



Universitetet i Sørøst-Norge  
Fakultet for Teknologi, Naturvitenskap og Maritime fag  
Institutt for Prosess-, Energi- og Miljøteknologi

Bachelorrappport

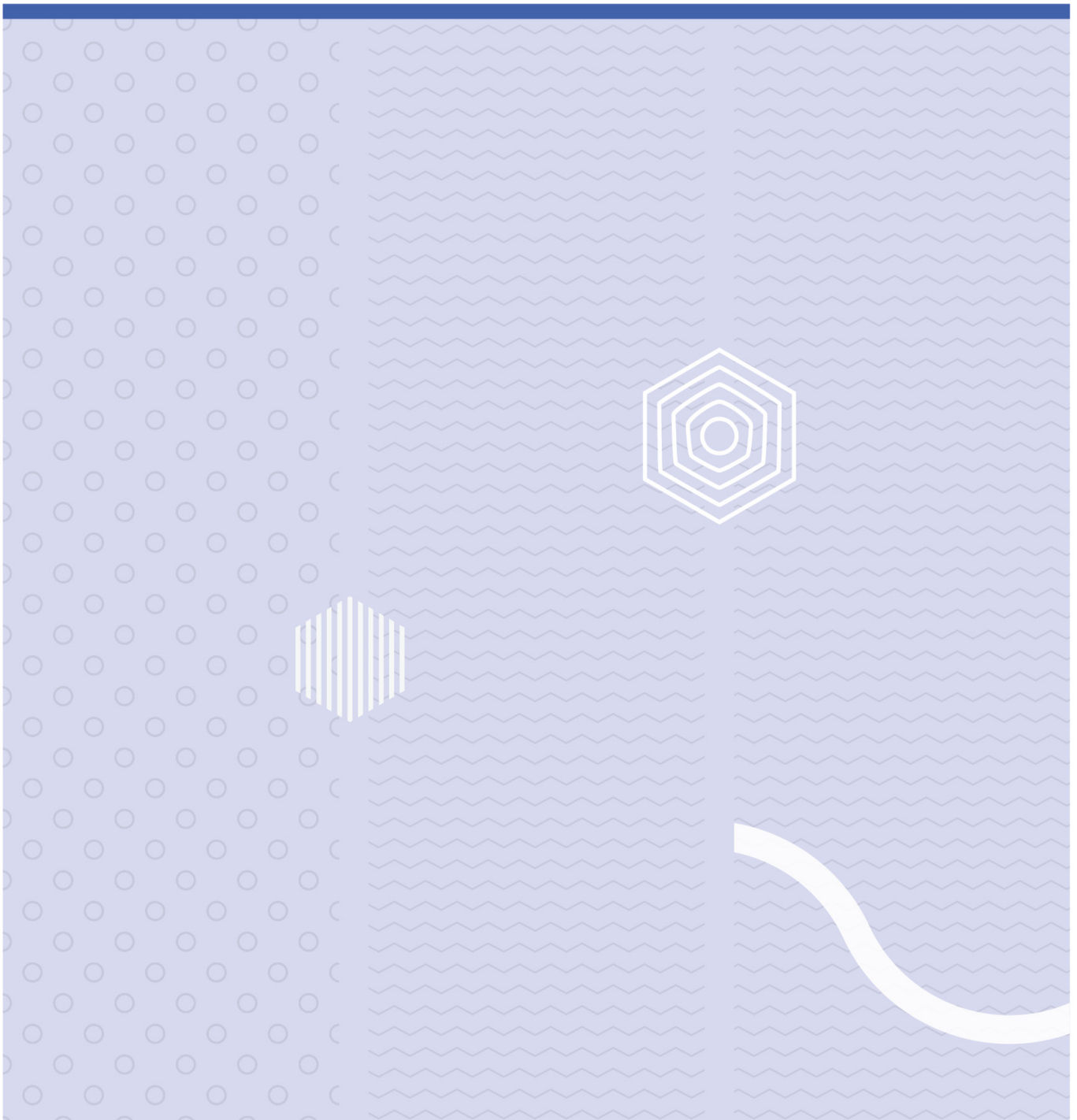
19/05/2023

Bacheloroppgave/TS3000

K6-2-23

# Grønn produksjon av dimetyleter (DME)

Indirekte konvertering av syntesegass fra biomasse



**Emne:** TS3000 Bacheloroppgave

**Tittel:** Grønn produksjon av dimetyleter (DME) – Indirekte konvertering av syntesegass fra biomasse

Denne rapporten utgjør en del av vurderingsgrunnlaget i emnet.

Prosjektgruppe: K6-2-23

Tilgjengelighet: Åpen

**Gruppedeltakere:** Eivind Johan Rokstad Trasti  
Oliver Numme  
Sebastian Larsen

**Veiledere:** Marianne Sørflaten Eikeland  
Terje Bråthen

**Godkjent for arkivering:** \_\_\_\_\_

### **Sammendrag:**

***Nøkkelord:** biomasse, gassifisering, syntesegass, metanol, dimetyleter (DME), prosessimulering, Aspen Hysys, termodynamiske modeller, energioptimalisering, kostnadsestimering*

Dimetyleter (DME) og andre syntetiske drivstoff er essensielle for overgangen til fossilfri transportsektor. DME bringer med seg flere fordeler i dagens infrastruktur og er godt sammenlignbar med diesel i eksisterende forbrenningsmotorer. Det vil kreve 1,74 ganger så mye liter DME for å kjøre den samme strekningen som med diesel. Derimot en blanding av DME og diesel vil redusere klimagassutslippet og rekkevidden. DME kan produseres av syntesegass via gassifisering av karbonnøytale ressurser som biomasse, og er da et grønt alternativ. Syntesegassen kan benyttes til å produsere DME direkte i en ett-trinns prosess (direkte konvertering), eller via metanol i en totrinnsprosess (indirekte konvertering). I dette bachelorarbeidet har prosessimuleringene i Aspen Hysys DME-syntesen fra metanol blitt studert. Oppgaven i studiet innebar vurdering av prosessdesign, prosess- og energioptimalisering, samt kostnadsestimering av DME-syntesen. Den startet med en sensitivitetsanalyse som inneholdt evaluering av driftsparametere som trykk og temperatur, samt reaktordesign. Videre ble de termodynamiske modellene (PRSV, NRTL, UNIQUAC og Wilson) i Aspen Hysys simulert og sammenlignet. Deretter ble energioptimalisering av prosessen gjennomført med intern varmeintegrering og eksternt varmeoverføring i form av kjølevann og damp. Avslutningsvis ble kostnadsestimering av "base case", parameter- og energioptimaliseringen gjennomført.

Før lønnsomhetsanalysen hadde prosjektet et investeringskapital (CAPEX) på omtrent 1,8 millioner dollar, driftskostnader (OPEX) på 58,6 millioner dollar og inntekter på 54,3 millioner dollar. Lønnsomheten og driftskostnadene avhenger derimot av prisen for DME og metanol. Resultatene fra optimaliseringen ga høyere DME-strøm (0,5 %), lavere energibehov (-46 %), lavere OPEX (-11 %) og CAPEX (-4 %), samt høyere inntekt (0,5 %) sammenlignet med "base case".

*Universitetet i Sørøst-Norge tar ikke ansvar for denne studentrapportens resultater og konklusjoner.*

**Course:** TS3000 Bachelor Thesis

**Title:** Green production of dimethyl ether (DME) – Indirect conversion of synthesis gas produced from biomass

This report forms part of the basis for assessing the student's performance on the course.

Project group: K6-2-23

Availability: Open

**Group participants:** Eivind Johan Rokstad Trasti  
Oliver Numme  
Sebastian Larsen

**Supervisors:** Marianne Sørflaten Eikeland  
Terje Bråthen

**Approved for archiving:** \_\_\_\_\_

**Abstract:**

**Keywords:** biomass, gasification, synthesis gas, methanol, dimethyl ether (DME), process simulation, Aspen Hysys, thermodynamic models, energy optimization, cost estimation

Dimethyl ether (DME) and other synthetic fuels are essential for the transition to a fossil-free transport sector. DME brings with it several advantages in today's infrastructure and is well comparable with diesel in existing combustion engines. It will require 1.74 times as much liter DME to drive the same distance as with diesel. However, a mixture of DME and diesel will reduce greenhouse gas emissions and range. DME can be produced from synthesis gas via gasification of carbon-neutral resources such as biomass and is then a green alternative. The synthesis gas can be used to produce DME directly in a one-step process (direct conversion), or via methanol in a two-step process (indirect conversion). In this bachelor's thesis, the process simulations in Aspen Hysys DME synthesis from methanol have been studied. The task in the study involved assessment of process design, process- and energy optimization, as well as cost estimation of DME synthesis. It started with a sensitivity analysis that contained evaluation of operating parameters such as pressure and temperature, as well as reactor design. Furthermore, the thermodynamic models (PRSV, NRTL, UNIQUAC and Wilson) in Aspen Hysys were simulated and compared. Then energy optimization of the process was carried out with internal heat integration and external heat transfer in the form of cooling water and steam. Finally, cost estimation of "base case", parameter and energy optimization were carried out.

Before the profitability analysis, the project had a capital expenditure (CAPEX) of 1.8 million USD, operating expenses (OPEX) of 58.6 million USD and revenue of 54.3 million USD. However, profitability and operating expenses depend on the price of DME and methanol. The results from the optimization gave higher DME flow (0.5 %), lower energy demand (-46 %), lower OPEX (-11 %) and CAPEX (-4 %), as well as higher income (0.5 %) compared to "base case".

*The University of South-Eastern Norway takes no responsibility for the results and conclusions in this student report.*

# Forord

Denne oppgaven leveres som oppfyllelse av kravene til bachelorgraden (BSc) som Kjemiingeniør i studieprogrammet Ren Energi- og Prosessteknologi. Graden utføres ved Universitetet i Sørøst-Norge (USN) - Fakultet for Teknologi, Naturvitenskap og Maritime fag. Det presenterte bachelorarbeidet ble utført ved USN, campus Porsgrunn, i perioden 9. januar 2023 til 22. mai 2023 i emnet «TS3000 Bacheloroppgave», med Marianne Sørflaten Eikeland og Terje Bråthen som veiledere. Dette bachelorarbeidet er en videreføring av tidligere bachelorarbeid innenfor gassifisering av biomasse. Det opplyses om at nesten alle figurer og tabeller er laget på egenhånd. I de tilfeller dette ikke er gjort er originalkilden oppgitt ved siden av. Det stilles også anbefaling om kjennskap til programvaren Aspen Hysys V12, da prosessimuleringene er utført i simuleringssystemet på datalaboratorium ved USN.

Porsgrunn 19.05.2023

# Nomenklaturliste

<b>Forkortelse</b>	<b>Forklaring</b>
AI	Kunstig intelligens
CAPEX	Investeringskostnad
CCS	Karbonfangst til lagring
CEPCI	Chemical Engineering Plant Cost Index
CSTR	Blandetankreaktor
DAC	Fangst direkte fra luft
DDMEFC	Direkte dimetyleter-brenselcelle
DME	Dimetyleter
DMFC	Direkte metanol-brenselcelle
DPBP	Diskontert tilbakebetalingstid
DTO	Dimetyleter-til-olefiner
GTL	Gass til væske
KFK	Klorfluorkarbon
LCA	Livssyklusanalyse
LPG	Flytende petroleumsgass
MTO	Metanol-til-olefiner
NV	Netto nåverdi
NRTL	Non-Random-Two-Liquid
NTP	Normal temperatur og trykk (1 atm og 0 °C)
OPEX	Driftskostnad
PFD	Prosessflytskjema
PFR	Rørreaktor
PM	Svevestøv
PR	Peng-Robinson

## Nomenklaturliste

PRSV	Peng-Robinson-Stryjek-Vera
STP	Standard temperatur og trykk (1 atm og 25°C)
UNIQUAC	Universal Quasi Chemical
UV	Ultraviolet
VLE	Damp-væske likevekt

### **Kjemikalie**

### **Forklaring**

CH <sub>3</sub> OH	Metanol
CH <sub>4</sub>	Metan
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> O / (CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> O	Dimetyleter
CO	Karbonmonoksid
CO <sub>2</sub>	Karbondioksid
F <sub>2</sub>	Fluorgass
H <sub>2</sub>	Hydrogen
N <sub>2</sub>	Nitrogen
N <sub>2</sub> O	Lystgass
NO <sub>x</sub>	Nitrogenoksider
SO <sub>x</sub>	Sulfatoksider

*Noen forkortelser er direkte oversatt fra engelsk til norsk i nomenklaturlisten.*

# Innholdsfortegnelse

<b>1 .. Innledning.....</b>	<b>1</b>
<b>1.1 Bakgrunn .....</b>	<b>1</b>
<b>1.2 Mål og problemstilling.....</b>	<b>3</b>
<b>1.3 Avgrensninger .....</b>	<b>3</b>
<b>1.4 Hovedbidrag .....</b>	<b>4</b>
<b>1.5 Leserveiledning.....</b>	<b>4</b>
<b>2 .. Dimetyleter (DME) .....</b>	<b>5</b>
<b>2.1 Generelt om DME .....</b>	<b>5</b>
<b>2.2 DME og andre energibærere .....</b>	<b>8</b>
<b>2.3 DME og diesel.....</b>	<b>10</b>
<b>2.4 Reaksjonskinetikk og kjemisk likevekt.....</b>	<b>13</b>
<b>2.5 Alternative synteseruter for produksjon av DME .....</b>	<b>15</b>
<b>2.6 Gassifisering av biomasse .....</b>	<b>18</b>
<b>2.7 Forskning og teknologi rundt DME .....</b>	<b>19</b>
<b>3 .. Aspen Hysys.....</b>	<b>21</b>
<b>3.1 Termodynamiske modeller.....</b>	<b>22</b>
<b>3.2 Reaktordesign.....</b>	<b>23</b>
<b>3.3 Energioptimalisering og pinch-teknologi.....</b>	<b>25</b>
<b>4 .. Aspen Hysys simuleringer .....</b>	<b>26</b>
<b>4.1 Prosessbeskrivelse av "base case" .....</b>	<b>26</b>
<b>4.2 Endring av driftsparametere og reaktordesign.....</b>	<b>27</b>
<b>4.3 Endring av termodynamiske modeller.....</b>	<b>30</b>
<b>4.4 Energioptimalisering .....</b>	<b>30</b>
<b>4.5 Kostnadsestimering.....</b>	<b>31</b>
<b>4.6 Lønnsomhetsanalyse .....</b>	<b>32</b>
<b>5 .. Resultater fra simuleringer.....</b>	<b>33</b>
<b>5.1 Endring av driftsparametere og reaktordesign.....</b>	<b>33</b>
<b>5.2 Endring av termodynamiske modeller.....</b>	<b>36</b>
<b>5.3 Energioptimalisering .....</b>	<b>37</b>
<b>5.4 Kostnadsestimering.....</b>	<b>38</b>
<b>5.5 Lønnsomhetsanalyse .....</b>	<b>40</b>
<b>6 .. Diskusjon .....</b>	<b>43</b>
<b>6.1 Endring av driftsparametere og reaktordesign.....</b>	<b>43</b>
<b>6.2 Endring av termodynamiske modeller.....</b>	<b>45</b>

<b>6.3 Energioptimalisering .....</b>	<b>45</b>
<b>6.4 Kostnadsestimering.....</b>	<b>46</b>
<b>6.5 Lønnsomhetsanalyse .....</b>	<b>49</b>
<b>7 ..Konklusjon og forslag til videre arbeid .....</b>	<b>50</b>
<b>7.1 Konklusjon.....</b>	<b>50</b>
<b>7.2 Forslag til videre arbeid .....</b>	<b>51</b>
<b>Referanser .....</b>	<b>52</b>
<b>Vedlegg .....</b>	<b>56</b>
<b>Vedlegg A: CAPEX- og OPEX estimeringer .....</b>	<b>57</b>
<b>Vedlegg B: CAPEX- og OPEX resultater .....</b>	<b>66</b>
<b>Vedlegg C: Netto nåverdi estimeringer .....</b>	<b>75</b>
<b>Vedlegg D: Prosjektbeskrivelse.....</b>	<b>79</b>
<b>Vedlegg E: Medforfattererklæring .....</b>	<b>81</b>



# 1 Innledning

Både nasjonalt og internasjonalt arbeides det for å begrense klimagassutslipp i alle sektorer. Globalt energiforbruk er økende, og med en begrenset tilgang av fossile ressurser på jorda er en totalomstilling fra fossile til "grønne" ressurser og fra fossil energi til fornybar energi høyest nødvendig. FNs bærekraftsmål er verdens felles arbeidsplan for å bl.a. stoppe klimaendringene innen år 2030 [1]. Dette bachelorarbeidet undersøker et "grønt" kjemikalie som et bidrag for bærekraftsmål nr. 7 «ren energi» og nr. 13 «stoppe klimaendringer». Dette kjemikalie kan også bidra til å redusere verdens avfallsdeponier. Dette kapittelet inneholder den overordnede bakgrunnen, målene, avgrensningene, hovedbidraget og lederveiledning for bacheloroppgaven.

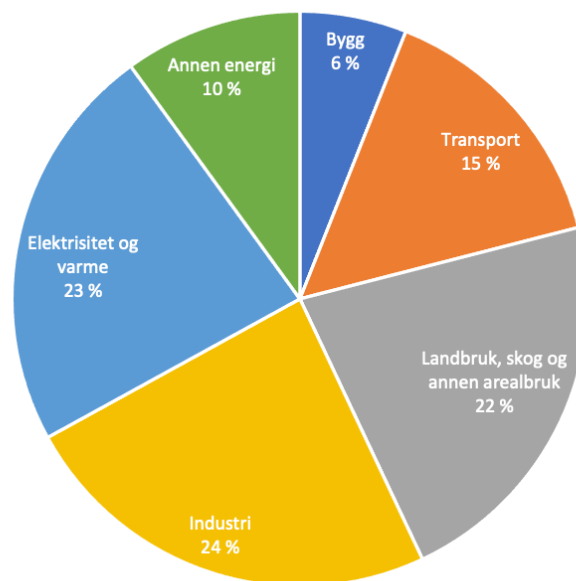
## 1.1 Bakgrunn

Klimaendringer og global oppvarming er noe av de største miljø- og energiutfordringene verden står overfor. Det er økende behov for å fremme bruken av fornybare energikilder for å sikre en bærekraftig framtid. Den industrielle revolusjonen sammen med den globale befolknings- og økonomiske veksten har drevet energietterspørselen oppover de siste århundrene. Det økende energibehovet som trengs for å møte den moderne livsstilen har resultert i en rask økning i de globale menneskeskapte klimagassutslippene og global oppvarming. Følgelig har jordens gjennomsnittlige overflatetemperatur opplevd en kraftig økning som forårsaker en rekke katastrofale endringer av jordens klima og miljø. Energi basert på biomasse er en av mange viktige ressurser til fornybar energi for å møte dagens- og framtidens energikrav.

Sammen med bærekraftig energiforsyning er også bærekraftig avfallshåndtering en av flere utfordringer i vår generasjon. Avfallshåndtering, industriell- og husholdningsavfall bør være basert på prinsippene for sirkulær økonomi, dvs. utnytte ressurser best mulig. For å sørge for bærekraft og verdiskapning søker denne sirkulære økonomien å lukke materialsøylene, bl.a. for å hindre at mulige ressurser går tapt. Samtidig innebærer dette å forlenge ressursene, slik at kvaliteten og verdien på ressursene holdes så høy som mulig og så lenge som mulig. For å behandle avfallet og beholde verdien til avfallet kan avfallspyramiden benyttes. Dette er et hierarki som består av avfallsreduksjon, ombruk, materialgjenvinning, energiutnyttelse og deponering. Hensikten med dette hierarkiet er å behandle avfallet så nær toppen av pyramiden som mulig, altså ved avfallsreduksjon. Den lineære økonomien baserer seg på bruk-og-kast-økonomi. Der blir ressursene hentet fra naturen, de blir bearbeidet til produkter som blir brukt av forbrukerne, og deretter blir de kastet. Hele denne prosessen gjentar seg ved å utvinne nye ressurser fra naturen. Der den lineære økonomien slutter, starter den evt. sirkulære økonomien ved gjenbruk av avfall fra produksjonsprosesser til nye ressurser. En del av den sirkulære økonomien er bl.a. å evaluere miljøeffekter og miljøbelastninger, som f.eks. ved metoden for livssyklusanalyse. Livssyklusanalyse (LCA) er en prosess som evaluerer miljøbelastningene fra et produkts råvareutvinning, via produksjonsprosesser og bruk til avhending, altså følge produktet fra start til slutt (vugge til grav). Hensikten med LCA er å forstå kompleksiteten i

menneskehetens påvirkning på klima og miljø, samt erkjenne sammenhengen mellom informasjon, bevisstgjøring og beslutningstaking. LCA prosessen inkluderer også all transport og all energibruk i mellomleddene. [2] [3]

For å redusere klimagassutslippene må bl.a. transportsektoren minimere bruken av fossilt drivstoff for å redusere sine utslipp. Transportsektoren står for 15 % av de direkte globale klimagassutslippene, som vist i Figur 1.1 [4]. Det som menes med klimagasser i figuren er karbondioksid ( $\text{CO}_2$ ), lystgass ( $\text{N}_2\text{O}$ ), metan ( $\text{CH}_4$ ) og fluorgass ( $\text{F}_2$ ). Annen energi er bl.a. lekkasjer fra utvinning av oljer, kullgruvedrift og transport av olje og gass. Bruken av dimetyleter (DME) kan være et "grønt" alternativ for overgangen til en fossilfri transportsektor, dersom DME produseres fra karbonnøytrale ressurser som f.eks. biomasse. Biomasse inneholder plante- og dyremateriale, avfall fra organismer og/eller samfunnets avfall som er generert fra disse organismene. Mens bioenergi kalles den lagrede kjemiske energien som biomasse inneholder [5]. DME kan produseres fra biomasse, metanol eller fra fossile energikilder, gjennom en direkte eller indirekte fremstilling [6]. Gassifisering av biomasse bidrar til å redusere og utnytte avfallsmengder som bl.a. matavfall og skogsavfall som har økt i takt med energietterspørselen. Gassifisering er en termisk konversjon av biomasse til gasser med høyere energi som bl.a. karbonmonoksid ( $\text{CO}$ ), hydrogen ( $\text{H}_2$ ) og metan. Disse gassene kan bli benyttet til direkte forbrenning eller syntetiseres til biodrivstoff.



Figur 1.1: Globalt klimagassutslipp (direkte utslipp) fordelt på sektorer fra 2019 [4].

