence: FARFAM

A B1 hőserőiben a vapor fraction a független változó (x) értéke 0 és 1 között változhat az iteráció során

0,8 vapor frójtiont állítva be a B1-ben, a szimuláció során a Design Spec áttájtja 0,88-ra



### Fermentor modellezése – etanolérisztés

- Reaktor + ...
  - Légtörri nyomáson etanol képződik
  - Egy reakció: glükóz → 2 etanol + 2 CO<sub>2</sub>
  - 90% az etanol hozam → a glükóz-etanol konverzió 90%
  - Exoterm a reakció és állandó hőmérsékletet (30°C) tartunk → el kell vonni a hőt hűtővízzel
  - Az élesztő fth. immobilizált (ritka, de van rá példa)
- ... + szeparátor
  - A gázélesztés modellezésére



Stóchiometrikus reaktor, és ismertek a konverziók

Component ID	Type	Component name	Formula
BIOGLUCOSE	Conventional	BIOGLUCOSE	C6H12O6
BIOETHANOL	Conventional	BIOETHANOL	C2H5OH
BIOETHANOL	Conventional	BIOETHANOL	C2H5O2
WATER	Conventional	WATER	H2O

Új komponens (CO<sub>2</sub>) definiálása

Operating conditions:  
 Pressure: 1 bar  
 Temperature: 30 C

Reaktor outlet temperature

**Left Stoichiometry**

Reactants	Coefficient	Products	Coefficient
GLUCOSE	1	ETHANOL	2

A sztöchiometriai együtthatók mászóakra vonatkoznak  
A(z egyik) reakción átalakulásának mértéke

ennek akkor van jelentősége, ha több reakció van, és az egyikben képződő termék, köztüktermék, azaz továbbbregál pl. szacharóz hidrolízise glükózzá és fruktózá, majd a glükózból és fruktózból etanol lesz

**Heat of Reaction**

Calculation type  
 Do not calculate heat of reaction  
 Calculate heat of reaction

A szimuláció során számolja a reakcióhőt

**Reaction results**

Run No.	Reaction name	Heat of reaction (kJ/mol)	Reference component	Stoichiometry
1	GLUCOSE	-92000	GLUCOSE	GLUCOSE -> 2 ETHANOL

Jó egyezés az irodalmi értékkel (-92 000 kJ/mol) -> elfogadjuk

Temperature (C)  
 Pressure (bar)  
 Mass Flow Rate (kg/hr)  
 Vapor Fraction  
 Duty (kW)

•Mért lett 0,01 a vapor fraction légköri nyomáson és 30°C-on?  
 •CO<sub>2</sub> miatt -> a fermentornak van gázvezetése, az RSTOIC blocknak viszont nincs

A gázvezetés modellezése komponensszeparátorral

Component separator. Separates components based on specified flows or split fractions.

**Specifications**

Component ID	Specification	Basis	Value	Units
GLUCOSE	Left fraction	0		
ETHANOL	Split fraction	0		
WATER	Split fraction	0		

A CO<sub>2</sub> áramba a blockba érkező komponens ennyied része kerül (csak a CO<sub>2</sub>, viszont az teljes mértékben)

Aspen Plus V7.3 - aspenONE - [Results Summary Streams - Data Browser]

Streams

Material

Display: All streams | Format: [G, M] | Stream Table

Stream	1	2	BROTH	CO2
Mass Flow (kg/h)	100.000	10.000	18.000	
GLUCOSE		43.941		43.941
CO2		46.059	46.059	
ETHANOL				
WATER	100.000	100.000	100.000	
Mass Frac				
GLUCOSE	0.100	0.010	0.018	
CO2		0.044		1.000
ETHANOL		0.046	0.027	
WATER	0.900	0.930	0.951	

A 2-es áram csak számolási célt szolgál, a valóságban nincs ilyen áram (nem kell külön gázszeprátor, a fermentorok van gázvezetése)

4,8% etanoltartalmú a fermenté

Process Flow | Setup Specs | Results Sum

Material STREAMS

Process Flow Diagram: Mixer/Splitter → Separator → Heat Exchanger → Reactor → Pressure Changer → Manipulator → Solids → Use Model