

Praca dyplomowa inżynierska

Symulacje procesu ekstrakcji nadkrytycznej w programie DWSIM

Autor: Bartosz Jakubiak

Nr albumu: 308926

Promotor: dr inż. Jan Krzysztoforski

Opiekun pomocniczy: mgr inż. Piotr Cendrowski

Rok akademicki: 2021/2022



Wprowadzenie

Płyny w stanie nadkrytycznym odnalazły swoje zastosowanie w wielu branżach, tj. przemysł farmaceutyczny, odzieżowy czy spożywczy. Popularnym zastosowaniem płynów w stanie nadkrytycznym jest proces ekstrakcji nadkrytycznej (szczególnie z ciała stałego). Użycie płynów w stanie nadkrytycznym wymusza wyższe koszty konstrukcyjne oraz eksploatacyjne, dlatego coraz większą rolę odgrywają specjalne programy takie jak DWSIM, które pozwalają zaprojektować całą instalację, określić wstępne koszty konstrukcyjne oraz oszacować wydajność danego procesu.

Cel i zakres pracy

Celem pracy jest wykonanie symulacji statycznej procesu ekstrakcji w stanie nadkrytycznym z ciała stałego z użyciem programu DWSIM. Dokonano przeglądu dostępnej literatury na temat płynów w stanie nadkrytycznym oraz ekstrakcji nadkrytycznej. Zestawiono ze sobą kilka popularnych symulatorów procesowych tj. CHEMCAD, Aspen HYSYS, COCO Simulator i DWSIM. Przeprowadzono symulację statyczną ekstrakcji z użyciem CO₂ w stanie nadkrytycznym w DWSIM i wprowadzono autorski skrypt zawierający równanie Chrastila oraz szacujący czas trwania ekstrakcji.

Część teoretyczna

Przedstawiono płyny w stanie nadkrytycznym, ich właściwości pożądane w procesach przenoszenia masy (tj. niska lepkość kinematyczna oraz względnie wysoka gęstość) oraz zastosowania w przemyśle. W dalszej części szczegółowo omówiono proces ekstrakcji nadkrytycznej ze szczególnym uwzględnieniem ekstrakcji substancji pożądanych z surowca w postaci ciała stałego. Przedstawiono zalety wykorzystywania CO₂ jako rozpuszczalnika w procesach prowadzonych w podwyższonym ciśnieniu i temperaturze. Zestawiono ze sobą kilka popularnych symulatorów (COCO Simulator, DWSIM, CHEMCAD, Aspen HYSYS) i omówiono ich najważniejsze cechy (funkcjonalność, typ licencji oraz dostępność).

Część obliczeniowa i wyniki

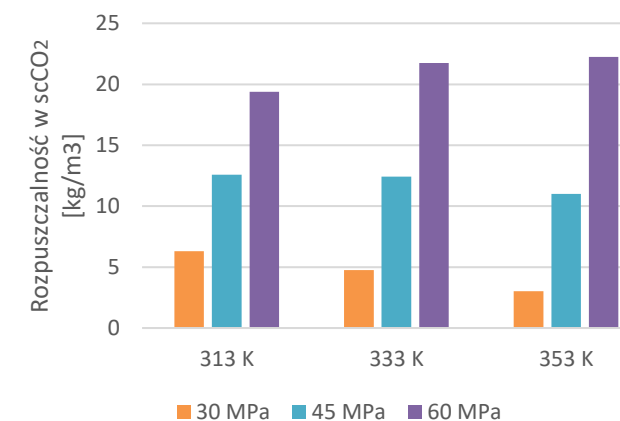
W programie DWSIM przeprowadzono symulację statyczną procesu ekstrakcji nadkrytycznej dla układu laboratoryjnego, układu przemysłowego w skali ćwierćtechnicznej (z jedno i wielostopniową separacją ekstraktu od rozpuszczalnika). W dalszej części zaimplementowano skrypt rozszerzający możliwości tego symulatora, wprowadzający prosty model szacowania czasu ekstrakcji na podstawie rozpuszczalności wyznaczonej z równania Chrastila:

$$\ln S = k \ln \rho + \frac{a}{T} + b$$

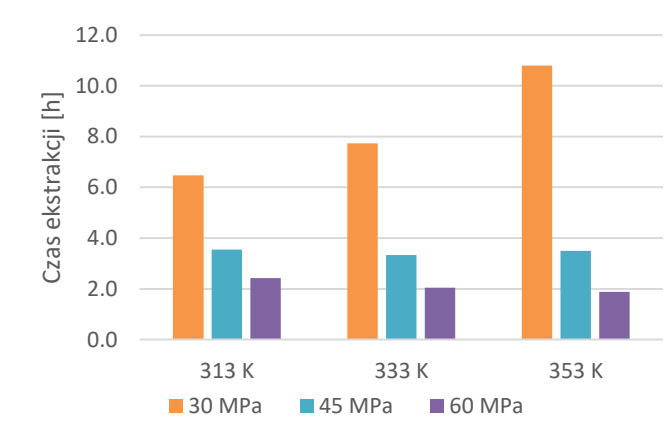
Gdzie $S \left[\frac{kg}{m^3} \right]$ – rozpuszczalność w płynie w stanie nadkrytycznym, $\rho \left[\frac{kg}{m^3} \right]$ – gęstość płynu w stanie nadkrytycznym, $T [K]$ – temperatura płynu w stanie nadkrytycznym, $k, a, b [-]$ – stałe charakterystyczne dla pary rozpuszczalnik – substancja rozpuszczana



Rys.1. Schemat instalacji do ekstrakcji nadkrytycznej w programie DWSIM



Rys.2. Rozpuszczalności w CO₂ w stanie nadkrytycznym w zależności od ciśnienia i temperatury w ekstraktorze



Rys.3. Czas ekstrakcji w zależności od ciśnienia i temperatury w ekstraktorze

Wnioski

DWSIM okazał się użytecznym narzędziem do symulowania procesów ekstrakcji nadkrytycznej w różnych konfiguracjach. DWSIM wśród konkurencji wyróżnia się otwartością na dalsze indywidualne rozwijanie jego możliwości za pomocą autorskich skryptów w języku Python. Skrypt napisany w DWSIM wprowadził możliwość odczytywania rozpuszczalności w CO₂ w stanie nadkrytycznym oraz czasu prowadzenia ekstrakcji. W przyszłości można dowolnie rozwijać ten skrypt np. o bardziej zaawansowane modele kinetyki ekstrakcji nadkrytycznej.