## 1.2 Mål og problemstilling

Denne oppgaven presenterer eksperimentelle resultater og beregninger som beskriver produksjonen av grønn DME fra indirekte konvertering av syntesegass fra biomasse. For å forbedre denne forskningen er det nødvendig å få bedre kunnskap om DMEs egenskaper og oppførsel. Dette bachelorarbeidet tar sikte på å øke den grunnleggende forståelsen av hvordan prosessens egenskaper påvirker produksjonen av DME. Mål, delmål og problemstillingen er etablert med utgangspunkt i prosjektbeskrivelsen. Hensikten med prosjektet er å tilegne seg kunnskap om alternative synteseruter og prosessdesign for produksjon av DME, teoretisk og praktisk via simuleringer med Aspen Hysys på datalaboratorium. Hovedmålet med dette forskningsarbeidet er å vurdere prosessdesign, prosess- og energioptimalisering, samt kostnadsestimering av DME-syntesen. Den tekniske problemstillingen er å finne den prosessen med mest DME-utbytte og lavest energibehov ved minimale justeringer av driftsparametere. Delmålene for oppgaven er delt inn i syv punkter:

1. Beskrive alternative synteseruter for produksjon av DME.
2. Beskrive ny forskning rundt DME (bruksområder og bakgrunn).
3. Lage simuleringsmodeller av DME i Aspen Hysys.
4. Vurdere optimale prosessparametere (trykk, temperatur og tre reaktordesign) for produksjonen gjennom sensitivitetsanalyser.
5. Vurdere fire termodynamiske beregningsmodeller i Aspen Hysys.
6. Vurdere energioptimalisering av prosessen med høyest økning av utløpsstrøm av DME fra øvrige punkt.
7. Utføre en kostnadsestimering av "base case", parameter- og energioptimalisering av DME-prosessen fra øvrige punkt.

## 1.3 Avgrensninger

Forskningen og undersøkelsene som er gjort av DME er avgrenset etter det som anses å være relevant omfang for studien. Studien er derfor begrenset til den indirekte produksjonen av DME på grunn av dens relevans for fornybare energikilder. Deler av oppgaven tar for seg omfangsanalyse av DME-prosessen, der spesifisering av omfanget blir tydelig presentert. Selve simuleringene og gjennomføringen av forskningen er avgrenset til syntesen av DME fra metanol, og ikke hele gassifiseringsprosessen av biomasse. Rapporten er avgrenset til å gi et generelt overblikk over DME, forskning og teknologi rundt DME, gassifisering av biomasse, alternative syntesemetoder av DME og simuleringsprogrammet Aspen Hysys. Delmålene for forskningsarbeidet er også avgrensningene for utførelsen og innholdet av bachelorarbeidet. Som en utvidelse av delmålene er en lønnsomhetsanalyse i form av nåverdi (NV) utført. Bacheloroppgaven tar utgangspunkt i fire utvalgte termodynamiske modeller for syntesen av DME. Disse er PRSV, UNIQUAC, NRTL og Wilson. Simuleringene i Aspen Hysys er også begrenset til tre reaktordesign, der PFR (rørreaktor) ikke er benyttet direkte i simuleringene.

## 1.4 Hovedbidrag

Med utgangspunkt i bacheloroppgaven ved USN fra 2022; «Aspen Hysys simulering av metanolsyntese basert på gass fra biomasse gassifisering», bidrar dette arbeidet ytterligere til feltet biomasse til syntesegass og DME som transportdrivstoff. Dette er også relatert til de operasjonelle utfordringene med gassifisering av biomasse for produksjon av biogass og grønn DME. Basert på denne forskningen kan en mer økonomisk og effektiv utnyttelse av biomasse oppnås ved å justere driftsparametere som trykk og/eller temperatur i DME-syntesen.

## 1.5 Leserveiledning

De etterfølgende hovedkapitlene handler om:

Kapittel 2, Dimetyleter (DME), følger innledningen fra kapittel 1 og omhandler de viktigste teoretiske temaene som er relevante for dette bachelorarbeidet. Kapitlet innleder med en generell beskrivelse av DME og en sammenligning mellom DME og andre energibærere. DME og diesel blir også presentert i et eget underkapittel. Deretter beskrives reaksjonskinetikk og kjemisk likevekt, samt alternative synteseruter for produksjon av DME og gassifisering av biomasse. Avslutningsvis blir forskning og teknologi rundt DME presentert.

Kapittel 3, Aspen Hysys, tar for seg prosesssimuleringsprogrammet Aspen Hysys, samt termodynamiske modeller, reaktordesign, energioptimalisering og pinch-teknologi knyttet til programvaren.

Kapittel 4, Aspen Hysys simuleringer, handler om de termodynamiske beregningsmodellene, de eksperimentelle oppsettene, de analytiske- og bygningsmessige metodene som inngår i dette arbeidet.

I kapittel 5, Resultater fra simuleringer, blir de primære resultatene fra de teoretiske- og eksperimentelle arbeidene for dette bachelorarbeidet presentert.

I kapittel 6, Diskusjon, blir hovedresultatene fra de teoretiske- og eksperimentelle arbeidene presentert i det femte kapitlet faglig diskutert. De eksperimentelle observasjonene bidrar til en bedre forståelse av syntetisk produsert DME fra biomasse og syntesegass.

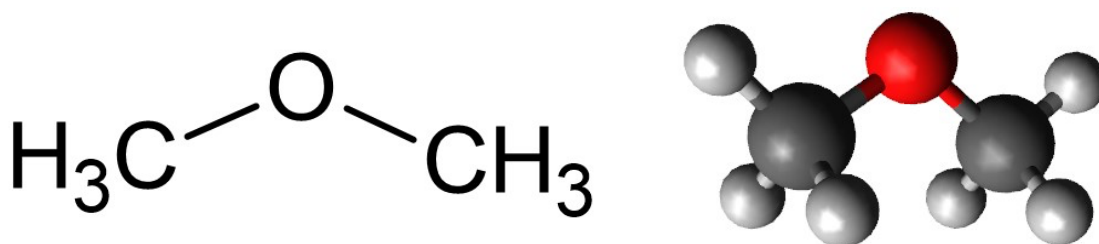
Kapittel 7, Konklusjon og forslag til videre arbeid, oppsummerer konklusjonene som er trukket knyttet til dette bachelorarbeidet, og gir forslag til elementer som kan inkluderes i framtidige studier.

## 2 Dimetyleter (DME)

Dette kapitlet dekker de viktigste teoretiske temaene som er relevante for dette bachelorarbeidet. Kapitlet starter med en beskrivelse av DME og DMEs fysiske egenskaper, deretter sammenlignes DME og andre energibærere. Videre blir reaksjonskinetikk og kjemisk likevekt beskrevet. Alternative synteseruter og gassifisering av biomasse er de neste underkapitlene som forklarer opphavet til DME. Avslutningsvis blir forskning og teknologi knyttet til DME lagt frem.

### 2.1 Generelt om DME

Dimetyleter (DME), metoksymetan, er en organisk gassformig forbindelse ved romtemperatur. DME har den kjemiske formelen  $C_2H_6O$  og  $(CH_3)_2O$ , samt den kjemiske molekylstrukturen  $CH_3-O-CH_3$ , som vist i Figur 2.1. Figurene er laget i programvarene ChemSketch og Avogadro. DME har et smeltepunkt på  $-141\text{ }^\circ\text{C}$  og et kokepunkt på  $-24,9\text{ }^\circ\text{C}$  ved normal tilstand (NTP). DME er en fargeløs, lukt- og smaksfri organisk gass ved normal- og standard tilstand (STP). DME har mange bruksområder som f.eks. drivgass, drivstoff, plastråvarer og løsemiddel i bl.a. batterier. Gassen er mest kjent for å være brukt som drivgass i spraybokser, og er en erstatning for drivmiddelet klorfluorkarbon (KFK) som tidligere har vært brukt. KFK-gasser har på kort tid vist seg å være svært skadelig på ozonlaget i atmosfæren, som beskytter livet på jorda mot skadelig UV-stråling. Etersom DME-gassen ikke er giftig og har ingen påvirkning på ozonlaget, ble DME en av de nye bærekraftige drivgassene [7].

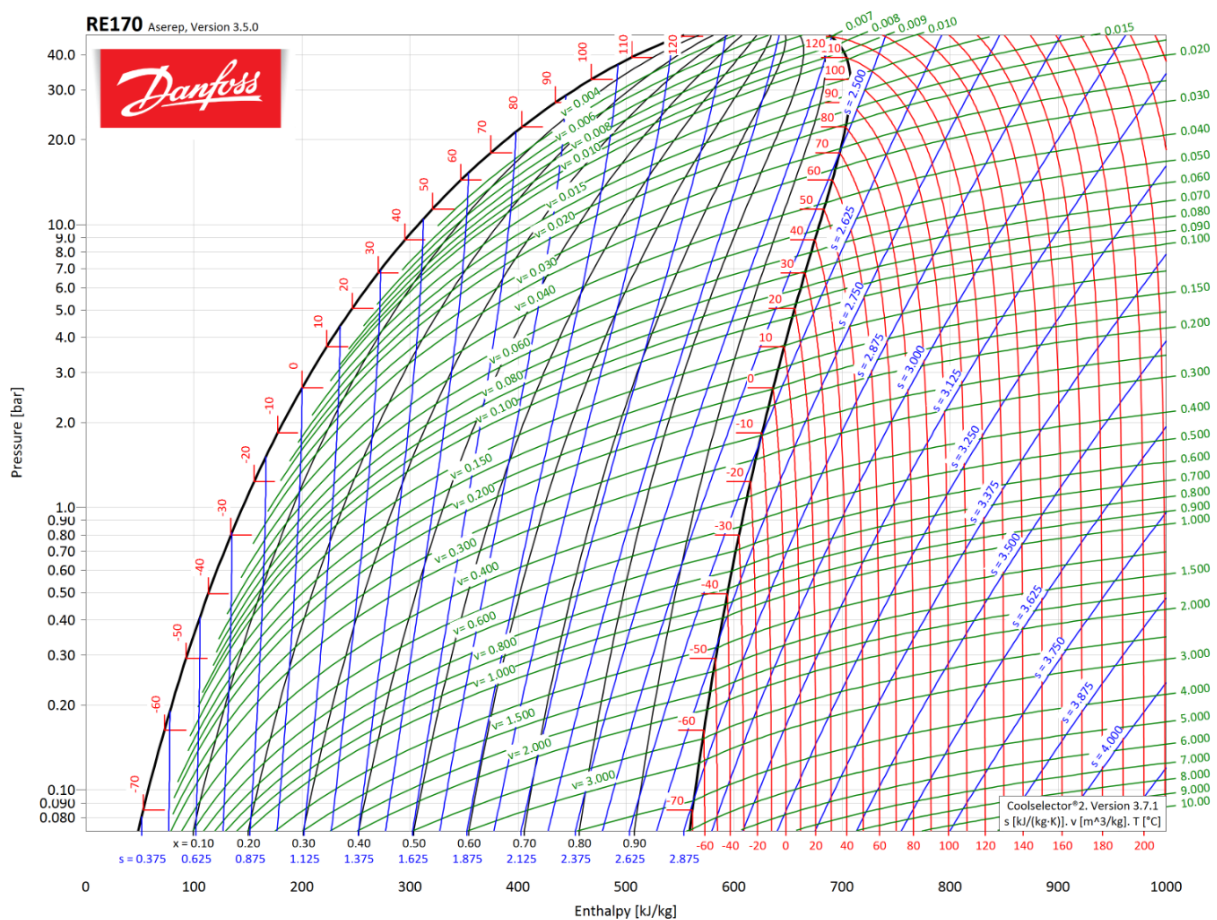


Figur 2.1: Molekylstruktur og -modell av dimetyleter (DME).

DME er den enkleste eteren, bestående av ett oksygenatom med enkeltbinding til en metylgruppe på hver side. En eter er en organisk forbindelse der et oksygenatom er bundet til to karbonatomer med enkeltbindinger. DME tilhører gruppen alkyletere, der etere har begge karbonatomene bundet til oksygenatomet og er en del av en alifatisk kjede. DME er en svært brannfarlig gass [8]. DME i gassform oppbevares i trykkbeholdere, og kan eksplodere om den varmes opp pga. ekspansjon. Gassen er ikke giftig, men høye konsentrasjoner av DME inhalert vil ha en nevrotoksisk effekt på sentralnervesystemet, noe som kan resultere i ubehag, redusert konsentrasjonsevne og/eller kvalme [9]. Om konsentrasjonen av DME er i området 34 % til 93 %, viser det binære vannsystemet av DME to væskefaser [14]. Ved tilsetning av 6 % eller mer etanol, vil blandingen være fullstendig blandbar over hele konsentrasjonsområdet til DME [10]. Ved ca.  $-23\text{ }^{\circ}\text{C}$  og 1 atm vil gassen forekomme i væsketilstand. DME-gassen vil også gå over til væskefase ved ca. 5 bar trykk og romtemperatur. I væskefase brukes DME oftest som løsemiddel. Som løsemiddel er DME egnet fordi den fordampes raskt og har lavt kokepunkt. Men om DME kommer i vann, kan det skade vannlevende organismer over tid [11]. Dette er imidlertid ikke så sannsynlig fordi DME har rask fordampningsevne. [12 s. 1278]

Bindingsenergi er den energimengden som frigjøres når flere partikler slår seg sammen til ett enkelt system. Bindingsenergi kan også være den energimengden som må tilføres et system av partikler for å bringe de enkelte partiklene i systemet fra hverandre. Denne energimengden mellom atomene i molekylet er viktig for å forstå reaksjonsmekanismene. DME-molekylet har ingen C-C bindinger, kun C-H og C-O bindinger. C-H bindingen har høyere bindingsenergi enn C-O bindingen, og dermed vil C-O bindingen brytes ned først ved tilførsel av energi. Den geometriske strukturen til DME er tetraeder, noe som gir oksygenatomet og de to karbonatomene en  $sp^3$ -hybridisering i reaksjonsmekanismen.  $Sp^3$ -hybridisering innebærer at et atom med frie elektroner i det ytterste skallet ( $s^2p^2$ ) får fire likeverdige orbitaler ( $sp^3$ ) som peker mot hjørnene i et tetraeder. De intermolekulære kreftene som inngår for molekylet består av London-krefter, og strukturen for DME vil resultere i en kantet og bøyd struktur (Figur 2.1) med svake dipol-bindinger [13].

DME har også bruksområde som kuldemedium. Figur 2.2 viser et diagram over trykk og entalpi (pH-diagram) for DME, der alle fasene kan identifiseres. Dette diagrammet viser et plott av mulige termodynamiske stabile faser (væskefase, gassfase og to-fase) av DME. Til venstre for den sorte kurven er alle tilstander for DME i væskefase, mens gassfase til høyre. I midten av den sorte kurven er det to-fase (gass og væske). Mettet væske for DME finnes langs den sorte kurven på venstre side, og mettet damp for DME finnes langs den sorte kurven på høyre side. De røde strekene representerer temperatur [°C], x-aksen representerer entalpi [kJ/kg] og y-aksen representerer trykk [bar]. De grønne og blå strekene er ikke relevante for dette bachelorarbeidet, da entropi (et mål på uorden i et system) ikke blir gjennomgått. Alle R-gasser blir omtalt som kuldemedium, og DME som kuldemedium blir kalt RE170.



Figur 2.2: Diagram over trykk og entalpi (pH-diagram) for dimetyleter (DME). [14]

## 2.2 DME og andre energibærere

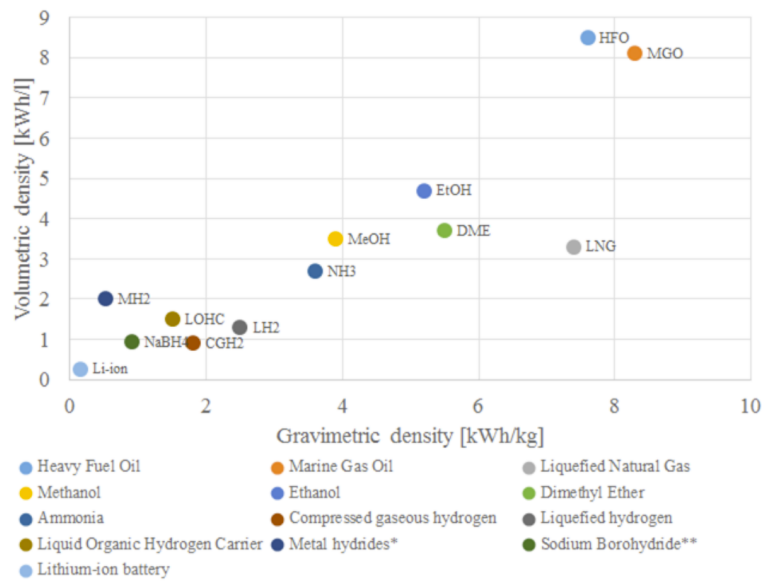
De primære energikildene er energiformer som finnes i naturen og som ikke har blitt omdannet eller transformert. Dette innebærer både ikke-fornybare ressurser som f.eks. kull, olje og naturgass, og fornybare ressurser som sol, vind, vannkraft og biodrivstoff. De ikke-fornybare ressursene er lagerressurser av begrenset mengde, mens de fornybare ressursene er energikilder som inngår i naturens kretsløp og blir kontinuerlig fornyet [15]. Energikilder omfatter alle materialer eller naturfenomen som kan omdannes til nyttige energiformer, som varme, elektrisitet og mekanisk energi. De samlede energikildene på jorden er svært store, men ikke alle er tilgjengelig på en slik måte at de kan komme samfunnet til nytte. Utnyttelsen begrenses av teknologiske- og økonomiske forutsetninger, noe som endrer seg over tid. Sekundære energikilder eller energibærere er sendere av energi, og kan ikke brukes direkte [16].

En energibærer er et stoff eller system som kan lagre og transportere energi fra en primær energikilde til et sted hvor den kan brukes, som f.eks. ammoniakk, fjernvarme eller oljeprodukter. Et eksempel på en kombinasjon mellom energibærer og energikilder er vindkraft til hydrogen. Vindkraft produserer elektrisk energi via vindturbiner. Denne produserte energien kan benyttes momentant eller lagres i hydrogen fra f.eks. elektrolyse. Deretter kan ammoniakk frakte hydrogen i ammoniakkforbindelsen enklere enn hydrogen i ren form. Dette er fordi hydrogen tar større plass og bruker mye mer energi på komprimering eller flytendegjøring enn ammoniakk. Energibærere er derfor et viktig virkemiddel for å enklere kunne håndtere og frakte den produserte energien. Andre eksempler på energibærere er elektrisitet, varmebærere (vann/damp), batterier og DME. [17]

Figur 2.3 viser energilagringstettheten per masse og volum for flere energibærere (fossil, biomasse og e-brensel). Energibærere kan brukes i en forbrenningsmotor eller i et brenselcellesystem. En forbrenningsmotor er en maskin som omdanner kjemisk energi i et drivstoff til mekanisk arbeid ved å forbrenne drivstoffet med luft inne i en sylinder. Et brenselcellesystem er et apparat som omdanner kjemisk energi i et drivstoff til elektrisk strøm ved å la drivstoffet reagere med oksygen uten forbrenning [18]. En forbrenning av DME og andre biobaserte drivstoff sammenlignet med en forbrenning av transisjonsdrivstoff, viser at utslippene fra DME inneholder mindre fraksjoner av CO<sub>2</sub>, NO<sub>x</sub> og andre partikler [19]. Energibærere som drivstoff kan samles i fire kategorier:

- Transisjonsdrivstoff: Fossilt brensel, men med mindre skadelig utslipp (NO<sub>x</sub>, SO<sub>x</sub> og PM).
- Biobasert drivstoff: Lavere klimagassutslipp, men fortsatt karbonbasert (krever biomasse).
- Fornybart e-drivstoff: Karbonbasert drivstoff som bruker karbon som fanges opp fra luften via direkte luftfangst (DAC).
- Karbonfritt drivstoff: Karbonfrie energibærere som hydrogen, ammoniakk og batterier.





Figur 2.3: Volumetrisk- og gravimetrisk energitetthet av drivstoff inkludert tanksystemet. [20]

Volumetrisk energitetthet er mengden energi som kan inneholdes for et gitt volum (energi per volum). Gravimetrisk energitetthet er den tilgjengelige energien per masseenheter av en energibærer (energi per masse). Disse målene er viktige for å sammenligne ulike drivstoff for et kjøretøy, siden de påvirker hvor langt et kjøretøy kan kjøre uten å øke størrelsen på tanken eller batteripakken [20]. Drivstoff med høyere volumetrisk- og gravimetrisk energitetthet avhenger også av hvor kompleks den kjemiske sammensetningen av drivstoffet er. På grunn av kraftbehovet og kjøretøyets fysiske størrelse er energitettheten til drivstoffene essensielle da det begrenser anvendeligheten av et drivstoff til et kjøretøy. Energibærere med høyere volumetrisk- og gravimetrisk energitetthet har bedre potensiale når det kommer til drivstoff i bilmotorer. Tungoljer har høyest potensiale da disse har høyest energitetthet, DME og ammoniakk har middels energitetthet mens litiumbatterier har lavest energitetthet. I praksis vil dette f.eks. påvirke rekkevidden et kjøretøy kan reise.

Eksosen til syntetisk drivstoff i forbrenningsmotorer består av CO<sub>2</sub>, mens for hydrogen består den av vanndamp. Syntetisk drivstoff har flere fordeler som f.eks. at det kan brukes i dagens forbrenningsmotorer uten store endringer. Det finnes også en infrastruktur for distribusjon og lagring av syntetisk drivstoff, som f.eks. bensinstasjoner. I tillegg kan syntetisk drivstoff være karbonnøytralt hvis det produseres fra fornybare kilder. En ulempe med syntetisk drivstoff er at det konkurrerer med litiumbatterier, som har blitt godt etablert i personbilsegmentet. Det kan derfor virke som at syntetisk drivstoff er mer egnet for skip, fly og tungtransport, men ikke for personbiler. DME har derimot fordeler som lavere utslipp enn ammoniakk, men noe høyere enn hydrogen. DME lagres ved moderat temperatur og trykk, sammenlignet med hydrogen og ammoniakk som krever et høyt trykk eller lav temperatur. Ammoniakk kan være giftig ved lekkasje eller forbrenning, mens hydrogen er svært eksplosivt. [21]

## 2.3 DME og diesel

DME og diesel er to drivstoff som kan brukes i transportsektoren for de samme formålene. DME gir noen fordeler ovenfor diesel, som f.eks. et høyere cetantall (petroleumsvirksomhet) [22]. Et høyere cetantall gjør at det antennes raskere og gir mindre støy i motoren [23]. Et drivstoff med et høyt cetantall gir lavere utslipp, bedre kaldstart og lavere forbruk enn et drivstoff med et lavt cetantall. DME gir også et lavere utslipp av partikler, NO<sub>x</sub>, hydrokarboner og CO enn diesel, noe som gjør den mer miljøvennlig. DME gir imidlertid noen ulemper sammenlignet med diesel, som f.eks. lavere tetthet og viskositet enn diesel, noe som krever tilpasninger i injeksjonssystemet [24]. Noen fysiske egenskaper for DME og diesel, samt andre verdier ved NTP er listet opp for sammenligning i Tabell 2.1. Dieselen benyttet i denne sammenligningen er diesel B7, dvs. en blanding av tradisjonell diesel og 7 % biodiesel. Beregninger med pris for diesel og DME er satt med verdier fra 2018 som et utgangspunkt da verdiene har variert mye fra 2019-2023 pga. COVID-19 og krigen i Ukraina.

Tabell 2.1: Fysiske egenskaper og verdier for dimetyleter (DME) og diesel B7. [24] [25] [26]

Beskrivelse	DME	Diesel B7
Kjemisk formel	CH <sub>3</sub> OCH <sub>3</sub>	C <sub>12</sub> H <sub>23</sub>
Molekylvekt [g/mol]	46	170
Viskositet [cP]	0,017	3
Tetthet [kg/m <sup>3</sup> ]	740	860
Kokepunkt [°C]	-24,9	-90 til -15
Nedre brennverdi [MJ/kg]	28,4	42,5
Volumetrisk energitetthet [MJ/dm <sup>3</sup> ]	21,02	36,55
Cetantall [Cetan]	55-60	40-50
Pris [USD/US gallon]	2,26	5,67
Pris [NOK/dm <sup>3</sup> ]	5,97	15

Om diesel hadde vært nevnt i Figur 2.3 hadde den ligget et sted mellom DME og tungoljene. Formel 2.1 viser hvordan tettheten til diesel ( $\rho_{diesel}$ ) blir benyttet for å finne den volumetriske energitettheten til diesel ( $U_{diesel}$ ). Mens Formel 2.2 viser hvordan tettheten til DME ( $\rho_{DME}$ ) blir benyttet for å finne den volumetriske energitettheten til DME ( $U_{DME}$ ). Deretter finner Formel 2.3 forholdstallet mellom diesel og DME for den volumetriske energitettheten. Denne viser at for hver liter med diesel forbrent i en forbrenningsmotor trengs det 1,74 ganger så mye liter DME. Dette vil si at et kjøretøy med diesel som drivstoff vil kunne oppnå en lengre strekning enn et likt kjøretøy med DME som drivstoff. Deretter må man enten fylle på DME oftere eller ha en DME-tank som er nesten dobbelt så stor. Men om DME er blandet sammen med diesel, vil rekkevidden bli noe redusert samtidig som klimagassutslippet og andre sotpartikler blir noe redusert. Verdiene for utregningene er hentet fra Tabell 2.1.

$$\rho_{diesel} = \frac{860 \left[ \frac{kg}{m^3} \right]}{1000 \left[ \frac{dm^3}{m^3} \right]} = 0,860 \left[ \frac{kg}{dm^3} \right] \rightarrow U_{diesel} = 0,860 \left[ \frac{kg}{dm^3} \right] * 42,5 \left[ \frac{MJ}{kg} \right] = 36,55 \left[ \frac{MJ}{dm^3} \right] \quad 2.1$$

$$\rho_{DME} = \frac{740 \left[ \frac{kg}{m^3} \right]}{1000 \left[ \frac{dm^3}{m^3} \right]} = 0,740 \left[ \frac{kg}{dm^3} \right] \rightarrow U_{DME} = 0,740 \left[ \frac{kg}{dm^3} \right] * 28,4 \left[ \frac{MJ}{kg} \right] = 21,02 \left[ \frac{MJ}{dm^3} \right] \quad 2.2$$

$$\frac{\text{Volumetrisk energitetthet for diesel } (U_{diesel})}{\text{Volumetrisk energitetthet for DME } (U_{DME})} = \frac{36,55 \left[ \frac{MJ}{dm^3} \right]}{21,02 \left[ \frac{MJ}{dm^3} \right]} = 1,74 \quad 2.3$$

En god sammenligning mellom diesel og DME kan gjøres ved å sjekke prisen per kjørte kilometer. Verdiene vil variere avhengig av en rekke faktorer, men kan vises med et forenklet eksempel:

Et gjennomsnittlig forbruk av diesel B7 i en generisk privatbil er 6 liter per 100 kilometer, dvs. 0,06 liter per kilometer. Mens et gjennomsnittlig forbruk av diesel B7 i en generisk lastebil er 35 liter per 100 kilometer, altså 0,35 liter per kilometer. For gjennomsnittlig forbruk av DME må forbruket multipliseres med 1,74. Pris for DME og Diesel B7 er fra Tabell 2.1. Formel 2.4 og Formel 2.6 beregner kostnad for henholdsvis personbil og lastebil med diesel B7 som drivstoff. Mens Formel 2.5 og Formel 2.7 beregner kostnad for henholdsvis personbil og lastebil med DME som drivstoff.

$$\text{Kostnad for personbil med Diesel B7} = 15,00 \left[ \frac{NOK}{dm^3} \right] * 0,06 \left[ \frac{dm^3}{km} \right] = 0,90 \left[ \frac{NOK}{km} \right] \quad 2.4$$

$$\text{Kostnad for personbil med DME} = 5,97 \left[ \frac{NOK}{dm^3} \right] * 0,06 \left[ \frac{dm^3}{km} \right] * 1,74 = 0,62 \left[ \frac{NOK}{km} \right] \quad 2.5$$

$$\text{Kostnad for lastebil med Diesel B7} = 15,00 \left[ \frac{NOK}{dm^3} \right] * 0,35 \left[ \frac{dm^3}{km} \right] = 5,25 \left[ \frac{NOK}{km} \right] \quad 2.6$$

$$\text{Kostnad for lastebil med DME} = 5,97 \left[ \frac{NOK}{dm^3} \right] * 0,35 \left[ \frac{dm^3}{km} \right] * 1,74 = 3,63 \left[ \frac{NOK}{km} \right] \quad 2.7$$

Tabell 2.2 viser sammenligningen og resultatene mellom diesel B7 og DME som benyttet i formlene ovenfor. Resultatet i tabellen viser den forskjellige prisen per kjørte kilometer med person- og lastebil, der DME har lavest pris per kjørte kilometer. Selv om tanken og forbruket er 1,74 ganger større, vil hele regnestykket avhenge av literprisen. Ved stadig større overgang mot det "grønne" skiftet, kan det antas at prisen for diesel vil øke pga. politikk og mangelvare i framtiden. Om syntetiske drivstoff som bl.a. DME får økt politisk støtte, økt volumproduksjon og økt etterspørsel, kan det antas at prisen for DME vil reduseres.

Tabell 2.2: Sammenligning mellom diesel B7 og dimetyleter (DME) i person- og lastebil.

Beskrivelse	Diesel B7	DME kilde
Forbruk personbil [dm <sup>3</sup> /km]	0,060	0,116
Forbruk lastebil [dm <sup>3</sup> /km]	0,35	0,68
Pris [USD/US gallon]	5,68	2,26
Pris [NOK/dm <sup>3</sup> ]	15,00	5,97
Pris per kilometer med personbil [NOK/km]	0,90	0,62
Pris per kilometer med lastebil [NOK/km]	5,25	3,63

## 2.4 Reaksjonskinetikk og kjemisk likevekt

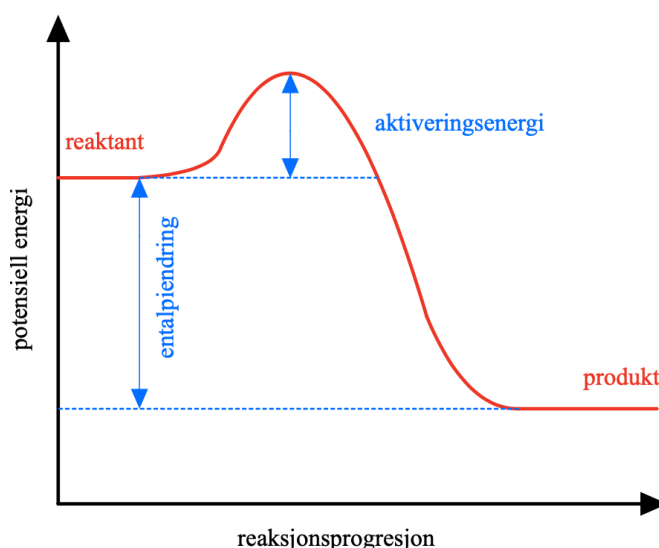
Fysikalsk kjemi omfatter flere begreper som beskriver reaksjonskinetikk og kjemisk likevekt, samt forholdet mellom dem. Reaksjonskinetikk er læren om reaksjoner som kun går i én retning, uten at det skjer noen betydelig tilbakereaksjon. Kjemisk likevekt er en tilstand der reaksjonen går både fremover og bakover med samme hastighet, slik at konsentrasjonene av reaktanter og produkter forblir konstante. En likevektsreaksjon kan tvinges mot reaktantenes side eller mot produktets side ved å endre på trykk og temperatur. Det finnes en sammenheng mellom likevektskonstanten og hastighetskonstantene i en kjemisk likevekt, som viser hvor langt reaksjonen har gått mot likevekt. [27 s.549-577]

En annen viktig del av fysikalsk kjemi er termodynamikk, som handler om energi og entropi i kjemiske reaksjoner. Termodynamikk gir informasjon om en reaksjon er spontan eller ikke, dvs. om den foregår av seg selv uten energitilførsel. Termodynamikk gir kun informasjon om hvorvidt en reaksjon er spontan eller ikke, mens reaksjonskinetikk beskriver reaksjonens hastighet. Spontaniteten til en reaksjon kan bestemmes ved å beregne Gibbs frie energi, som representerer den delen av energien i en kjemisk reaksjon som kan benyttes til å utføre arbeid. En reaksjon er spontan hvis den frie energien er negativ. Dette kan skje hvis reaksjonen er eksoterm (avgir varme) eller hvis reaksjonen øker entropien (graden av uorden) i systemet. [27 s. 549-577]

Energi i form av varme spiller en viktig rolle i enhver reaksjon. I en endoterm reaksjon kreves det tilførsel av varme til systemet fra omgivelsene, slik at systemets entalpi (varmeinnhold) økes. En eksoterm reaksjon er det motsatte av en endoterm reaksjon, altså at det frigjøres varme fra systemet til omgivelsene, slik at systemets entalpi reduseres. Entalpiendring er et mål på hvor mye varme som overføres i en reaksjon ved konstant trykk. Hvis entalpiendringen er positiv, er reaksjonen endoterm og temperaturen i systemet stiger. Hvis entalpiendringen er negativ, er reaksjonen eksoterm og temperaturen i systemet synker. Et eksempel på en endotermisk prosess er gassifisering, mens et eksempel på en eksotermisk prosess er dehydrering av DME fra metanol. [28]

Noen reaksjoner skjer i ett enkelt trinn, disse kalles elementærreaksjoner. Andre reaksjoner skjer i flere trinn, disse kalles sammensatte reaksjoner. Hvert trinn i en sammensatt reaksjon kan være en elementærreaksjon eller en likevektsreaksjon. Reaksjonskinetikk studerer hvordan hastigheten på en reaksjon avhenger av faktorer som konsentrasjon, temperatur og katalysatorer. For å analysere dette kreves det kunnskap om reaksjonsmekanismen, dvs. de elementære reaksjonene som utgjør den samlede reaksjonen og de tilhørende hastighetsuttrykkene for hvert elementærtrinn. [27 s. 549-577]

Reaksjonshastighet er et mål på hvor raskt konsentrasjonen av et stoff endrer seg i en kjemisk reaksjon. For å beskrive reaksjonshastigheten matematisk brukes hastighetslover, som viser hvordan konsentrasjonen av reaktantene påvirker hastigheten. Hastighetslovene kan ha ulike ordener, som 0. orden, 1. orden, 2. orden, 3. orden og n. orden, avhengig av hvor mange reaktanter som er involvert og hvordan de reagerer sammen. Et annet begrep i reaksjonskinetikken er halveringstid, som er den tiden det tar for konsentrasjonen av en reaktant å bli halvert i en reaksjon. For at en kjemisk reaksjon skal skje, må det tilføres en viss mengde energi til systemet. Denne energien kalles aktiveringsenergi ( $E_a$ ), og den er nødvendig for å danne et aktivert kompleks mellom reaktantene. Det aktiverte komplekset er en ustabil tilstand der molekylene har kommet så nær hverandre at de kan reagere videre til produkter. Denne energien påvirkes av temperaturen og konsentrasjonen av reaktantene, samt om det finnes en katalysator i systemet. En katalysator er et stoff som senker aktiveringsenergien for en reaksjon uten å inngå i reaksjonen selv, slik at flere molekyler kan danne det aktiverte komplekset og øke reaksjonshastigheten. Figur 2.4 viser hvordan aktiveringsenergien og entalpiendringen varierer uten bruk av katalysator i en reaksjon. [27 s. 549-577]



Figur 2.4: Eksoterm prosess med aktiveringsenergi og entalpiendring fra reaktant til produkt.

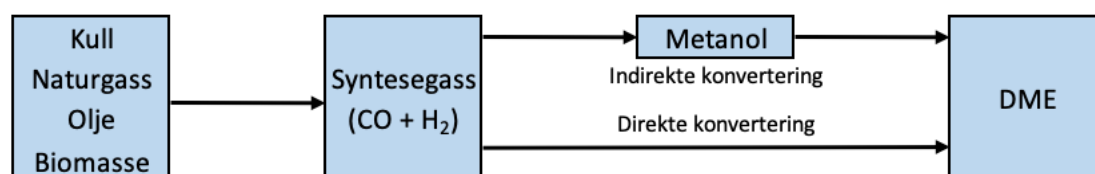
Arrhenius' ligning er vist i Formel 2.8 og er en formel for temperaturavhengigheten av reaksjonsfarten/reaksjonsrate. For en rekke elementærreaksjoner viser det seg at hastighetskonstanten er avhengig av temperaturen. Reaksjonsraten forteller noe om farten reaktanter blir omdannet til produkter.

$$K = Ae^{\frac{-E_a}{RT}} \quad 2.8$$

$K$  er reaksjonshastighetskonstant,  $A$  er kollisjonsfaktor/orienteringsfaktor,  $T$  er temperatur [K],  $R$  er ideell gasskonstant [J/K\* $\text{mol}$ ],  $E_a$  er aktiveringsenergien [J/mol] og  $e$  er Eulers tall. [27 s. 570]

## 2.5 Alternative synteseruter for produksjon av DME

DME kan bl.a. produseres fra syntesegass, som i gassifisering er en blanding av H<sub>2</sub> og CO som er forurenset med CO<sub>2</sub> og CH<sub>4</sub>. Syntesegassen kan lages fra ulike kilder, som naturgass, biomasse, kull eller olje. I denne rapporten fokuseres det på syntesegassen til DME-syntesen som hovedsakelig består H<sub>2</sub> og CO etter rensing. Syntesegassen kan omdannes til DME på to måter: direkte konvertering (ett-trinns prosess) eller indirekte konvertering (totrinnsprosess), som vist i Figur 2.5.



Figur 2.5: Syntesediagram for dimetyleter (DME).

I den indirekte konverteringen lages DME i to trinn: først lages metanol fra syntesegass i en reaktor med en metallisk katalysator, deretter dehydreres metanol til DME i en annen reaktor med en sur katalysator. I den direkte konverteringen lages DME i ett trinn: syntesegassen reagerer direkte til DME i en reaktor med et dobbeltkatalysatorsystem som kombinerer de to katalysatorene. Denne metoden har fordelen av å unngå opphopning av metanol som et mellomprodukt, og dermed øke utbyttet av DME. Begge prosessene er eksoterme, så det er viktig å kontrollere temperaturen i reaktorene for å unngå at likevektsreaksjonene reverseres. [29] [30]

Hovedreaksjonen som finner sted for den indirekte konverteringen av syntesegass fra biomasse er mildt eksoterm og vises i Formel 2.9 [12 s. 968]. Denne formelen viser at reaktanten, metanol, blir omdannet til produktene, DME og vann.



I dette bachelorarbeidet studeres kun den indirekte konverteringen av syntesegass til DME ved hjelp av Aspen Hysys simuleringer. Det fokuseres kun på det andre trinnet i prosessen, som er metanoldehydrering til DME. Det antas at metanol er tilgjengelig som en fødestrøm og at det første trinnet, som er metanolsyntese fra syntesegass, er allerede utført. Dermed simuleres bare reaksjonen mellom metanol og vann i en reaktor for å produsere DME.

I den indirekte konverteringen er entalpiendringen for DME lik reaksjonsenergien for metanoldehydrering (Formel 2.13), som er det eneste trinnet i prosessen. I den direkte konverteringen er entalpiendringen for DME summen av reaksjonsenergiene for fire delreaksjoner: metanolsyntese fra CO (Formel 2.10), metanolsyntese fra CO<sub>2</sub> (Formel 2.11), vann-gass-skifte (Formel 2.12) og metanoldehydrering (Formel 2.13). Tabell 2.3 viser delreaksjonene for direkte og indirekte DME-produksjon, samt deres entalpiendringer.

Tabell 2.3: Oversikt over delreaksjoner og entalpiendring for den direkte- og indirekte prosessen. [31]

Konvertering	$\Delta H^\circ_{298K}$ [kJ/mol]	Delreaksjon	Formel
Direkte	-90,4	$CO + 2H_2 \rightleftharpoons CH_3OH$	2.10
Direkte	-49,4	$CO_2 + 3H_2 \rightleftharpoons CH_3OH + H_2O$	2.11
Direkte	-41,1	$CO + H_2O \rightleftharpoons CO_2 + H_2$	2.12
Direkte Indirekte	-23,0	$2CH_3OH \rightleftharpoons (CH_3)_2O + H_2O$	2.13

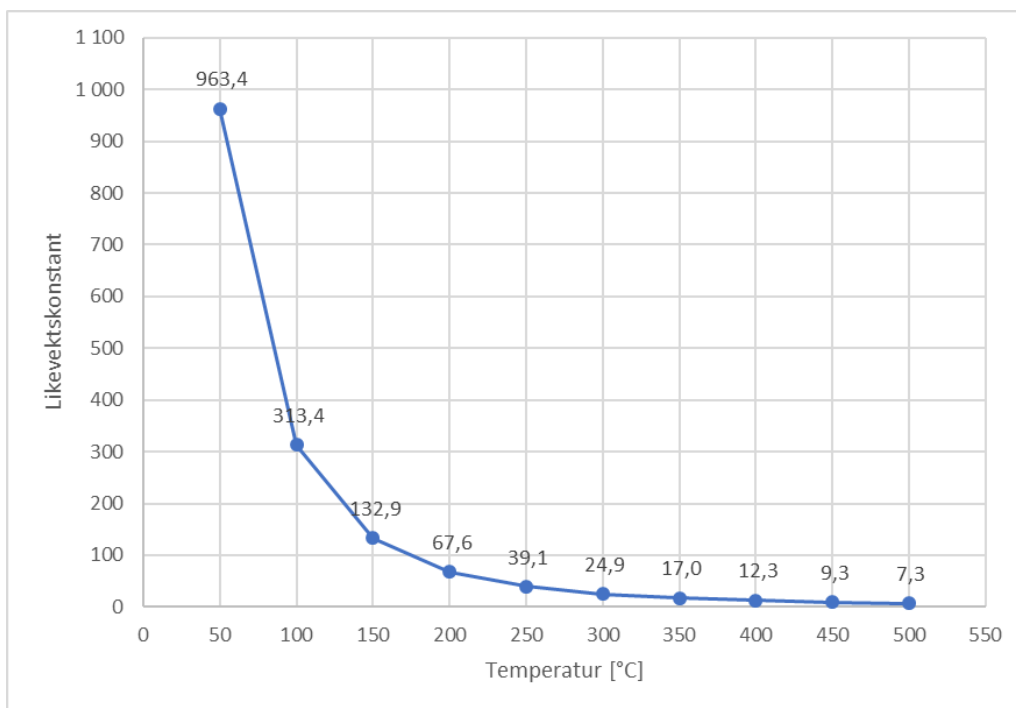
For å beskrive kinetikken for hovedreaksjonen (metanoldehydreringsreaksjonen) brukes Arrhenius' ligning (Formel 2.8), som viser hvordan reaksjonshastighetskonstanten avhenger av temperaturen. Ved å tilpasse data fra Tabell B.1.4 fra kilde [12] får likevektskonstanten ( $K$ ) for reaksjonen følgende uttrykk:  $K = 0,1103 \times e^{\left[\frac{2708,6}{T[K]}\right]}$

Siden 2 mol metanol dehydreres i reaksjonen (Formel 2.13), må likevektskonstanten ( $K$ ) dobles for å få riktig verdi. Det beregnes med to verdier for likevektskonstanten basert på to ulike temperaturer: 250 °C og 200 °C. Disse temperaturene er valgt da de er relevante for senere simuleringer i bachelorarbeidet. Den første verdien ( $K_1$ ) er for temperatur på 250 °C, som vist i Formel 2.14. Den andre verdien ( $K_2$ ) er for temperatur på 200 °C, som vist i Formel 2.15. Figur 2.6 illustrerer hvordan likevektskonstanten endrer seg med temperaturen for 2 mol metanol. Figuren viser at likevektskonstanten øker eksponentielt når temperaturen synker, spesielt under 200 °C. I dette området blir likevektskonstanten så stor at reaksjonen blir praktisk umulig å gjennomføre. Derfor begrenses simuleringene rundt reaktoren seg til temperaturområdet mellom 250 °C og 200 °C.



$$K_{1(250^{\circ}\text{C})} = 2 \text{ mol} \times \left( 0,1103 \times e^{\frac{2708,6 \frac{\text{J}}{\text{mol}} \times 8,3145 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}}}{8,3145 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \times (273,15 + 250)\text{K}}} \right)_{\text{CH}_3\text{OH}} \approx 39,1 \quad 2.14$$

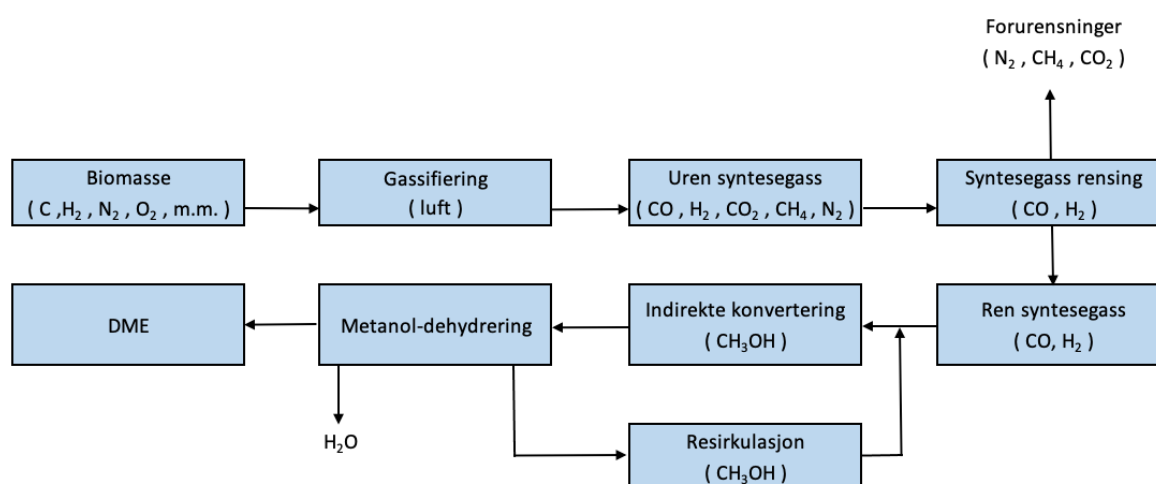
$$K_{2(200^{\circ}\text{C})} = 2 \text{ mol} \times \left( 0,1103 \times e^{\frac{2708,6 \frac{\text{J}}{\text{mol}} \times 8,3145 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}}}{8,3145 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \times (273,15 + 200)\text{K}}} \right)_{\text{CH}_3\text{OH}} \approx 67,6 \quad 2.15$$



Figur 2.6: Kinetikken for likevevtskonstanter og temperaturer i eksponentiell endring.

## 2.6 Gassifisering av biomasse

Biomasse er en fellesbetegnelse på alt biologisk materiale fra levende og nylig døde organismer. Dette kan være plante- og dyrematerialer som trevirke, matvekster, gress, planter, jord- og skogbruksrester, eller organiske komponenter i kommunalt- og industrielt avfall [32]. Biomasse skiller seg fra fossile brennstoffer som kull, olje eller naturgass, som har et organisk opphav, men har blitt omdannet til ikke fornybare energikilder over lang tid. Biomasse kan brukes til å produsere energirik syntesegass gjennom en termokjemisk prosess kalt gassifisering. Gassifisering er en endotermisk prosess der biomassen varmes opp til 700-900 °C i nærvær av en begrenset mengde luft eller oksygen ved ca. 100 °C. Tilføringen av varme fører til en ufullstendig forbrenning av biomassen, slik at de faste stoffene omdannes til flyktige gasser. Denne gassen kalles for uren syntesegass, og vil hovedsakelig bestå av CO, H<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub> og NO<sub>x</sub>. Gassen kan også inneholde fuktighet, svovel og aske som stammer fra biomassen. Den kjemiske sammensetningen av biomassen varierer betydelig avhengig av hvilke materialer som er involvert. Derfor må den urene syntesegassen renses for lukt og forurensninger gjennom en kompleks prosess som involverer flere trinn. Etter rensingen består den rene syntesegassen hovedsakelig av H<sub>2</sub> og CO, som kan brukes som råstoff i produksjon av biodrivstoff eller kjemikalier. Noen eksempler på kjemiske produkter er: ammoniakk, syntetisk- bensin og diesel, kunstgjødsel, eddiksyre, plastråvarer (petrokjemi), metanol og DME [33]. I Figur 2.7 vises et blokkdiagram av hele produksjonsruten til DME gjennom den indirekte konverteringen av biomasse til syntesegass, med resirkulasjon av ureagert metanol.



Figur 2.7: Blokkdiagram av prosessen fra biomasse til dimetyleter (DME).

## 2.7 Forskning og teknologi rundt DME

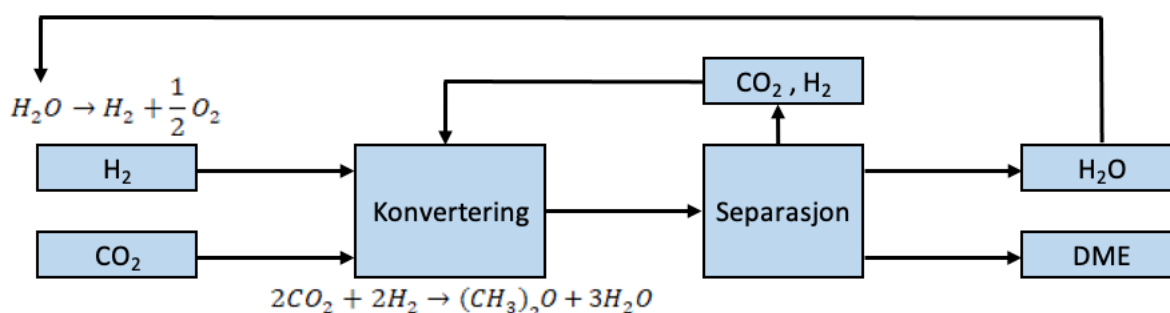
LPG (flytende petroleumsgass) er en vanlig energikilde til oppvarming, matlaging og drivstoff. LPG produseres ofte som et biprodukt ved raffinering av olje, og består hovedsakelig av propan, butan eller en blanding av disse [34]. DME har lignende egenskaper som LPG, og kan derfor blandes med LPG uten mye behandling. På grunn av de strenge miljøforskriftene som er satt for å nå de globale klimamålene, har det vært en økende etterspørsel etter LPG-blandingen med DME. Denne blandingen har fordeler som lavere miljøforurensning og høyere energieffektivitet enn ren LPG. Det globale markedet for DME er i vekst, men LPG-blandingen dominerer fortsatt som et alternativt drivstoff for å redusere skadelige utslipp. Målet er å gå over til bruk av ren DME som en ren energikilde for kraftproduksjon og erstatning for diesel. [35]

DME kan brukes som et råstoffmateriale for å produsere drivstoff og andre produkter. Et eksempel på dette er DTO-prosessen (dimetyleter til olefiner), som omdanner DME til olefiner. Olefiner er umettede hydrokarboner som etylen, propylen og 1,3-butadien. Disse stoffene har mange anvendelser i kjemisk industri. Tidligere ble olefiner hovedsakelig fremstilt fra metanol gjennom MTO-prosessen (metanol til olefiner). Men siden DME er mer reaktiv enn metanol, er DTO en mer kostnadseffektiv prosess. Derfor kan DTO være et alternativ eller et supplement til MTO i fremtiden. [36]

Formaldehyd er et viktig råstoff for produksjon av mange nyttige kjemikalier og produkter [37]. Det produseres vanligvis ved å oksidere metanol, men det kan også lages ved å oksidere DME sammen med metylformiat som et biprodukt [38]. Metylformiat har flere bruksområder, som f.eks. insektmiddel, drivgass, samt et alternativ for erstatning av KFK-gasser. Det kan også brukes til å lage andre verdifulle produkter, som f.eks. maursyre [39].

DME er et drivstoff som kan lages i flytende form og kan brukes direkte i en brenselcelle. Direkte DME brenselceller (DDMEFC) har fått mye oppmerksomhet fra forskere i de siste årene, fordi de har et stort potensial som et alternativ til bærbare strømkilder. Direkte metanol-brenselceller (DMFC) har tidligere vært den mest populære kraftkilden, fordi de har en høy energitetthet. Men en DDMEFC har teoretisk sett en høyere effektivitet enn andre direkte brenselceller, men det må gjøres mer forskning før denne typen brenselceller kan selges på markedet. [40] [41]

I prosessindustrien er det et stort behov for å fange, lagre og gjenbruke karbondioksid. Mange fabrikker har endret seg for å slippe å betale CO<sub>2</sub>-kvoter. CO<sub>2</sub> som er fanget kan brukes som et godt råstoff for å lage andre verdifulle produkter. Det forskes på å lage DME ved å direkte hydrogenere (omdanne) CO<sub>2</sub> til DME over en membranreaktor, som vist i Figur 2.8 [42]. Forskere har prøvd å bytte ut syntesegassen med en gassblanding av CO<sub>2</sub> og H<sub>2</sub>, der H<sub>2</sub> blir laget av å spalte vannmolekylet fra fornybar energi som vindkraft og elektrolyse. CO<sub>2</sub> er et billigere råstoff i produksjonen av DME sammenlignet med alkoholer (metanol, etanol, butanol og oktanol) og hydrokarboner [28]. For å redusere utslipp av fossile klimagasser ser denne teknologien lovende ut for industriell framtid, fordi prosessen kan gjøre om klimagassen til rene produkter som bl.a. bærekraftig DME-drivstoff. Dette er en gammel forskning som har fått ny interesse i dagens industri som CO<sub>2</sub>-fangst til lagring (CCS).



Figur 2.8: Direkte konvertering av karbondioksid (CO<sub>2</sub>) til dimetyleter (DME) med membranreaktor.

Kunstig intelligens (AI) er en teknologi som kan etterligne menneskelig tenkning, læring og selvforbedring. Kunstig intelligens har blitt mye brukt i prosessanlegg og simuleringssystemer som Aspen Hysys de siste årene. Ved å analysere store datamengder og bruke avanserte algoritmer, kan AI-teknologi finne mønstre og sammenhenger som mennesker kanskje ikke ville ha sett. Kunstig intelligens kan brukes i prosessanlegg for å forbedre sikkerheten, effektiviteten, lønnsomheten og kvaliteten i prosessindustrien. Dette kan gjøres ved at AI bruker data, maskinlæring og prediktiv analyse for å modellere, optimalisere, kontrollere og vedlikeholde prosessene. AI kan dermed brukes til å oppdage feil i et prosessanlegg [43]. Aspen Hysys har flere tillegg som integrerer kunstig intelligens i programvaren. Et av disse er Aspen Hybrid Models, som bruker en form for AI som lager flere alternativer ut fra gitte parametere for å modellere komplekse prosesser. Et annet tillegg er Aspen AI Model Builder, som bruker maskinlæring til å lære av data for å lage og oppdatere modeller enklere og raskere. [44]

## 3 Aspen Hysys

En rekke dataprogrammer er viktige for dagens kjemiingeniører, spesielt de som kan simulere kjemiske prosesser. Et eksempel på en prosessimulator er Aspen Hysys, som kan lage matematiske og skjematiske modeller av både batch-, semibatch- og kontinuerlige prosesser, samt prosesser med faste stoffer. For å lage disse modellene, trenger prosesssimulatoren en komponentdatabase og en termodynamisk beregningsmodell. Komponentdatabasen gir parameterne som brukes til å beregne de fysiske egenskapene med de termodynamiske modellene. Disse modellene sørger for nøyaktige beregninger av fysiske egenskaper, faseoppførsel og transportegenskaper som er relevante for prosessindustrien. [12 s. 397-402]

Aspen Hysys kan utføre mange typer beregninger innen kjemiteknikk, f.eks. masse- og energibalanse, damp-væske likevekt (VLE), og simulering av unike kjemitekniske utstyr. Aspen Hysys hjelper prosessindustrien med å øke lønnsomhet og produktivitet gjennom hele anleggets driftstid. Ved å bruke prosesssimulatoren kan ingeniørene optimalisere produksjonen, og forbedre designet til å danne seg et beslutningsgrunnlag. Simuleringene gir også prosessindustrien flere forretningsfordeler, som f.eks. overvåking av utstyrets ytelse, reduserte ingeniørkostnader, samt evaluering av prosessoperabilitet og sikkerhetshensyn. [45]

Prosesssimuleringene baserer seg på de termodynamiske modellene, men disse kan avvike fra det som virkelig skjer i en industri. Årsakene til dette kan være feil valgte termodynamiske modeller, feil generering av hypotetiske komponenter, utilstrekkelige modellparametere eller for varierende industridata. Aspen Hysys har et stort utvalg av termodynamiske modeller, over 30 forskjellige, som inneholder en omfattende komponentdatabase og muligheten til å legge til brukerkomponenter. Det er viktig å bruke de termodynamiske modellene som passer til prosessen som skal simuleres. [44]

De følgende underkapitlene går dypere inn i det teoretiske spekteret rundt de termodynamiske modellene, reaktordesign og energioptimalisering knyttet til Aspen Hysys. Det legges også vekt på å forenkle og forklare disse komplekse temaene, siden bl.a. noen av de termodynamiske beregningsmodellene bruker mange ukjente og avanserte kvantekjemiske beregninger. Underkapitlet om reaktordesign tar utgangspunkt i to forskjellige reaktortyper. Mens underkapitlet om energioptimalisering viser den dynamiske og kreative aktiviteten som er involvert i denne typen optimalisering.

### 3.1 Termodynamiske modeller

Aspen Hysys bruker termodynamiske beregningsmodeller for å beregne fysiske og transportegenskaper, samt faseoppførsel for de simulerte prosessene. Det finnes mange ulike termodynamiske modeller, men i dette bachelorarbeidet fokuseres det på fire av dem som er relevante for syntesen av DME. Disse er PRSV, UNIQUAC, NRTL og Wilson. Figur 3.1 gir en oversikt over disse og noen andre modeller.

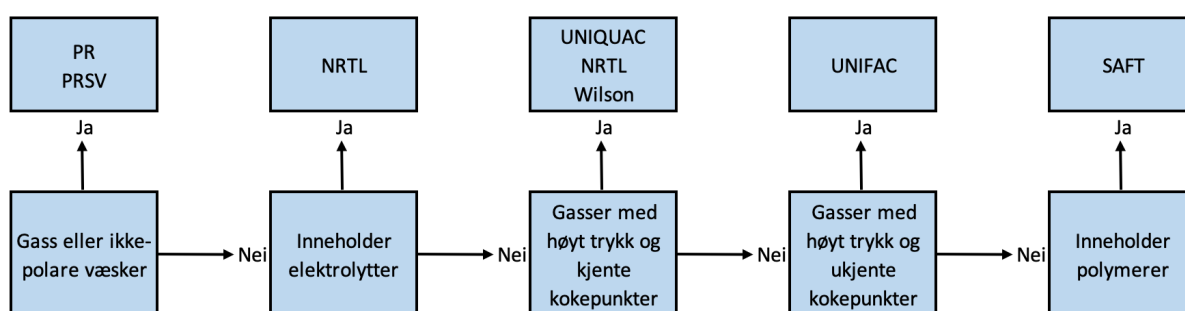
PRSV (Peng-Robinson- Stryjek-Vera) er en modifisert versjon av PR (Peng-Robinson), som er en populær modell for hydrokarbonsystemer i VLE. PRSV tar hensyn til moderate avvik fra idealitet i gass- og ikke-polare væskefaser. Denne modellen passer godt for vandige løsninger som inneholder vann, metanol eller glykoler, og brukes bl.a. i simuleringer av luftoperasjon og metanolinjeksjon. [44]

UNIQUAC (Universal Quasi Chemical) er en modell som beskriver væskestrukturen ved hjelp av aktiveringskoeffisient og arealfraksjonsparameter. Denne koeffisienten er en faktor som kan redegjøre for avvik fra den ideelle oppførselen i en blanding av kjemiske stoffer, mens arealfraksjonskomponenter er et mål på hvor mye av ett gitt areal som er dekket av et bestemt stoff i en blanding. Modellen kan også håndtere gasser med høyt trykk og kjente kokepunkter. [44]

NRTL (Non-Random-Two-Liquid) er en annen modell som bruker aktiveringskoeffisient for å representere ikke-idealitet i væskefasen. Den kan også håndtere elektrolytter og gasser med trykk over 10 bar. NRTL kan beregne egenskaper for rene komponenter som metanol, vann og DME. [44]

Wilson er en tredje modell som bruker aktiveringskoeffisienter, men med enklere form enn UNIQUAC og NRTL. Den kan ikke brukes for systemer med to væskefaser. [44]

Det er essensielt å benytte riktig termodynamisk modell i Aspen Hysys for å sikre at den ikke-ideelle oppførselen simuleres riktig. For denne prosessimuleringen av DME syntesen er det anbefalt av faglitteratur å bruke UNIQUAC modellen. [12 s. 1283]



Figur 3.1: Valg av noen termodynamiske modeller i Aspen Hysys.

## 3.2 Reaktordesign

For å simulere kinetiske reaksjoner i Aspen Hysys, må reaksjonsparametere som er unike for systemet oppgis, samt konsentrasjonen av reaktantene og produktene. Disse parameterne inkluderer bl.a. aktiveringsenergiene og reaksjonskonstantene. Kinetiske reaksjoner og reaksjoner med kjemisk likevekt kan simuleres ved bruk av kontinuerlige reaktorer.

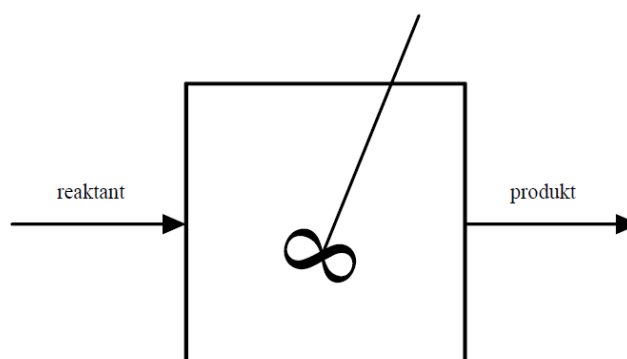
De tre hovedtypene av kjemiske reaktorer er satsreaktor (batch reactor), blandetankreaktor (CSTR) og rørreaktor (PFR). CSTR og PFR er reaktorer som har kontinuerlig strøm med reaktanter inn på reaktoren og produkter ut av reaktoren. I kontinuerlige reaktorer foregår det reaksjoner med relativ kort reaksjonstid og store stoffmengder, da stoffene bare er i reaksjonsbetingelser i den korte tiden gjennom katalysatorsjiktet. Både CSTR og PFR kan også brukes til kinetiske reaksjoner, likevektsreaksjoner eller heterogene katalyseraksjoner. Noen kjemiske reaksjoner krever en katalysator til stede, noen går av seg selv og noen foregår ved høy temperatur eller ved høyt trykk. Etter disse betingelsene kan reaksjonsmetodene deles inn i termisk, katalytisk, elektrokjemisk, biokjemisk og kjemiske prosesser som går av seg selv. Den katalytiske reaksjonsprosessen som gjennomføres i syntesen av DME kan gjennomføres i flere typer reaktorer, som f.eks. PFR. PFR er best egnet til reaksjoner i gassfase, mens CSTR passer best til reaksjoner i væskefase. [27 s. 611-630]

PFR er en kontinuerlig reaktor som består av et sylindrisk rør der reaktanter (og evt. produkter) strømmer gjennom med perfekt blanding og reagerer underveis, som vist i Figur 3.2. PFR brukes ofte til gassreaksjoner der reaktoren er fylt med katalysatormateriale, til cracking-prosesser eller til prosesser med homogene væskefaser (blandbare væsker). PFR har høyest omsetningsgrad per reaktorvolum av alle typer kontinuerlige reaktorer og er enkle å vedlikeholde. Det trengs mindre volum til en PFR for å oppnå en gitt omsetningsgrad ved en gitt strømningshastighet. [27 s. 611-630]



Figur 3.2: Prinsippkisse av rørreaktor (PFR).

CSTR er en kontinuerlig reaktor som er perfekt (og øyeblikkelig) blandet. Det betyr at innløpsstrømmen til blandetankreaktoren har samme forhold som materialet i reaktoren og utløpsstrømmen, som vist i Figur 3.3. Den kjemiske omdannelsen i CSTR avhenger av hastighetsuttrykket til reaksjonene og reaksjonstypen. Hvis reaktorvolumet, et konstant hastighetsuttrykk og reaksjonstøkiometri er kjent, kan CSTR konverteringen av hver komponent i innløpsstrømmen til blandetankreaktoren bli beregnet. Enkle hastighetsreaksjoner kan utføres i en CSTR. Likevektsreaksjoner i Aspen Hysys bør utføres i konverteringsreaktorer, Gibbs-reaktorer eller likevektsreaktorer. [44]



Figur 3.3: Prinsippkisse av blandetankreaktor (CSTR).

En konverteringsreaktor er en enkel type reaktor i Aspen Hysys der konverteringsandelen spesifiseres. Denne reaktoren trenger et reaksjonssett som inneholder konverteringsreaksjoner og fungerer på støkiometrisk basis. Reaksjonen i reaksjonssettet stopper når en begrenset reaktant er oppbrukt eller den angitte konverteringen er oppnådd. Fordelen med denne reaktoren er at den kan integrere flere forskjellige reaksjoner i samme enhet. Dette kan være nyttig ved ekstremt komplekse reaktordesign. [44]

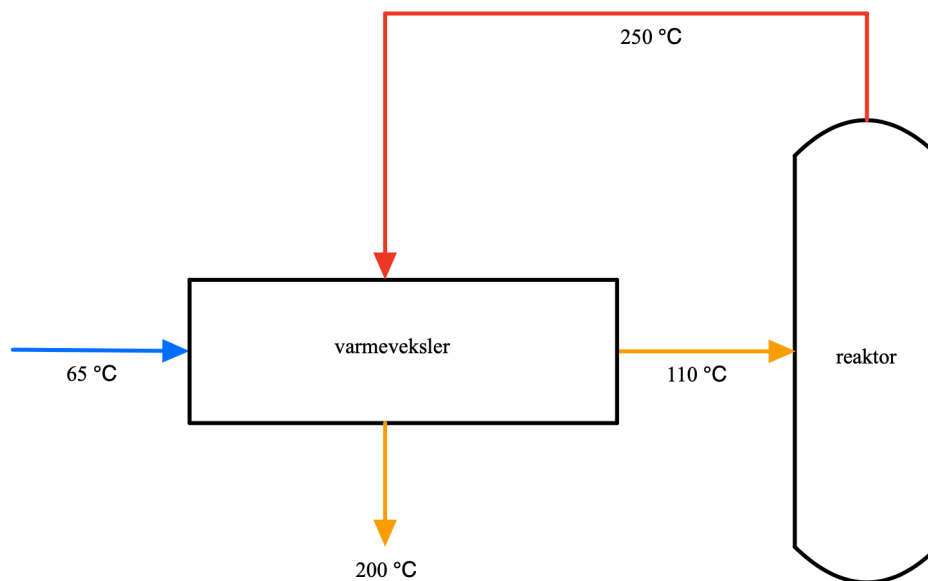
En Gibbs-reaktor bestemmer utløpssammensetningen ved å oppnå fase- og kjemisk likevekt. Denne reaktoren trenger ikke å bruke reaksjonsstøkiometri for å gjøre dette, men beregner produktblandingen ved å minimere Gibbs frie energi i systemet. I Gibbs-reaktoren er det ingen antakelse om at hverken rene stoffer eller reaksjonsblandingen er ideelle. En fordel med denne reaktoren er at den kan virke som en separator, en likevektsreaktor eller en reaktor som minimerer Gibbs frie energi uten å spesifisere noen reaksjoner. Gibbs-reaktoren kan være nyttig for å simulere likevektstilstanden eller når det mangler reaksjonsdata. Den er også lettere å konvergere enn en likevektsreaktor når simuleringen er følsom for inngangsparametrene. [44]

En likevektsreaktor simulerer likevektsreaksjoner, slik at utløpet fra reaktoren er i balanse både kjemisk og fysisk. Dette gjør innløpsparametrene og variablene veldig følsomme. I likhet med Gibbs-reaktoren antas det at hverken rene stoffer eller reaksjonsblandingen er ideelle. Aspen Hysys kan finne den kjemiske aktiviteten til hver komponent i blandingen basert på fugasiteter for rene stoffer og blandinger. Det er derfor ikke nødvendig at blandingen eller komponentene er ideelle i utløpet. Likevektsreaktoren kan ha et ubegrenset antall likevektsreaksjoner i reaksjonssettet, som løses samtidig eller etter hverandre. [44]



### 3.3 Energoptimalisering og pinch-teknologi

Aspen Hysys har en innebygd optimaliseringsfunksjon som kan finne de beste driftsforholdene for å oppnå et mål. Denne funksjonen kan bruke mange prosessvariabler for å utføre optimaliseringsstudien. Optimalisering er en måte å forbedre en eksisterende prosess, enhet eller system på. Optimalisering er ofte en kreativ og dynamisk aktivitet som krever å generere og utforske ulike alternativer. Målet med optimalisering er å finne den beste løsningen på en effektiv måte og vise at løsningen er optimal for prosessen. Pinch-teknologi er en metode for optimalisering av energi. Prosesser som har mange enheter for masse- eller varmeutveksling kalles varmevekslernetverk. I disse nettverkene finnes det et punkt der drivkraften for masse- eller energiutveksling er minst. Dette kalles et pinch-punkt og er viktig for energioptimalisering. For å redusere behovet for kjøling og oppvarming, skal det ikke overføres energi over pinch-punktet. Et godt design av disse nettverkene innebærer å identifisere pinch-punktet og bruke informasjonen fra det til å designe hele nettverket. Når pinch-punktet er definert riktig, er prosessen energioptimalisert. Å utnytte varmen fra en eksotermisk prosess til å øke temperaturen til en lavere strøm innenfor en prosess er et eksempel på energioptimalisering, som vist i Figur 3.4. [12 s. 509-520]



Figur 3.4: Eksempel på intern varmeintegrering fra en eksotermisk prosess.

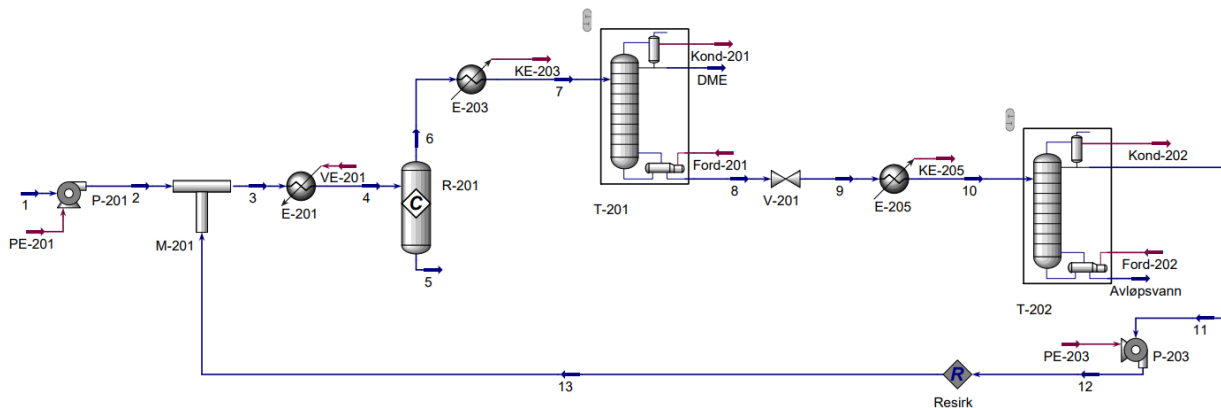
## 4 Aspen Hysys simuleringer

I dette kapitlet blir prosessen for DME, de termodynamiske modellene, de eksperimentelle oppsettene og de analytiske metodene som er brukt i dette bachelorarbeidet presentert. Det ble brukt tre ulike eksperimentelle oppsett for simuleringene; "base case", parameteroptimalisering og energioptimalisering. "Base case" er et utgangspunkt basert på litteratur [12 s. 1278-1283]. De eksperimentelle simuleringene tar for seg endringer av prosessparamererne som trykk, temperatur og reaktordesign for syntesen av DME, samt endring av termodynamiske modeller som PRSV, UNIQUAC, NRTL og Wilson. Deretter ble prosessen med høyest økning av utløpsstrøm av DME fra disse simuleringene valgt, og en energioptimalisering av denne prosessen ble utført. En kostnadsestimering av "base case", parameteroptimalisering og energioptimalisering av prosessen ble også estimert. Alle simuleringene ble gjort med Aspen Hysys V12 ved USN. For dette arbeidet blir "base case" og den parameteroptimaliserte prosessen referert som prosess 200, mens den energioptimaliserte prosessen blir omtalt som prosess 300.

### 4.1 Prosessbeskrivelse av "base case"

Aspen Hysys simuleringene begynte med å bygge opp prosessen av "base case" som gitt i prosessbeskrivelsen og faglitteratur [12 s. 1278-1283]. I denne prosessen ble metanol, DME og vann valgt som komponenter, og PRSV ble valgt som den termodynamiske modellen. Reaksjonssettet som beskriver omdannelsen av metanol til DME og vann ble også definert, sammen med konverteringsgraden i konverteringsreaktoren. Alle energistrømmer for de relevante enhetene ble definert, bortsett fra reaktoren. Siden reaksjonen var eksoterm, ville reaktoren frigi varmeenergi i ulik grad avhengig av reaktordesignet.

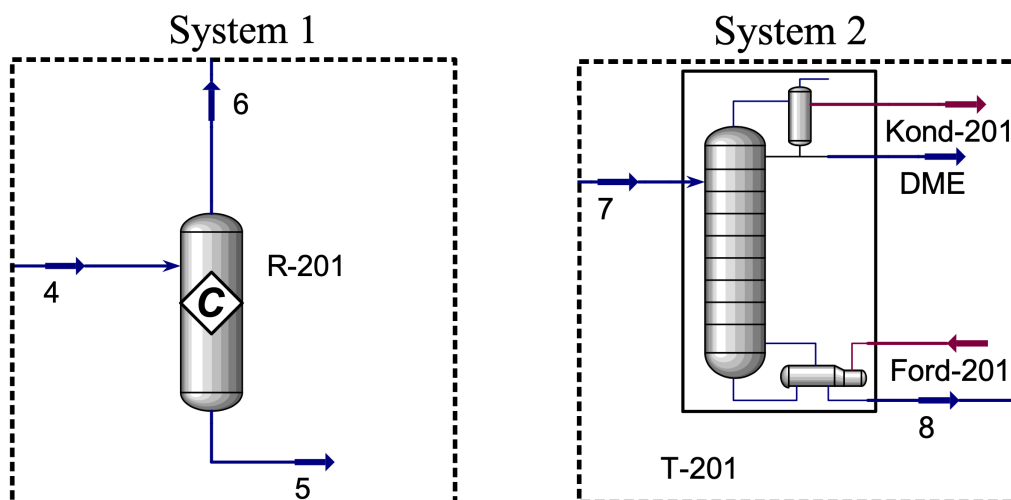
Ren metanol (strøm 1) ble blandet med resirkulert reaktantstrøm (strøm 13) og fordampet i varmeren (E-201) før den ble ført til en konverteringsreaktor (R-201). Reaktoren opererte mellom 200 °C og 370 °C, og konverteringsgraden av metanol i konverteringsreaktoren var 80 %. Utløpet fra reaktoren (strøm 6) ble kjølt ned av kjøleren (E-203) før det ble sendt til den første destillasjonskolonnen (T-201). I den første kolonnen (T-201) ble DME-produktet separert ut i toppen av kolonnen, mens metanol og vann ble separert ut i bunnen av kolonnen. Strømmen (strøm DME) ut av toppen av kolonnen ble definert til å være 99,5 % molfraksjon DME. Blandingen med metanol ble deretter kjølt ned i kjøleren (E-205), før den så gikk inn i den andre destillasjonskolonnen (T-202), der vannet ble separert ut i bunnen (avløpsvann) og ureagert metanol i toppen. Ureagert metanol ble resirkulert tilbake og kombinert med ren metanol i mikseren (M-201), mens avløpsvannet ble sendt til avløpsvannbehandling for å fjerne spor av organiske stoffer. Figur 4.1 viser et prosessflytskjema (PFD) for "base case" av DME-syntesen i Aspen Hysys.



Figur 4.1: Prosessflytskjema (PFD) for "base case" av syntesen av dimetyleter (DME) i Aspen Hysys.

## 4.2 Endring av driftsparametere og reaktordesign

Effekten av å endre tre ulike reaktordesign og driftsparametere som trykk og temperatur for DME-syntese ble undersøkt. Driftsparametere ble variert opp og ned i forhold til "base case" i en "case study". En "case study" er en funksjon i Aspen Hysys som itererer prosessen mellom et gitt parameterområde i en bestemt strøm. For å bruke denne funksjonen måtte to strømmer velges, en strøm for endring (uavhengig strøm) og en strøm for observasjon (avhengig strøm). Prosessen ble så delt opp i to mindre systemer med systemgrenser. System 1 bestod av endring av strøm 4 og observasjon av strøm 6, dvs. inn- og utløp av reaktoren (R-201). System 2 bestod av endring av strøm 7 og observasjon av strøm DME, dvs. inn- og utløp av destillasjonskolonnen (T-201). Resten av DME-syntesen følger "base case" parametere. Figur 4.2 viser PFD for System 1 og System 2.



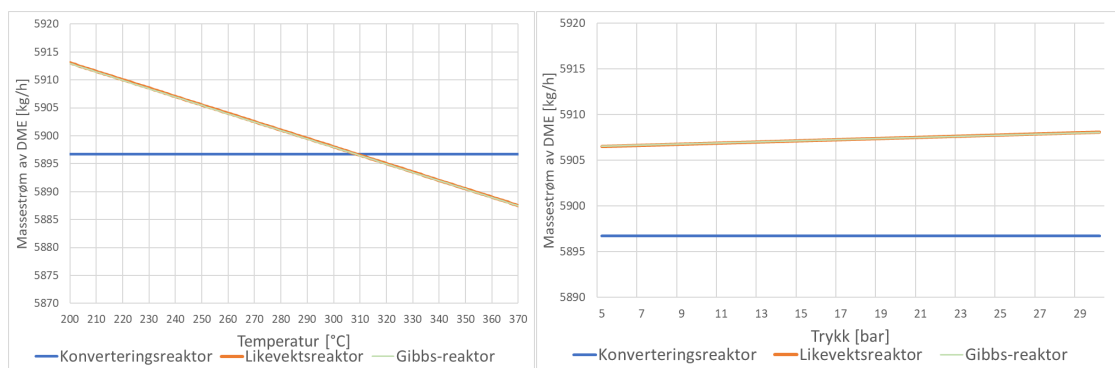
Figur 4.2: Prosessflytskjema (PFD) for System 1 for reaktoren (R-201) og System 2 for destillasjonskolonnen (T-201).

Det ble utført "case study" for temperatur og trykk i System 1 og System 2, for tre ulike reaktordesign. Disse reaktorene var konverteringsreaktor, Gibbs-reaktor og likevektsreaktor. Stegstorrelsen for iterasjonene i "case study" for temperatur var 1 °C og 0,5 bar for trykk. Intervallene som ble benyttet for trykk og temperatur i "case study" samt parametere for "base case" er oppgitt i Tabell 4.1.

Tabell 4.1: "Base case" og "case study" for trykk og temperatur.

Forklaring	Strøm 4	Strøm 7
"Base case" temperatur [°C]	250	89
"Base case" trykk [bar]	14,7	10,4
"Case study" temperatur [°C]	200-370	50-150
"Case study" trykk [bar]	5-30	5-30

Figur 4.3 og Figur 4.4 viser trender for reaktorene (R-201) og destillasjonskolonnen (T-201). Trykk og temperatur i innløpsstrømmen (strøm 4) til hver reaktor (R-201) ble variert fra "base case" for å se effekten på DME-massestrømmen (strøm 6). Deretter ble trykk og temperatur i innløpsstrømmen (strøm 7) til destillasjonskolonnen (T-201) variert fra "base case" for å se effekten på DME-massestrømmen (strøm DME). Resultatene fra "case study" av prosessen ble vist med trendlinjer som ble analysert og brukt til å finne optimale parametere for trykk og temperatur. Når reaktordesignet ble endret, ble det antatt at destillasjonskolonnen (T-202) fungerte optimalt. Denne hadde en tendens til å ikke konvergere i noen intervaller. For å unngå dette ble komponentgjenopprettingen av metanol ("component recovery") satt til 95 % i den andre destillasjonskolonnen (T-202) og ønsket mengde metanol ble fjernet.



Figur 4.3: Trender for temperatur, trykk og massestrøm for System 1 for reaktor (R-201).



Figur 4.4: Trender for temperatur, trykk og massestrøm for System 2 for kolonne (T-201).

De generelle observasjonene for System 1 rundt reaktoren (R-201) viser at konverteringsreaktoren har samme DME-massestrøm i utløpet uavhengig av trykk og temperatur i innløpet. For Gibbs-reaktoren og likevektsreaktoren øker derimot DME-massestrømmen i utløpet med høyere trykk og lavere temperatur i innløpet. Grafene for likevekt- og Gibbs-reaktor ligger over hverandre i Figur 4.3. De generelle observasjonene for System 2 rundt destillasjonskolonnen (T-201) viser at konverteringsreaktoren, Gibbs-reaktoren og likevektsreaktoren har ingen endring av DME-massestrøm i utløpet uavhengig av trykk og temperatur i innløpet.

Etter å ha sammenlignet de generelle trendene ble de mest optimale og realistiske driftsparametrene for System 1 valgt i innløpsstrømmen (strøm 4) til hver av de tre reaktorene (R-201) hver for seg. Reaksjonskinetikken for syntesen ble bestemt til å være i temperaturintervallet 200-250 °C, som vist i Figur 2.6. Deretter ble de mest optimale og realistiske driftsparametrene for System 2 valgt i innløpsstrømmen (strøm 7) til destillasjonskolonnen (T-201). Valgte temperaturer og trykk for de tre ulike reaktordesignene er vist i Tabell 4.2. Disse valgene ble gjort uavhengig av hverandre siden de er forskjellige systemer med forskjellige reaktorer. Den nye temperaturen før destillasjonskolonnen (T-201) måtte ikke være så høy at innløpsstrømmen til destillasjonskolonnen (T-201) var mettet damp (VF=1). Det totale energiforbruket ble også overvåket nøye ved endringer av driftsparametre for å unngå store energiendringer. Ut fra disse endelige endringene av driftsparametre ble det sett hvilken reaktor (R-201) som ga høyest økning av DME-massestrøm (strøm DME) ut av destillasjonskolonnen (T-201). Denne simulerte prosessen ble brukt videre til å evaluere de termodynamiske beregningsmodellene.

Tabell 4.2: Valgte driftsparametere med ulike reaktordesign.

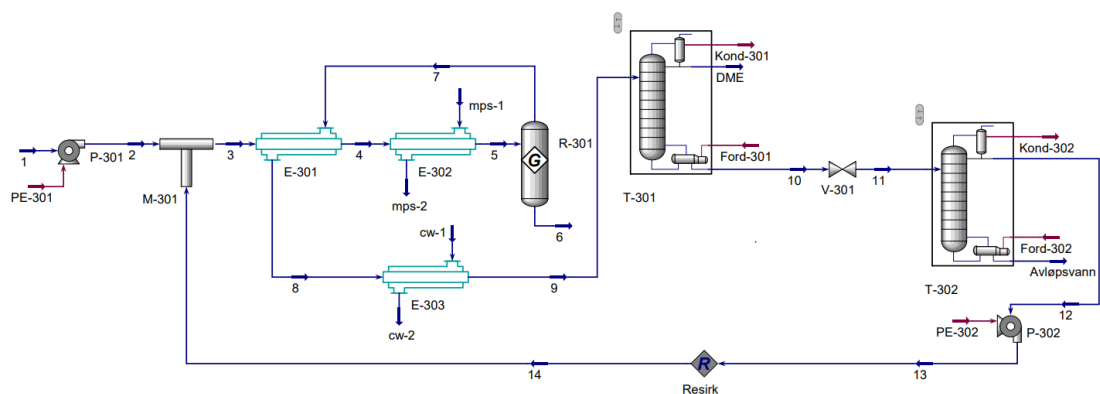
Reaktordesign	Gibbs-reaktor		Likevektsreaktor		Konverteringsreaktor	
Strøm	4	7	4	7	4	7
Valgt temperatur [°C]	200	135	200	135	200	130
Valgt trykk [bar]	17	10	17	10	10	10

### 4.3 Endring av termodynamiske modeller

“Base case” simuleringene brukte PRSV som termodynamisk modell. Den reaktoren og de driftsparameterne som ga høyest økning av massestrøm av DME (strøm DME) fra destillasjonskolonnen (T-201) ble valgt for videre simuleringer med andre termodynamiske modeller. De andre termodynamiske modellene som ble brukt i tillegg til PRSV var UNIQUAC, NRTL og Wilson. Når termodynamisk modell ble endret, ble alle kravene og forutsetningene til modellene fulgt. Samtidig ble det forsøkt å gjøre minst mulig endringer i prosessen slik at alle de termodynamiske modellene simulerte lignende prosesser. Energibehovet og massestrømmen av DME ble observert og notert i resultatet. Den termodynamiske modellen som ga høyest økning av massestrøm av DME (strøm DME) ble så valgt for energioptimalisering og kostnadsestimering. Denne prosessen blir omtalt som parameteroptimalisert.

### 4.4 Energioptimalisering

For energioptimalisering ble den termodynamiske modellen som ga høyest økning av DME-massestrøm (strøm DME) brukt. En varmeveksler (E-302 i Figur 4.5) erstattet varmeren (E-201 i Figur 4.1). En varmeveksler (E-301 i Figur 4.5) ble også satt inn før varmeveksleren (E-302 i Figur 4.5), slik at varmeveksleren trengte mindre energi for å øke temperaturen til reaktoren. Siden reaksjonen i reaktoren (R-301) var eksoterm, ble det generert og frigjort varme. Det betyr at utløpsstrømmen fra reaktoren var varmere enn innløpsstrømmen til reaktoren. Denne varmestrømmen ble brukt på skallsiden av varmeveksleren (E-301 i Figur 4.5) slik at varmeren (E-302 i Figur 4.5) fikk redusert energibehov. Kjøler (E-203 i Figur 4.1) ble byttet ut med en varmeveksler (E-303 i Figur 4.5) som brukte kjølevann for å senke temperaturen på prosessvannet til destillasjonskolonnen (T-201) på samme måte som kjøler (E-203 i Figur 4.1). Den andre kjøleren (E-205 i Figur 4.1) ble tatt bort helt uten erstatning, fordi temperaturenendringen hadde blitt lavere ved å endre driftsparametrene tidligere. Disse endringene for energioptimalisering og driftsparametre er vist i Figur 4.5. Denne prosessen blir omtalt som energioptimalisert.



Figur 4.5: Prosessflytskjema (PFD) med energioptimalisering av syntesen av dimetyleter (DME) i Aspen Hysys.

## 4.5 Kostnadsestimering

Kostnadsestimering ble gjort både for CAPEX (investeringskostnad) og OPEX (driftskostnad). Det ble estimert en kostnad for "base case" av DME-syntesen. Det ble også estimert en kostnad for DME-syntesen som inkluderte alle endringene i driftsparametre, reaktordesign og termodynamisk modell (parameteroptimalisert prosess). Det tredje estimatet var basert på de samme endringene, men med energioptimalisering (energioptimaliserisert prosess). Formlene for kostnadsestimering av CAPEX og OPEX er vist i Vedlegg A.

Kostnadsestimering av reaktoren ble gjort i to deler, én for trykktanken og én for innmaten i reaktoren. Kostnadsestimering av destillasjonskolonnene ble gjort på samme måte som reaktoren. For innmaten i reaktoren ble det brukt "Gamma Alumina Catalyst", mens for innmaten i kolonnene ble det brukt "SS Valve" med ulikt antall plater. For alle kostnadsberegningene ble priser fra 2001 brukt om ikke annet er angitt, basert på tabeller og figurer fra kilde [12]. Alle disse ble justert til januar 2023 ved bruk av indeksregulering. Prisen for katalysator per masse ble hentet fra kilde. [46]

Når nye varmevekslere erstattet eller supplerte varmere og kjølere i "base case", måtte arealet og typen vekslere bestemmes før kostnadsestimering av disse. Typen varmevekslere var "shell & tube" med "fixed head" som gikk i motstrøm. Kostnadsestimering for varmer og kjølere ble gjort på samme måte som varmevekslerne.

Beregning av investeringskostnader ble utført med Formel 4.1, der  $CAPEX$ ,  $FCI$  og  $C_{TM}$  er investeringskostnad.  $\Sigma C_{BM}$  er summen av innkjøpskostnad og installasjon for alle apparater og utstyr i DME-syntesen.

$$CAPEX = FCI = C_{TM} = 1,18 * \Sigma C_{BM} \quad 4.1$$

OPEX består av tre kategorier: direkte produksjonskostnader (DMC), faste produksjonskostnader (FMC) og generelle produksjonskostnader (GE). For å beregne strømkostnad ble det brukt en gjennomsnittspris for globale virksomheter i 2022, som var 0,192 [USD/kWh] [47]. For å beregne kjølevannskostnad ble det brukt en pris for kjølevann i Tabell 8.3 i kilde [12], som var 0,0157 [USD/m<sup>3</sup>] i år 2001. For å beregne dampkostnad fra kilde [12] ble det brukt en pris for medium damptrykk 0,00961 [USD/m<sup>3</sup>] og høy damptrykk 0,00954 [USD/m<sup>3</sup>]. For å beregne råmateriale ble det brukt en pris for metanol på 1,49 USD/ US gallon [26].

Beregning av driftskostnader ( $OPEX$  og  $COM_d$ ) uten avskrivninger ble utført med Formel 4.2, der  $FCI$  er investeringskostnad,  $C_{OL}$  er driftsarbeid,  $C_{UT}$  er kostnad for "utilities",  $C_{WT}$  er kostnad for avløpsvannshåndtering og  $C_{RM}$  er kostnad for råmateriale.

$$OPEX = COM_d = 0,180 * FCI + 2,73 * C_{OL} + 1,23(C_{UT} + C_{WT} + C_{RM}) \quad 4.2$$

For beregning av inntekt ( $R$ ) av DME ble en gjennomsnittspris ( $P$ ) i 2018 for DME benyttet, som var 2,26 [USD/US gallon] [26]. Dette ble multiplisert med volumstrøm DME ( $\dot{V}$ ) og omgjort til kostnad per år som vist i Formel 4.3.

$$R \left[ \frac{USD}{\text{år}} \right] = P \left[ \frac{USD}{US \text{ gallon}} \right] * \dot{V} \left[ \frac{m^3}{h} \right] * \frac{1[US \text{ gallon}]}{0,00378541178[m^3]} * 8\,760 \left[ \frac{h}{\text{år}} \right] \quad 4.3$$

CEPCI (Chemical Engineering Plant Cost Index) indeksen for 2001 var 394,3, mens den var 801,4 for januar 2023 [48]. Forholdet mellom disse blir multiplisert med den opprinnelige prisen for indeksregulering, som vist i Formel 4.4. Reguleringen ble benyttet på alle kostnader fra 2001, men ikke pris på DME og metanol da disse er variable med tiden.

$$P_{2023} = P_{2001} * \left( \frac{CEPCI_{2023}}{CEPCI_{2001}} \right) \quad 4.4$$

## 4.6 Lønnsomhetsanalyse

For å beregne netto nåverdi (NV) ble det beregnet en kumulativ diskontert kontantstrøm gjennom bygge- og driftsfasen til DME-syntesen. NV er et mål på hvor lønnsomt et prosjekt er, basert på nåverdien av alle inntekter og kostnader knyttet til prosjektet. Kumulativ diskontert kontantstrøm er summen av alle fremtidige kontantstrømmer (inntekter–utgifter) som er generert og akkumulert, samt justert tilbake til år null. Den kumulative diskonterte kontantstrømmen ble plottet mot antall år i disse fasene for å lage et NV-diagram. Beregningene for NV er vist i Vedlegg C. For å finne NV i år 25 ble det brukt målsøk-funksjonen i Excel. Ved å sette kumulativ akkumulert kontantstrøm til null i år 25 fant Excel prisen for DME. For å gjøre prosessen lønnsom ble det valgt en pris for DME som var høyere enn prisen funnet av målsøking. Målsøking er en funksjon i Excel som virker som en “Hva-skjer-hvis-analyse”, der en celle (diskontert kontantstrøm i år 25) blir satt til en verdi (null) ved å endre en annen celle (DME-pris).



## 5 Resultater fra simuleringer

I dette kapittelet ble hovedresultatene fra de teoretiske og eksperimentelle arbeidene fra Aspen Hysys for dette bachelorarbeidet presentert.

### 5.1 Endring av driftsparametere og reaktordesign

Tabell 5.1 viser simuleringverdier for Gibbs-reaktor, Tabell 5.2 viser simuleringverdier for likevektsreaktor, og Tabell 5.3 viser simuleringverdier for konverteringsreaktor. Alle simuleringresultatene bruker samme termodynamiske modell (PRSV). De valgte temperaturene og trykkene var valgt på grunnlag av "case study" og disse var basert på "base case" parametere som vist i Tabell 4.1. Utløpsstrøm DME etter endring av strøm 4 var lik utløpsstrøm av DME før endring av strøm 7, pga. utløpsstrømmen av reaktoren var lik innløpsstrømmen til kolonnen (T-201). Med energiforbruk menes det totale energiforbruket i hele syntesen av DME, både før og etter endringer. Tabell 5.4 viser en oversikt over prosentendringen av energi og utløpsstrømmen av DME for tre reaktordesign. Endringen er forholdet mellom "base case" og "case study".

Tabell 5.1: Simuleringsresultater med Gibbs-reaktor og PRSV.

<b>System 1</b>	<b>Før endring</b>		<b>Etter endring</b>	
Strøm	4	6	4	6
Temperatur [°C]	250	363,9	200	318,3
Trykk [bar]	14,7	14,7	17	17
Energiforbruk [kW]	17 652	17 652	16 491	16 491
Massestrøm DME [kg/h]	0	5 905	0	5 913
Endring massestrøm [%]	-	-	-	0,14
Endring energi [%]	-	-	-7	-0,7
<b>System 2</b>	<b>Før endring</b>		<b>Etter endring</b>	
Strøm	7	DME	7	DME
Temperatur [°C]	89	45,78	135	45,78
Trykk [bar]	10,4	10,3	10	10,3
Energiforbruk [kW]	16 491	16 491	14 098	14 098
Massestrøm DME [kg/h]	5 913	5 913	5 913	5 914
Endring massestrøm [%]	-	-	0	0,02
Endring energi [%]	-	-	-15	-15

Tabell 5.2: Simuleringsresultater med likevektsreaktor og PRSV.

<b>System 1</b>	<b>Før endring</b>		<b>Etter endring</b>	
Strøm	4	6	4	6
Temperatur [°C]	250	363,9	200	318,2
Trykk [bar]	14,7	14,7	17	17
Energiforbruk [kW]	17 336	17 336	16 490	16 490
Massestrøm DME [kg/h]	0	5 906	0	5 914
Endring massestrøm [%]	-	-	-	0,15
Endring energi [%]	-	-	-5	-5
<b>System 2</b>	<b>Før endring</b>		<b>Etter endring</b>	
Strøm	7	DME	7	DME
Temperatur [°C]	89	45,79	135	45,78
Trykk [bar]	10,4	10,3	10	10,3
Energiforbruk [kW]	16 490	16 490	14 098	14 098
Massestrøm DME [kg/h]	5 914	5 914	5 914	5 915
Endring massestrøm [%]	-	-	0	0,02
Endring energi [%]	-	-	-15	-15

Tabell 5.3: Simuleringsresultater med konverteringsreaktor og PRSV.

<b>System 1</b>	<b>Før endring</b>		<b>Etter endring</b>	
Strøm	4	6	4	6
Temperatur [°C]	250	363,9	200	325
Trykk [bar]	14,7	14,7	17	17
Energiforbruk [kW]	17 463	17 463	16 955	16 955
Massestrøm DME [kg/h]	0	5 898	0	5 898
Endring massestrøm [%]	-	-	-	0
Endring energi [%]	-	-	-3	-3
<b>System 2</b>	<b>Før endring</b>		<b>Etter endring</b>	
Strøm	7	DME	7	DME
Temperatur [°C]	89	45,78	135	46,37
Trykk [bar]	10,4	10,3	10	10,3
Energiforbruk [kW]	16 955	16 955	14 845	14 845
Massestrøm DME [kg/h]	5 898	5 898	5 898	5 898
Endring massestrøm [%]	-	-	0	0
Endring energi [%]	-	-	-12	-12

Tabell 5.4: Total prosentending av energi og utløpsstrøm av DME for tre reaktordesign med PRSV mellom "base case" og "case study".

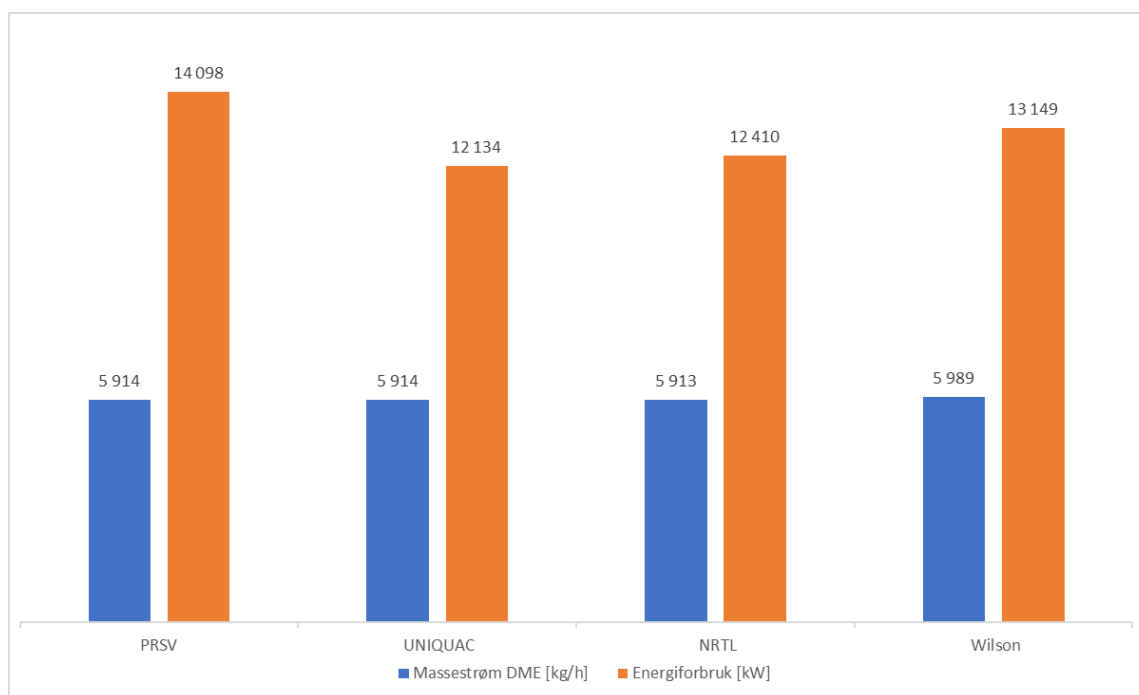
<b>Reaktordesign</b>	<b>Gibbs-reaktor</b>	<b>Likevektsreaktor</b>	<b>Konverteringsreaktor</b>
Endring av DME [%]	0,15	0,15	0,00
Endring av energiforbruk [%]	-20	-19	-15

## 5.2 Endring av termodynamiske modeller

Det reaktordesignet som resulterte i høyest økning av utløpsstrøm av DME (strøm DME) ved bruk av PRSV var Gibbs-reaktor, i likhet med likevektsreaktor. Basert på Gibbs-reaktoren ble det deretter simulert med forskjellige termodynamiske modeller for sammenligning. Tabell 5.5 viser en oversikt over endringen av energi og utløpsstrømmen av DME for de fire termodynamiske modellene med Gibbs-reaktor. Utløpsstrøm av DME (strøm DME) og energibehovet i hele syntesen av DME er vist i Figur 5.1 med de ulike termodynamiske modellene benyttet i Aspen Hysys. Figuren og tabellen viser at UNIQUAC modellen var den beste prosessen for energioptimalisering.

Tabell 5.5: Energiforbruk, utløpsstrøm av DME, samt endring av energi og utløpsstrøm av DME for fire termodynamiske modeller i Aspen Hysys med Gibbs-reaktor.

Termodynamisk modell	PRSV	UNIQUAC	NRTL	Wilson
Energiforbruk [kW]	14 098	12 134	12 410	13 149
Utløpsstrøm DME [kg/h]	5 914	5 914	5 913	5 989
Endring av DME [%]	0,15	0,20	0,17	0,17
Endring av energiforbruk [%]	-20	-25	-23	-20



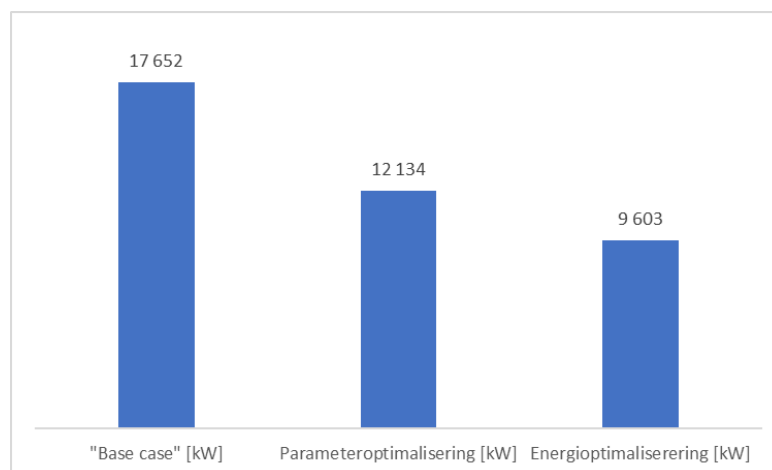
Figur 5.1: Sammenligning mellom fire termodynamiske modeller i Aspen Hysys.

### 5.3 Energioptimalisering

Fra Tabell 5.5 ble det observert at den termodynamiske modellen som resulterte i høyest økning av utløpsstrøm av DME (strøm DME) med Gibbs-reaktor var UNIQUAC. Av den grunn er det UNIQUAC-modellen som var valgt å energioptimalisere, og resultatene endte med to varmevekslere. Den ene varmeveksleren ble satt inn for å redusere energiforbruket i varmeren via intern varmeintegrering. Den andre varmeveksleren benyttet ekstern varmeoverføring i form av kjølevann som en erstatning for to kjølere. Tabell 5.6 viser en oversikt og sammenligning mellom "base case", parameter- og energioptimalisert. Sammenligningen er for energiforbruk og endring av energi fra "base case". Denne sammenligningen mellom energiforbruket er også illustrert i Figur 5.2.

Tabell 5.6: Sammenligning av energiforbruk og endring av energi fra "base case".

Beskrivelse	"Base case"	Parameter- optimalisering	Energi- optimalisering
Termodynamisk modell	PRSV	UNIQUAC	UNIQUAC
Strømforbruk [kW]	8 792	5 929	5 846
Kjølevannsforbruk [kW]	3 942	2 311	1 047
Dampforbruk [kW]	4 918	3 894	2 710
Totalt energiforbruk [kW]	17 652	12 134	9 603
Endring av energi fra "base case" [%]	-	-31	-46



Figur 5.2: Sammenligning av energiforbruk mellom "base case", parameter- og energioptimalisering.

## 5.4 Kostnadsestimering

Det ble beregnet en kostnadsestimering av parameter- og energioptimalisering av prosessen med Gibbs-reaktor og UNIQUAC, samt "base case". Blå verdier i tabeller er verdier fra kilde [12], Aspen Hysys eller andre kilder, mens sorte verdier er beregnet med formler. Detaljerte estimater og formler for CAPEX og OPEX er vist i Vedlegg B. Alle tall er avrundet i amerikanske dollar, men indeksregulert til 2023. Tabell 5.7 viser kostnadsestimatet av utgift for "utilities", dvs. elektrisk strøm, kjølevann, og damp. Kostnadsestimering av råmateriale ( $C_{RM}$ ) og avløpsvannrensing ( $C_{WT}$ ) er vist i Tabell 5.8.

Tabell 5.7: Kostnadsestimering av utgift for strøm, kjølevann og damp ("utilities").

Beskrivelse	"Base case"	Parameter- optimalisering	Etter energi- optimalisering
Pris strøm [USD/kWh]	0,192	0,192	0,192
Strømførbbruk [kW]	8 792	5 929	5 851
Kostnad [USD/år]	14 800 000	10 000 000	9 800 000
Pris damp [USD/kg]	0,00961	0,00954	0,00954
Massestrøm [kg/h]	10 193	7 677	5 255
Kostnad [USD/år]	1 700 000	1 300 000	900 000
Pris kjølevann [USD/m <sup>3</sup> ]	0,0157	0,0157	0,0157
Volumstrøm [m <sup>3</sup> /h]	228,89	153,13	58,97
Kostnad [USD/år]	64 000	42 800	16 500

Tabell 5.8: Kostnadsestimering av utgift for metanol ( $C_{RM}$ ) og avløpsvannrensing ( $C_{WT}$ ).

Beskrivelse	"Base case"	Parameter- optimalisering	Etter energi- optimalisering
Pris metanol [USD/US gallon]	1,49	1,49	1,49
Volumstrøm [m <sup>3</sup> /h]	10,63	10,63	10,63
Kostnad [USD/år]	36 700 000	36 700 000	36 700 000
Pris avløpsvannrensing [USD/ m <sup>3</sup> ]	0,041	0,041	0,041
Volumstrøm [m <sup>3</sup> /h]	2,777	2,800	2,764
Kostnad [USD/år]	2 027	2 044	2 018

Tabell 5.9 viser total investeringskapital (CAPEX) for den energioptimaliserte syntesen av DME. Tabell 5.10 viser kostnadsestimering av de totale produksjonskostnadene (OPEX). Tabell 5.11 viser kostnadsestimering av inntekten ved salg av DME.

Tabell 5.9: Total kostnadsestimering av investeringskapital (CAPEX) av alle apparater.

Beskrivelse	"Base case"	Parameter-optimalisering	Etter energi-optimalisering
$C_{BM}$ pumper [USD]	379 000	379 000	379 000
$C_{BM}$ reaktor m/katalysator [USD]	280 000	303 000	303 000
$C_{BM}$ kolonner m/plater [USD]	337 000	337 000	337 000
$C_{BM}$ varmer [USD]	331 000	245 000	276 000
$C_{BM}$ kjøler [USD]	307 000	262 000	0
$C_{BM}$ varmeveksler [USD]	0	0	268 000
Total $C_{BM}$ [USD]	1 600 000	1 500 000	1 600 000
Total $C_{TM}$ / CAPEX [USD]	1 900 000	1 800 000	1 800 000

Tabell 5.10: Kostnadsestimering av totale produksjonskostnader (OPEX).

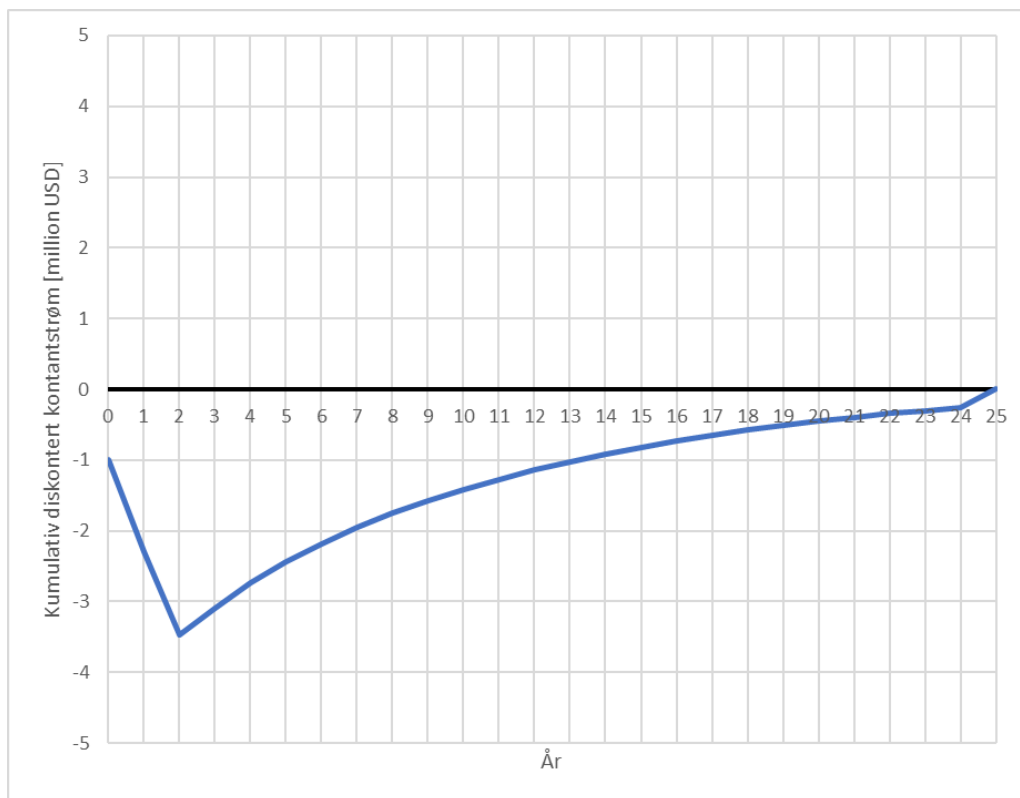
Beskrivelse	"Base case"	Parameter-optimalisering	Etter energi-optimalisering
Produksjonskostnad uten avskrivning ( $COM_d$ ) [USD]	65 800 000	59 300 000	58 600 000
Direkte produksjonskostnader (DMC) [USD]	55 400 000	49 900 000	49 300 000
Faste produksjonskostnader (FMC) [USD]	131 000	122 000	125 000
Generelle produksjonskostnader (GE) [USD]	10 600 000	9 500 000	9 400 000
Prosentandel DMC av $COM_d$	83,8 %	83,8 %	83,8 %
Prosentandel FMC av $COM_d$	0,2 %	0,2 %	0,2 %
Prosentandel GE av $COM_d$	16,0 %	16,0 %	16,0 %

Tabell 5.11: Kostnadsestimering av inntekt for dimetyleter (DME).

Beskrivelse	"Base case"	Parameter-optimalisering	Etter energi-optimalisering
Pris DME [USD/US gallon]	2,26	2,26	2,26
Volumstrøm [ $m^3/h$ ]	10,340	10,389	10,390
Inntekt [USD/år]	54 100 000	54 300 000	54 300 000

## 5.5 Lønnsomhetsanalyse

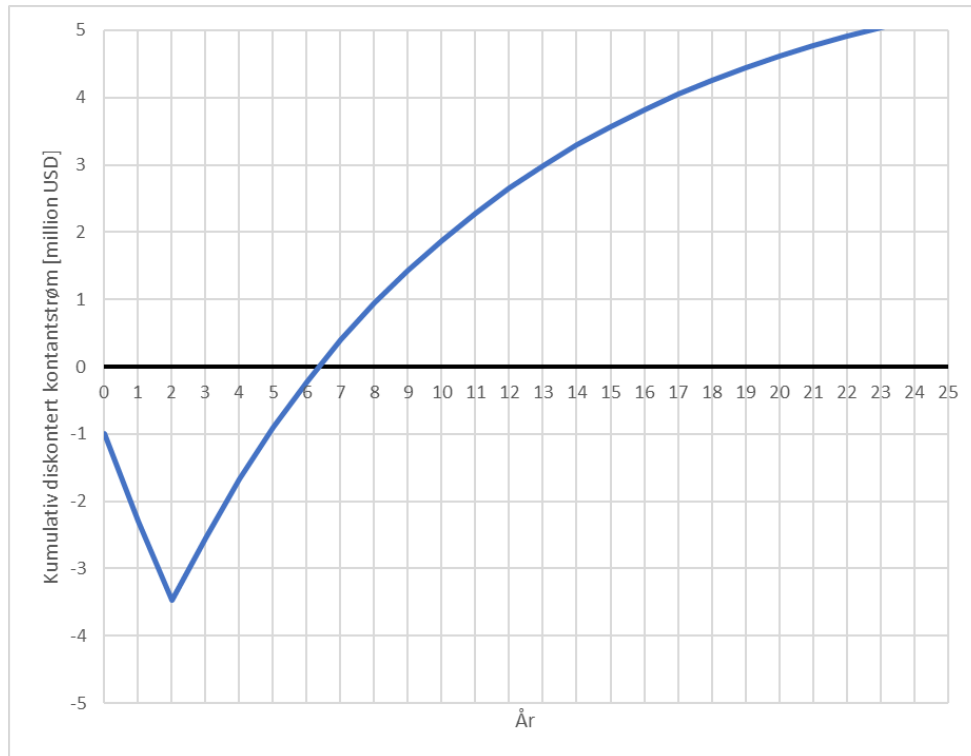
Et diagram for netto nåverdi (NV) lik null i år 25 er illustrert i Figur 5.3. Detaljerte estimater, formler og Excel-ark for NV estimater er vist i vedlegg C. Dette NV-diagrammet ga en DME-pris på 2,46 USD/US gallon (6,50 NOK/dm<sup>3</sup>), som blir omtalt som nullpunktet.



Figur 5.3: Netto nåverdi (NV) lik null for den energioptimaliserte syntesen av dimetyleter (DME).



Ved å sette salgspriisen for DME litt høyere enn for nullpunktet vil punktet for NV flytte seg nærmere starten på driftsfasen, som illustrert i Figur 5.4. Figuren kan benyttes til avlesning av tilbakebetalingstid (DPBP). Ved å sette prisen for DME til 2,50 [USD/US gallon] (6,60 NOK/dm<sup>3</sup>) ble DPBP ca. 6,5 år. Detaljerte estimater, formler og Excel-ark for NV estimater er vist i vedlegg C. Tabell 5.12 viser en enkel oversikt over pris for DME oppgitt i kilde [26], ved nullpunkt, samt laveste og høyeste for prosjektet.

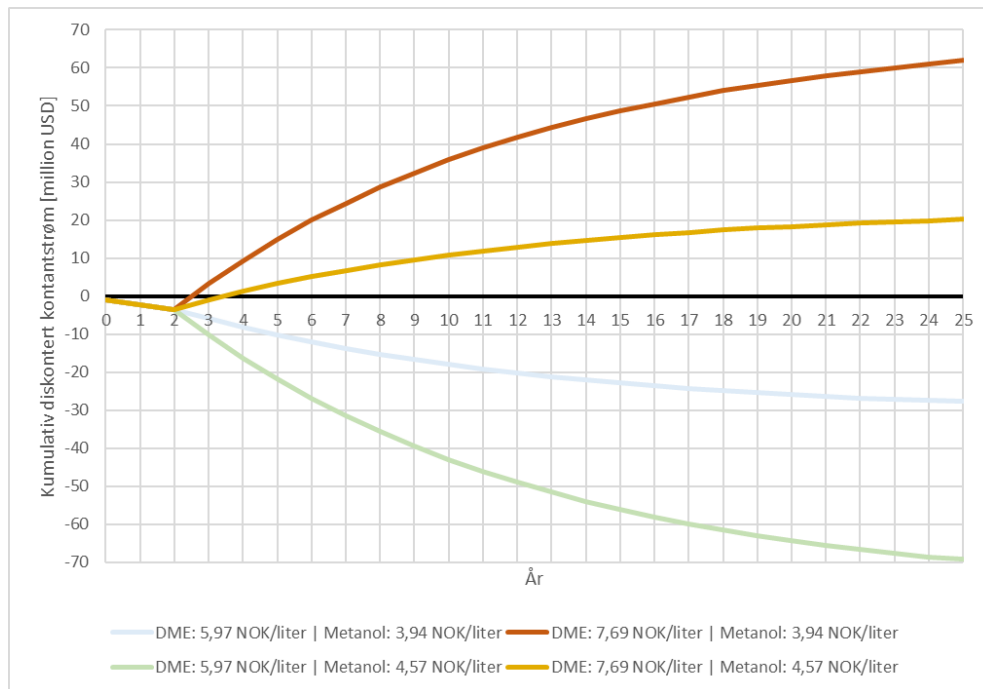


Figur 5.4: Nåverdi (NV) diagram for avlesning av tilbakebetalingstid (DPBP).

Tabell 5.12: Oversikt over pris fra kilde [26], nullpunkt-, laveste- og høyeste pris for den energioptimaliserte syntesen av dimetyleter (DME).

Beskrivelse	DME kilde	DME null	DME lav	DME høy
Pris [USD/US gallon]	2,26	2,46	2,50	2,91
Pris [NOK/dm <sup>3</sup> ]	5,97	6,50	6,60	7,69

Figur 5.5 viser et NV-diagram der lave og høye priser for DME og metanol er plottet mot hverandre. Tabell 5.13 viser en utvidelse av sammenligningen mellom diesel B7 og DME som drivstoff i person- og lastebil, som tidligere illustrert i det andre kapittelet. Men også med den høyeste DME-prisen for prosjektet.



Figur 5.5: Netto nåverdi (NV) for lave og høye priser for metanol og dimetyleter (DME) for den energioptimaliserte syntesen av DME.

Tabell 5.13: Sammenligning mellom diesel B7 og dimetyleter (DME) i person- og lastebil.

Beskrivelse	Diesel B7	DME kilde	DME høy
Forbruk personbil [ $\text{dm}^3/\text{km}$ ]	0,060	0,116	0,116
Forbruk lastebil [ $\text{dm}^3/\text{km}$ ]	0,35	0,68	0,68
Pris [USD/US gallon]	5,68	2,26	2,91
Pris [NOK/ $\text{dm}^3$ ]	15,00	5,97	7,69
Pris per kilometer med personbil [NOK/km]	0,90	0,62	0,80
Pris per kilometer med lastebil [NOK/km]	5,25	3,63	4,68

## 6 Diskusjon

I dette kapitlet ble observasjoner, beregninger og hovedresultatene fra de teoretiske og eksperimentelle arbeidene fra Aspen Hysys som ble presentert i det femte kapitlet diskutert. De eksperimentelle observasjonene bidro til økt kompetanse og innsikt i syntetisk produksjon av DME fra biomasse og syntesegass. Simuleringsresultatene kan avvike fra en virkelig prosess på grunn av feil valgte termodynamiske modeller, utilstrekkelige modellparametere eller problemer med konstante industridata. Derfor kan også noen av simuleringene gi avvik fra hverandre og forskjellige resultater selv om de er like, pga. naturlig endringer i en virkelig prosess.

### 6.1 Endring av driftsparametere og reaktordesign

Det ble observert hvordan utløpsstrømmen av DME påvirkes av endringer av trykk, temperatur og reaktordesign. Det ble observert at økt temperatur eller trykk i strøm 4 førte til økt energibehov i varmeren (E-201), mens redusert temperatur eller trykk i strøm 4 resulterte i redusert energibehov. Tilsvarende ble det observert at høyere temperatur eller økt trykk i strøm 7 førte til redusert energibehov i kjøleren (E-203). Dette skyldes mindre effekt i varmer og kjøler, dvs. mindre tilført energi.

Det oppsto noen problemer med den andre destillasjonskolonnen (T-202) ved bytte av reaktordesign, fordi komposisjonen ut av de tre reaktorene (R-201) var forskjellige. Dette ble løst ved å sette komponentgjenoppretting ("component recovery") av metanol til 95 % i den andre destillasjonskolonnen (T-202), samt fjernet funksjonen som definerte ønsket fraksjon av metanol.

Den kjemiske reaksjonen er eksoterm (avgir varme) og vil skje spontant. Dette medfører en negativ verdi av Gibbs frie energi og en negativ entalpiendring. Reaksjonen vil dermed medføre at temperaturen i systemet øker, noe som er negativt for syntesen. Høyere temperatur vil medføre at reaksjonen går mot reaktantens side. For å få likevektsreaksjonen til å gå tilbake mot produktets side ble trykket økt. Dette gjorde at energibehovet til reaktoren ble redusert siden temperaturen ble høyere og den genererte varmeenergien ble benyttet internt. Disse endringene gjorde også at utbytte av DME ble større.

Driftsparametere for System 1 og System 2 ble valgt ut fra trendlinjene i Figur 4.3 og Figur 4.4, som viser hvordan temperatur og trykk i reaktoren påvirker massestrømmen av DME. For System 1 var temperatur den viktigste faktoren for å øke DME-massestrømmen, mens trykk hadde liten betydning. Det var ingen forskjell mellom Gibbs-reaktor og likevektsreaktor i DME-massestrøm, men Gibbs-reaktoren hadde lavere energiforbruk og høyere varmefrigjøring enn likevektsreaktoren. Derfor ble Gibbs-reaktor valgt som det beste reaktordesignet for System 1. Konverteringsreaktor hadde lavest DME-massestrøm og var ikke avhengig av temperatur eller trykk.

For System 2 var det ingen effekt av temperatur eller trykk på DME-massestrømmen, uansett hvilket reaktordesign som ble brukt, som vist i Figur 4.4. Dette skyldes at System 2 har en

destillasjonskolonne. Etter System 2 er det en kolonne som fjerner vann og øker konsentrasjonen av metanol i resirkulasjonsstrømmen. Dermed blir reaksjonen ikke begrenset av likevekt eller konvertering, men av tilgjengelig metanol. Valg av reaktor med hensyn på System 2 var derfor ikke basert på kostnad eller utbytte, men på energireduksjon. I en virkelig prosess kunne det også vært forskjellig kostnad for forskjellige reaktordesign.

Driftsparameterne for System 1 og System 2 ble også sammenlignet med teoretisk reaksjonskinetikk for syntesen, som viste at temperaturen i reaktoren burde ligge innenfor intervallet 200-250 °C for å oppnå høyest mulig likevektskonstant (se Figur 2.6). Disse driftsparameterne og endringene som ble valgt for "case study" var små optimale endringer fra "base case", som økte DME-utbytte med 0,5 %. Disse bestemmelsene og endringene kalles derfor for de mest optimale og realistiske driftsparameterne. Disse endringene ble gjort basert på skjønn og trender, og skulle ikke kreve store endringer i prosessanlegget eller kostnadsestimeringen sammenlignet med "base case". Det ville vært urealistisk å velge driftsparametere der trendlinjene flatet ut og DME-massestrømmen var maksimal, da dette ville øke energiforbruket og kostnadene betydelig. En mer avansert metode for å finne de mest optimale driftsparameterne ville vært å bruke en AI-funksjon i Aspen Hysys, men dette var ikke tilgjengelig for denne oppgaven.

For å studere hvordan trykkøkning påvirker prosessen, ble en "case study" av den første pumpe (P-201A/B) utført som stikkprøve. Når trykket i prosessen økte, økte også effekten, energikostnaden og CAPEX til pumpe. Den totale forskjellen i kontantstrøm var 0,02 %, som vist i Tabell 6.1. Dette kan anses som neglisjerbart.

Tabell 6.1: Oversikt over to valgte trykk for observasjon av pumpe 201A/B.

<b>Pumpe 201A/B</b>	<b>Lavt trykk</b>	<b>Høyt trykk</b>
Trykk [bar]	10	17
Energi [kW]	3,544	6,300
DME ut av prosess [m <sup>3</sup> /h]	10,37	10,37
Energikostnad [USD/år]	6 000	11 000
DME inntekt [USD/år]	54 200 000	54 200 000
CAPEX pumpe [USD]	62 000	68 000
Total kontantstrøm [USD/år]	54 132 000	54 121 000
Endring kontantstrøm [%]	-0,02	0,02

## 6.2 Endring av termodynamiske modeller

I dette kapitlet ble det undersøkt hvordan ulike termodynamiske beregningsmodeller påvirket simuleringene av prosessen. Det ble sørget for at kravene til modellene ble overholdt. De termodynamiske modellene var basert på forskjellige teorier, forutsetninger og parametere. Det var derfor naturlig at de ga noe forskjellige resultater. Valget av modell for videre simuleringer ble basert på hvilken som ga høyest økning av DME-strøm. Derfor vil ikke modellen nødvendigvis være realistisk for en virkelig prosess. UNIQUAC med Gibbs-reaktor ble valgt for videre simuleringer. UNIQUAC modellen er godt egnet for gasser med høyt trykk og kjent kokepunkt. UNIQUAC modellen ble også anbefalt av faglitteratur [12] (s. 1283). I en virkelig prosess er det essensielt å velge den modellen som passer best for den gitte prosessen. Dette kunne gjøres ved å sammenligne virkelige industridata og simuleringer. For dette bachelorarbeidet var ikke dette viktig, da prosessdata ikke var tilgjengelig for å kunne utføre validering av simuleringsmodellen.

## 6.3 Energoptimalisering

Dette kapitlet handlet om å optimalisere energibehovet for den mest DME-produktive prosessen. Energibehovet inkluderte elektrisk strøm, damp og kjølevann. Målet var å øke DME-produksjonen sammenlignet med "base case" uten å øke energibehovet, og med minimale justeringer i driftsparameterne. Strøm-, kjølevann- og dampforbruket ble alle redusert. Det ble oppnådd ved å bytte ut en kjøler (E-203) med en varmeveksler (E-303) som brukte kjølevann, og ved å legge til en varmeveksler (E-301) med intern varmeintegrasjon som minsket dampbehovet i varmeren. Den interne varmevekslingen utnyttet varmen fra den eksoterme reaksjonen i reaktoren til å forvarme reaktorinngangen. Den andre kjøleren (E-205) ble fjernet fordi den ikke hadde noen betydning for prosessen etter endringene i driftsparameterne. Å fjerne den andre kjøleren (E-205) senket det elektriske energibehovet i den andre kolonnen (T-202 og T-302), fordi temperaturen ble høyere. Den interne varmevekslingen reduserte behovet for både ekstern damp og ekstern kjøling. Ved å øke temperaturen etter den første kjøleren (E-203), ble det spart energi på kjøling. Det førte også til at massestrømmen til den andre kolonnen (T-202 og T-302) ble mindre, slik at temperaturen ble lavere og behovet for kjøling før denne kolonnen ble borte. Begge destillasjonskolonnene bidro mest til strømsparing. I den første kolonnen (T-201 og T-301) skyldtes dette lavere trykk og høyere temperatur. Det reduserte den elektriske energien som gikk til fordamperen, men økte litt av det som gikk til kondenseren. Likevel var nettoeffekten i den første kolonnen (T-201 og T-301) lavere. I den andre kolonnen (T-202 og T-302) skyldtes dette at energien i kondenseren og fordamperen var mindre, fordi prosessen var mer optimalisert med høyere utbytte av DME som ga mindre massestrøm av ureagerte komponenter. For energistrømmene til fordampere og kondensere i destillasjonskolonnene ble det benyttet elektrisk strøm, men disse kunne også blitt erstattet med damp og kjølevann. Dette ble ikke sett på i dette bachelorarbeidet.

Dersom prosessen hadde vært integrert med et gassifiseringsanlegg, kunne dette ha åpnet for flere alternativer for intern varmeutveksling. Men om prosessen hadde stått alene, ville dampen måttet produseres separat og lokalt. I stedet for å bruke varmere og kjølere, som i prinsippet er varmevekslere, ble det i denne delen av oppgaven benyttet varmevekslere for å vise de interne- og eksterne strømmene. Energiforbruket i den energioptimaliserte prosessen var omtrent 46 % lavere enn i "base case". Dette skyldtes hovedsakelig den interne varmeutvekslingen. Det måtte da videre vurderes om det lønner seg å investere i en varmeveksler (E-301) og en mindre varmer (E-302) fremfor en større varmer (E-201) med mer damp.

## 6.4 Kostnadsestimering

I dette kapitlet ble kostnadene til OPEX og CAPEX estimert. Ved å redusere energibehovet ble OPEX for energien redusert. Da trykk og temperatur ikke ble endret mye i forhold til "base case", ble heller ikke CAPEX for utstyret endret mye. Dette er gunstig om det finnes eksisterende prosesser som da ikke trenger å bytte eksisterende utstyr, men kun endre på driftsparametere. Negative verdier i tabellene nedenfor betyr reduksjon fra "base case", mens positive verdier betyr økning.

For "utilities" ble kostnadene for elektrisk energi, kjølevann og damp redusert fra "base case", som vist i Tabell 6.2, med henholdsvis 34 %, 74 % og 49 %. Dette skyldes lavere temperatur og trykk, som førte til mindre behov for energi i pumper, fordampere og kondensere sammenlagt. Det er også pga. den interne varmeintegrasjonen som utnyttet varmen fra reaktoren til å varme opp innløpsstrømmen. Dette førte til mindre behov for damp, som også var av lavere trykk og dermed lavere pris. Det skyldes også lavere temperatur før den første destillasjonskolonnen (T-301), som førte til mindre behov for kjøling og fjerning av den andre kjøleren (E-205). Dette resulterte i mindre behov for kjølevann. Total besparelse for "utilities" ble da 35 % i forhold til "base case".

Tabell 6.2: Oversikt over besparelse i prosent og kostnad per år ved endringer fra "base case" til den energioptimaliserte prosessen for "utilities" ( $C_{UT}$ ).

Beskrivelse	Endring [USD/år]	Endring [%]
Elektrisk energi	-5 000 000	-34
Kjølevann	-48 000	-74
Damp	-850 000	-49
Totalt	-5 900 000	-35

Kostnad for råmateriale ( $C_{RM}$ ), metanol, var konstant for alle prosessene da fødestrømmen var konstant. Ingen parameterendring kunne endre denne metanolstrømmen. Kostnad for avløpsrensing ( $C_{WT}$ ) kunne også antas å være konstant da endringen i pris var ubetydelig. Denne prisen økte med 9 USD/år. Disse endringene er vist i Tabell 6.3. Disse to endringene var derfor neglisjerbare da de har lav påvirkning for OPEX.

Tabell 6.3: Oversikt over besparelse i prosent og kostnad per år ved endringer fra "base case" til den energioptimaliserte prosessen for råmateriale ( $C_{RM}$ ) og avløpsvannsrensing ( $C_{WT}$ ).

Beskrivelse	Endring [USD/år]	Endring [%]
Metanol	0	0
Avløpsvannsrensing	9	-0,5

Tabell 6.4 viser en oversikt over endringer av CAPEX fra "base case" til energioptimalisering. I utgangspunktet er varmer og kjøler det samme som varmeveksler. Det er derfor oppgitt som 100 % da en kjøler (E-203) var erstattet med en varmeveksler (E-303), samtidig som en ekstra varmeveksler (E-301) ble lagt til før varmeren (E-201 og E-302). Kostnaden for varmeren ble da redusert med 17 %. Selv med optimalisert prosess, ble den totale besparelsen på 4 % fra "base case". Den andre kjøleren (E-205) ble fjernet fordi den ikke var nødvendig for prosessen pga. lavere temperatur før den første destillasjonskolonnen (T-201). Den interne varmevekslingen som ble lagt til før reaktoren, gjorde at varmeren ble billigere. Dette ser ikke lønnsomt ut ved å bare se på kostnad for utstyret, men heller hele bildet med dampkostnader osv. Denne subtile endringen av CAPEX utgjorde større endringer for OPEX.

Tabell 6.4: Oversikt over besparelse i prosent og kostnad per år ved endringer fra "base case" til den energioptimaliserte prosessen for investeringskapital (CAPEX).

Beskrivelse	Endring [USD/år]	Endring [%]
$C_{BM}$ pumper [USD]	0	0
$C_{BM}$ reaktor m/katalysator [USD]	23 000	8
$C_{BM}$ kolonner m/plater [USD]	800	0,2
$C_{BM}$ varmer [USD]	-55 000	-17
$C_{BM}$ kjøler [USD]	-307 000	-100
$C_{BM}$ varmeveksler [USD]	268 000	$\infty$
Total $C_{TM}$ / CAPEX [USD]	-84 000	-4

Den største delen av OPEX er de direkte produksjonskostnadene (DMC). Faste produksjonskostnader (FMC) og generelle produksjonskostnader (GE) utgjør ca. 16 % av OPEX. FMC inkluderer skatter, forsikringer og anleggskostnader. GE inkluderer administrative kostnader, distribusjons- og salgskostnader, samt forskning og utvikling. DMC inkluderer råmateriale, "utilities", avløpsvannshåndtering, driftsarbeid, tilsyn og kontorarbeid, vedlikehold og reparasjoner, driftsmateriell, laboratoriekostnader, patenter og royalties. Fra "base case" til energioptimaliseringen ble OPEX og DMC redusert med 11 %, som vist i Tabell 6.5. Dette er pga. lavere kostnader for "utilities". Kostnaden for metanol var konstant og størst i OPEX.

Tabell 6.5: Oversikt over besparelse i prosent og kostnad per år ved endringer fra "base case" til den energioptimaliserte prosessen for totale produksjonskostnader (OPEX).

Beskrivelse	Endring [USD/år]	Endring [%]
Produksjonskostnad uten avskrivning (COM <sub>d</sub> / OPEX)	-7 200 000	-11
Direkte produksjonskostnader (DMC)	-6 100 000	-11
Faste produksjonskostnader (FMC)	-6 000	-4
Generelle produksjonskostnader (GE)	-1 200 000	-11

Ved å endre trykk og temperatur etter reaktoren og før den første destillasjonskolonnen (T-201) ble det mer DME ut av prosessen. Dette ga større inntekt ved salg av DME. Dette utgjorde 0,5 % mer inntekt, som vist i Tabell 6.6, men også mye besparelse i CAPEX og OPEX. Fra Tabell 5.10 og Tabell 5.11 kan det ses at inntektene er lavere enn driftskostnadene hvert driftsår. Dette vil derfor ikke være lønnsomt da prosjektet hadde gått med ca. 4,3 mill. NOK i underskudd hvert år. Det bør derfor ses på andre alternativer i en lønnsomhetsanalyse for å snu prosjektet til å bli lønnsomt over hele anleggets levetid.

Tabell 6.6: Kostnadsestimering av inntekt for dimetyleter (DME).

Beskrivelse	Endring [USD/år]	Endring [%]
Inntekt ved salg av DME	260 000	0,5



## 6.5 Lønnsomhetsanalyse

Da inntektene var lavere enn driftskostnadene ble det undersøkt om DME kunne selges dyrere og likevel konkurrere med diesel i en enkel lønnsomhetsanalyse. Det ble brukt et målsøk i Excel for å finne den prisen DME måtte ha for å gå i null i år 25. Denne ble 6,50 NOK/liter (2,46 USD/US gallon). Ved å sette prisen til 6,60 NOK/liter (2,50 USD/US gallon) ble inntektene høyere enn driftskostnadene, og tilbakebetalingstiden (DPBP) ca. 6,5 år som vist i Figur 5.4. Det kan være bedre å koble prosessen med DME til et eksisterende gassifiseringsanlegg. Da er det ikke behov for å kjøpe metanol, men bare selge eller bruke DME. Dette har ikke blitt studert i dette bachelorarbeidet, men det kan gi høyere lønnsomhet totalt sett. Da må kostnad for syntesegass over til metanol vurderes. Den laveste prisen for DME (5,97 NOK/liter) og den høyeste prisen for metanol (4,57 NOK/liter) kan gi en NV på ca. 20 mill. USD. Den høyeste prisen for DME (7,69 NOK/liter) og den laveste prisen for metanol (3,97 NOK/liter) kan gi en NV på ca. 62 mill. USD. Den høyeste prisen for DME er omtrent lik dieselpriisen når man tar hensyn til forholdstallet på 1,74 sammenlignet med en dieselpriis på 15 NOK/liter. Prisene for metanol, DME og diesel er uten moms og fortjenestepåslag fra bensinstasjoner.

Prisen for DME, metanol og diesel vil variere med markedet. I beregningene i dette bachelorarbeidet var prisene faste i 25 år, noe som ikke var realistisk. Men bare de siste 2-3 årene har markedet for energi og drivstoff endret seg mye. Dette skyldes COVID-19 og krigen i Ukraina. Slike situasjoner vil også kunne påvirke dette prosjektet. Men om markedet blir stabilt og politisk engasjert, kan det antas at prisen for DME vil bli enda mer konkurransedyktig med diesel. Prisen for diesel vil trolig stige i fremtiden, pga. mindre produksjon, mer etterspørsel og strengere politikk. Prisen for DME må være ca. halvparten av prisen for diesel, pga. forholdstallet mellom dem på 1,74.

DME som syntetisk drivstoff vil være avhengig av politikk og teknologi. Litiumbatterier er mest brukt i personbiler, men tungtransportsektoren er mer åpen. Her er DME, ammoniakk og hydrogen attraktive. Den som får mest støtte og satsing kan vinne denne sektoren, eller de kan dele den. Kommunene er et konkurransefortrinn for DME sammenlignet med ammoniakk og hydrogen. I dag blir matavfall fra kommuner gjort om til biogass som brukes i bl.a. busser. DME kan være et ekstra drivstoff for kommunene. Kommunene kan redusere matavfall og få ekstra drivstoff til sine tjenestebiler. Da kan kommunene ha sin egen næringskilde og infrastruktur med matavfall, biogass og DME. Flere kommuner har gassifiseringsanlegg i drift, slik at det kan være mulig å investere i DME-syntesen som en utvidelse av eksisterende anlegg. DME har også andre fordeler som lavere utslipp enn ammoniakk, men høyere enn hydrogen. DME kan lagres ved moderat temperatur og trykk, men hydrogen og ammoniakk krever høyt trykk eller lav temperatur. Ammoniakk kan være giftig ved lekkasje eller forbrenning, mens hydrogen er svært eksplosivt. Disse parameterne støtter DME i kampen mot hydrogen og ammoniakk, selv om DME har fått minst oppmerksomhet blant dem.

## 7 Konklusjon og forslag til videre arbeid

Dette kapitlet inkluderer hovedkonklusjonene som ble trukket knyttet til dette bachelorarbeidet, samt forslag til videre forskningsarbeid rundt feltet biomasse til transportdrivstoff.

### 7.1 Konklusjon

Denne bacheloroppgaven kombinerte eksperimentelle resultater og beregninger for å beskrive produksjonen av grønn DME fra indirekte konvertering av syntesegass fra biomasse. Formålet med prosjektet var å få kunnskap om alternative synteseruter og prosessdesign for DME-produksjon, både teoretisk og praktisk ved hjelp av simuleringer med Aspen Hysys. Hovedmålet med dette forskningsarbeidet var å evaluere prosessdesign, prosess- og energioptimalisering, samt kostnadsestimering av DME-syntesen. Den tekniske problemstillingen var å finne den prosessen med mest DME-utbytte og lavest energibehov ved minimale justeringer av driftsparametere. Denne problemstillingen ble besvart gjennom syv delmål som ble presentert i innledningen.

I denne oppgaven har det blitt simulert og optimalisert en prosess for produksjon av grønn DME fra metanol ved å bruke ulike driftsparametere, reaktordesign og termodynamiske modeller. Det ble funnet at den beste prosessen var den som brukte en Gibbs-reaktor med UNIQUAC-modellen og intern varmeintegrasjon. Denne prosessen ga en økning i DME-strøm (0,5 %) og en reduksjon i energibehov (-46 %), OPEX (-11 %) og CAPEX (-4 %) sammenlignet med "base case". Før lønnsomhetsanalysen hadde prosjektet CAPEX på omtrent 1,8 mill. USD, OPEX på omtrent 58,6 mill. USD og inntekt på omtrent 54,3 mill. USD. Kostnadsestimeringen viste at prosjektet ikke var lønnsomt med de gitte prisene for metanol og DME, men at prisen for DME måtte være minst 6,50 NOK/liter for å få positiv NV i år 25. Ved å sette prisen til 6,60 NOK/liter vil tilbakebetalingstiden bli ca. 6,5 år. Basert på disse funnene ble det konkludert med at produksjon av grønn DME fra syntesegass er teknisk og økonomisk gjennomførbart.

Det er også konkludert med at DME er et attraktivt drivstoff for tungtransportsektoren og kommunene, men at videre forskning på å optimalisere prosessendringer og evaluere miljøpåvirkningen av DME-syntesen er nødvendig. Prisene benyttet for DME i rapporten er konkurransedyktig med diesel når man tar hensyn til forholdstallet mellom dem på 1,74, noe som gjør DME til et miljøvennlig alternativ til fossile drivstoff. Dermed har denne bacheloroppgaven bidratt til å øke kunnskapen om alternative synteseruter og prosessdesign for DME-produksjon, samt vurdert deres tekniske og økonomiske potensial.

## 7.2 Forslag til videre arbeid

Dette bachelorarbeidet har bidratt til feltet biomasse til transportbiodrivstoff og kan fremskyve implementeringen av biodrivstoff i transportsektoren. Rapporten inneholder metoder og modeller som kan forbedre den indirekte konverteringen av syntesegass fra biomasse, slik at en mer økonomisk og effektiv utnyttelse av biomasse kan oppnås. Selv om målene med denne forskningen er oppfylt, har flere forskningsspørsmål dukket opp i løpet av denne studien. Mer informasjon er nødvendig for å lage en fullstendig modell som kan generaliseres til å dekke et bredere spekter av syntesen av DME eller hele gassifiseringsanlegget. Følgende arbeider er foreslått for videre forskning og utvikling som kan bidra ytterligere til de utfordringene med biomasse til transportbiodrivstoff:

- Undersøke LCA av hele syntesen av DME og/eller hele gassifiseringsanlegget.
- Undersøke/simulere blanding av forskjellige råstoffer for å utnytte vanskeligere typer avfall.
- Undersøke/simulere hele gassifiseringsanlegget med biogass og syntesen av DME.

# Referanser

- [1] FN-Sambandet, "FNs bærekraftsmål," Norge Jan. 19, 2023. <https://www.fn.no/om-fn/fns-baerekraftsmaal> (accessed Mar. 29, 2023).
- [2] Walter. R. Stahel, *Sirkulær økonomi En håndbok*. Norge: SINTEF, 2018.
- [3] H. Baumann and Anne-Marie Tillman, *The Hitch Hiker's guide to LCA*. Lund, Norge: Studentlitteratur, 2004.
- [4] Energi og Klima, "Utslipp: Sektorer," Sep. 23, 2022. <https://energiogklima.no/klimavakten/utslipp-sektorer/> (accessed Mar. 29, 2023).
- [5] Robert Ehrlich, Harold A. Geller, and John R. Cressman, *Renewable energy A first course*. Taylor & Francis Ltd, 2022.
- [6] Energy Efficiency & Renewable Energy, "Alternative Fuels Data Center: Dimethyl Ether," *AFDC (Alternative Fuels Data Center)*. [https://afdc.energy.gov/fuels/emerging\\_dme.html](https://afdc.energy.gov/fuels/emerging_dme.html) (accessed Feb. 09, 2023).
- [7] N. Gundersen, "dimetyleter," *Store norske leksikon*. Jan. 21, 2023. Accessed: Feb. 08, 2023. [Online]. Available: <http://snl.no/dimetyleter>
- [8] MESA Specialty Gases & Equipment, "SECTION 1 – IDENTIFICATION." 2018, Nov. 26, 2018. [Online]. Available: <https://mesagas.com/content/pdfs/Dimethyl%20Ether%20SDS.pdf>
- [9] Direktoratet for arbeidstilsynet, "Grunnlag for fastsettelse av administrativ norm for dimetyleter." Direktoratet for arbeidstilsynet, 2007. [Online]. Available: <https://www.arbeidstilsynet.no/contentassets/4c49d6bdd1ee4f7281d4ebc6a0b6da93/dimetyleter---grunnlag-for-fastsettelse-av-administrativ-norm-2007.pdf>
- [10] "The Chemours Company, 'HP DME Areosol Propellant', USA, 2016."
- [11] "CRC Industries Europe bvba, 'Sikkerhetsdatablad: GALVANICE ZINC', Belgia, 2017." Accessed: Feb. 08, 2023. [Online]. Available: [https://res.cloudinary.com/maritim-no/image/upload/v1573740112/p\\_1795-12\\_documentation\\_2](https://res.cloudinary.com/maritim-no/image/upload/v1573740112/p_1795-12_documentation_2)
- [12] Richard Turton, Joseph A. Shaeiwitz, Debangsu Bhattacharyya, and Wallace B. Whitting, *Analysis, synthesis, and design of chemical process*, Fifth. USA: Pearson Education Inc, 2018.
- [13] "The College Board, AP® Chemistry scoring guidelines (question 6 continued), 2008." Accessed: Feb. 08, 2023. [Online]. Available: [https://secure-media.collegeboard.org/apc/ap08\\_chemistry\\_q6.pdf](https://secure-media.collegeboard.org/apc/ap08_chemistry_q6.pdf)
- [14] "Refrigerants P-H Diagram - Refrigeration," *HVAC/R & Solar*, Apr. 21, 2020. <https://hvac-eng.com/refrigerants-p-h-diagram/> (accessed Mar. 23, 2023).

#### Referanser

- [15] K. Hofstad, “energikilder,” *Store norske leksikon*. Store norske leksikon (SNL), Jan. 25, 2023. Accessed: Apr. 26, 2023. [Online]. Available: <https://snl.no/energikilder>
- [16] Shell plc (UK), “Hydrogen,” Jul. 2020. <https://www.shell.co.uk/a-cleaner-energy-future/hydrogen.html> (accessed Mar. 29, 2023).
- [17] K. A. Rosvold and K. Hofstad, “primærenergi,” *Store norske leksikon*. Store norske leksikon (SNL), Jan. 25, 2023. Accessed: Apr. 26, 2023. [Online]. Available: <https://snl.no/prim%C3%A6renergi>
- [18] A. Sarsten and G. O. Fiskaa, “forbrenningsmotor,” *Store norske leksikon*. Store norske leksikon (SNL), Jan. 21, 2023. Accessed: Apr. 26, 2023. [Online]. Available: <https://snl.no/forbrenningsmotor>
- [19] Z. Azizi, M. Rezaeimanesh, T. Tohidian, and M. R. Rahimpour, “Dimethyl ether: A review of technologies and production challenges,” *Chem. Eng. Process. Process Intensif.*, vol. 82, pp. 150–172, Aug. 2014, doi: 10.1016/j.cep.2014.06.007.
- [20] B. Mastemaker, E. Van der Blom, B. Castro, and H. Cornege, “Zero emission vessels from a shipbuilders perspective,” Royal IHC, NL. & Delft University of Technology, NL. & MTI Holland, Glasgow, UK, Jul. 2019. [Online]. Available: [https://www.researchgate.net/publication/334480164\\_Zero\\_emission\\_vessels\\_from\\_a\\_shipbuilders\\_perspective](https://www.researchgate.net/publication/334480164_Zero_emission_vessels_from_a_shipbuilders_perspective)
- [21] S. N. Khadzhiev, N. V. Kolesnichenko, and N. N. Ezhova, “Manufacturing of lower olefins from natural gas through methanol and its derivatives (review),” *Pet. Chem.*, vol. 48, no. 5, pp. 325–334, Sep. 2008, doi: 10.1134/S0965544108050010.
- [22] J. Hagland, “cetantall – petroleumsvirksomhet,” *Store norske leksikon*. papirleksikonet, Store Norske Leksikon (SNL), Jan. 13, 2023. Accessed: Feb. 09, 2023. [Online]. Available: [http://snl.no/cetantall\\_-\\_petroleumsvirksomhet](http://snl.no/cetantall_-_petroleumsvirksomhet)
- [23] J. Tingstad, “Tilpasning av elektronisk innsprøytningsystem, type Common Rail, for en én-sylindret dieseldrevet laboriemotor,” Høgskulen på Vestlandet, Universitet i Bergen, Norge, Masteroppgave i energi, Jan. 2017. [Online]. Available: [https://bora.uib.no/bora-xmlui/bitstream/handle/1956/16088/Masteroppgave\\_JarleTingstad\\_CR\\_Energiteknologi.pdf?sequence=1&isAllowed=y](https://bora.uib.no/bora-xmlui/bitstream/handle/1956/16088/Masteroppgave_JarleTingstad_CR_Energiteknologi.pdf?sequence=1&isAllowed=y)
- [24] Per Salomonsson, “BioDME: About DME,” Sweden. 2013. <http://www.bio-dme.eu/about-dme> (accessed Feb. 09, 2023).
- [25] P. Makoś, E. Słupek, J. Sobczak, D. Zabrocki, J. Hupka, and A. Rogala, “Dimethyl ether (DME) as potential environmental friendly fuel,” *E3S Web Conf.*, vol. 116, p. 00048, 2019, doi: 10.1051/e3sconf/201911600048.
- [26] Josh Seaberg, “Dimethyl Ether for Transportation”, AICHE Design Report, Mar.15, 2018. Accessed: Apr. 21, 2023. [Online]. Available: [https://shareok.org/bitstream/handle/11244/302127/oksd\\_seaberg\\_HT\\_2018.pdf?sequence=1&isAllowed=y](https://shareok.org/bitstream/handle/11244/302127/oksd_seaberg_HT_2018.pdf?sequence=1&isAllowed=y)

- [27] Morten Helbæk and Signe Kjelstrup, *Fysikalsk kjemi*, 2. utgave. Levanger og Trondheim: Fagbokforslaget, 2006.
- [28] A. Ateka, P. Rodriguez-Vega, J. Ereña, A. T. Aguayo, and J. Bilbao, “Kinetic modeling and reactor design of the direct synthesis of dimethyl ether for CO<sub>2</sub> valorization. A review,” *Fuel*, vol. 327, p. 125148, Nov. 2022, doi: 10.1016/j.fuel.2022.125148.
- [29] C. Polsen, P. Narataruksa, P. Hunpinyo, and C. Prapainainar, “Simulation of single-step dimethyl ether synthesis from syngas,” *Energy Rep.*, vol. 6, pp. 516–520, Feb. 2020, doi: 10.1016/j.egy.2019.11.112.
- [30] Y. J. Pagán-Torres, J. Lu, E. Nikolla, A. C. Alba-Rubio, D. Farrusseng, and A. Tuel, “Bifunctional Catalyst - an overview | ScienceDirect Topics. 17.2.6 Bifunctional Catalysis. AND 4.2.4 Bifunctional Catalysis,” May 23, 2017. <https://www.sciencedirect.com/topics/chemistry/bifunctional-catalyst> (accessed Feb. 09, 2023).
- [31] S. Guffanti, C. G. Visconti, and G. Groppi, “Model Analysis of the Role of Kinetics, Adsorption Capacity, and Heat and Mass Transfer Effects in Sorption Enhanced Dimethyl Ether Synthesis,” *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 60, no. 18, pp. 6767–6783, May 2021, doi: 10.1021/acs.iecr.1c00521.
- [32] National Energy Technology Laboratory, “1.3.2. Biomass,” *netl.doe.gov*, Mar. 22, 2023. <https://www.netl.doe.gov/research/coal/energy-systems/gasification/gasifipedia/biomass> (accessed Mar. 22, 2023).
- [33] G. Evans and C. Smith, “Fischer-Tropsch Process - an overview | ScienceDirect Topics,” 2012. Accessed: Feb. 09, 2023. [Online]. Available: <https://www.sciencedirect.com/topics/earth-and-planetary-sciences/fischer-tropsch-process>
- [34] K. Hofstad, “LPG,” *Store norske leksikon*. Sep. 19, 2022. Accessed: Mar. 10, 2023. [Online]. Available: <https://snl.no/LPG>
- [35] “Dimethyl Ether Market - Research Report: Market size, Industry outlook, Market Forecast, Demand Analysis, Market Share, Market Report 2021-2026,” *Dimethyl Ether Market – Prognose(2023–2028)*, Oct. 03, 2023. <https://www.industryarc.com/Report/17677/dimethyl-ether-market.html> (accessed Mar. 10, 2023).
- [36] P. Tian, Y. Wei, M. Ye, and Z. Liu, “Methanol to Olefins (MTO): From Fundamentals to Commercialization,” *ACS Catal.*, vol. 5, no. 3, pp. 1922–1938, Mar. 2015, doi: 10.1021/acscatal.5b00007.
- [37] Giftinformasjonen, 2019, “Formaldehyd - behandlingsanbefaling ved forgiftning,” *Helsebiblioteket*, Oct. 03, 2023. <https://www.helsebiblioteket.no/forgiftninger/gasser-og-kjemikalier/formaldehyd-behandlingsanbefaling-ved-forgiftning> (accessed Mar. 10, 2023).
- [38] P. Kierulf, S. Langård, and E. R. Bernatek, “formaldehyd,” *Store medisinske leksikon*. Feb. 07, 2023. Accessed: Mar. 10, 2023. [Online]. Available: <http://sml.snl.no/formaldehyd>

- [39] Anton Taranenko, “Methyl formate (methyl methanoate),” *archive.ph*, Jan. 19, 2013. <https://archive.ph/aSILz> (accessed Mar. 10, 2023).
- [40] Q. Li, G. Wu, C. Johnston, and P. Zelenay, “Direct Dimethyl Ether Fuel Cell with Much Improved Performance,” *Electrocatalysis*, vol. 5, Jul. 2014, doi: 10.1007/s12678-014-0196-z.
- [41] S. Basri and S. K. Kamarudin, “Chapter 8 - Direct dimethyl ether fuel cells (DDMEFCs),” in *Direct Liquid Fuel Cells*, R. G. Akay and A. B. Yurtcan, Eds., Malaysia: Academic Press, 2021, pp. 177–189. doi: 10.1016/B978-0-12-818624-4.00008-X.
- [42] S. Poto, F. Gallucci, and M. Fernanda Neira d’Angelo, “Direct conversion of CO<sub>2</sub> to dimethyl ether in a fixed bed membrane reactor: Influence of membrane properties and process conditions,” *Fuel*, vol. 302, p. 121080, Oct. 2021, doi: 10.1016/j.fuel.2021.121080.
- [43] J. Clark, J. Kalvenes, and J. Stewart, “How Process Industries Can Catch Up in AI,” *BCG Global*, Feb. 25, 2022. <https://www.bcg.com/publications/2022/how-process-industries-can-catch-up-in-ai> (accessed Apr. 12, 2023).
- [44] “Aspen Hysys Knowledge Center (Manual). V12.”
- [45] P. Hafiza Shukor, D. K. Syahidah Ku Ismail, and C. Hafizah Mohad Jonar, “ERT 214 MATERIAL AND ENERGY BALANCE HYSYS SIMULATION MANUAL - PDF Free Download,” 2016 2015. <https://docplayer.net/40110495-Ert-214-material-and-energy-balance-hysys-simulation-manual.html> (accessed Feb. 09, 2023).
- [46] “AIChE (The Global Home of Chemical Engineers), ‘Production of Cost Analysis of Dimethyl Ether for Transportation’, Rev 5: June 19, 2017. USA.” Accessed: Apr. 12, 2023. [Online]. Available: [https://www.aiche.org/sites/default/files/node/aiche-student-design-competition/production\\_and\\_cost\\_analysis\\_of\\_dimethyl\\_ether\\_for\\_transportation.pdf](https://www.aiche.org/sites/default/files/node/aiche-student-design-competition/production_and_cost_analysis_of_dimethyl_ether_for_transportation.pdf)
- [47] GlobalPetrolPrices, “Kraftprisene i verden,” *GlobalPetrolPrices.com*, Sep. 2022. [https://no.globalpetrolprices.com/electricity\\_prices/](https://no.globalpetrolprices.com/electricity_prices/) (accessed Apr. 12, 2023).
- [48] C. Maxwell, “Cost Indices – Towering Skills,” *Article*, Apr. 15, 2023. <https://towering-skills.com/financial-analysis/cost-indices/> (accessed Apr. 21, 2023).

# Vedlegg

Vedlegg A: CAPEX- og OPEX estimeringer

Vedlegg B: CAPEX- og OPEX resultater

Vedlegg C: Netto nåverdi estimeringer

Vedlegg D: Prosjektbeskrivelse

Vedlegg E: Medforfattererklæring



# Vedlegg A: CAPEX- og OPEX estimeringer

## CAPEX- og OPEX estimeringer

Dette vedlegget omhandler kostnadsestimering for CAPEX og OPEX. CAPEX er investeringskostnader knyttet til et prosjekt, mens OPEX er driftskostnader knyttet til et prosjekt. Dette vedlegget inneholder en oversikt over alle symboler og forklaringer knyttet til kostnadsestimeringen. Vedlegget viser også verdienes opphav i form av tabeller eller figurer. Vedlegget inneholder også alle formlene som ligger bak selve kostnadsestimeringen for CAPEX og OPEX. Estimeringen er gjort i henhold til emnet «Energieffektivisering» ved USN.

Vedlegg

Vedlegget er delt inn i to deler: CAPEX og OPEX. Disse delene viser formler og metode for dimensjonering og kostnadsestimering. Tabell A.1 viser en oversikt over symboler, beskrivelser og opphav av verdier som ble benyttet ved disse beregningene.

Tabell A.1: Oversikt over symboler, beskrivelser og opphav av verdier benyttet i vedlegget.

Symbol	Beskrivelse	Tab./Fig.	Symbol	Beskrivelse
$C_{BM}$	Innkjøpskostnad + installasjon	Tab. A.5	A	Areal
ID-nr.	ID-nr. for materialfaktor	Tab. A.6/A.3	$C_P^0$	Innkjøpskostnad for "billigste" utstyr
$F_q$	Mengdefaktor for plater	Tab. A.5	V	Volum
$F_M$	Materialfaktor	Fig. A.18/A.19	E	Sveisefaktor
$F_{BM}$	Modulfaktor	Fig. A.19	$t_{min}$	Min. tykkelse
$B_1$	Installasjonskontant	Tab. A.4	$A_{dim}$	Dimensjonerende faktor for utstyr
$B_2$	Installasjonskontant	Tab. A.4	$P_{dim}$	Dimensjonerende faktor for utstyr
$K_1$	Konstant for utstyrskostnad	Tab. A.1	CA	Korrosjonstillegg
$K_2$	Konstant for utstyrskostnad	Tab. A.1	$P_{design}$	Designtrykk
$K_3$	Konstant for utstyrskostnad	Tab. A.1	$P_{drift}$	Driftstrykk
$C_1$	Konstant for trykkfaktor	Tab. A.2	MOC	Konstruksjonsmateriale
$C_2$	Konstant for trykkfaktor	Tab. A.2	$F_p$	Trykkfaktor
$C_3$	Konstant for trykkfaktor	Tab. A.2	$\eta$	Virkningsgrad
S	Makstrykk for materialet	Fig. 7.5	$P_t$	Teoretisk effekt
D	Diameter		$P_e$	Reell effekt
H	Høyde		N	Antall plater
$FCI / C_{TM}$	Fast investeringskapital		$COM_d$	Produksjonskostnad uten avskrivning
$C_P$	Varmekapasitet		U	Varmeoverføringskoeffisient
m	Masse		q	Varmestrøm
$\Delta T_{lm}$	Logaritmisk middeltemperaturdifferanse		F	Korreksjonsfaktor
T	Temperatur		$\dot{m}$	Massestrøm
$\Delta T_m$	Midlere temperaturdifferanse ved bruk av korreksjonsfaktor		$\rho$	Tetthet

## CAPEX estimeringer

Kostnadsestimering av reaktoren (R-201) i er delt inn i to deler: selve trykktanken og innmaten i reaktoren. Disse to delene er beregnet hver for seg. Kostnadsestimering av destillasjonskolonne (T-201 og T-202) foregikk på lik måte som reaktoren. For innmaten til reaktoren var det dimensjonert med "Gamma Alumina Catalyst", mens for innmaten av kolonnene var det oppgitt "SS Valve" med forskjellige antall plater. Verdiene fra  $C_P^0$  og  $C_{BM}$  er for amerikanske dollar i 2001.

**Beregning av fast investeringskapital (total CAPEX) med Formel A.1:**

$$FCI = C_{TM} = 1,18 * \Sigma C_{BM} \quad A.1$$

**Kostnadsestimering (CAPEX) av tank for reaktor og destillasjonskolonner:**

Beregning av designtrykk med Formel A.2:

$$P_{design} = (P_{drift} + 1,7) * 1,1 \quad A.2$$

Beregning av trykkfaktor for en vertikal prosesstank med Formel A.3:

$$F_P = \frac{\frac{P_{design} * D}{2 * S * E - 1,2 * P_{design}} + CA}{t_{min}} \quad A.3$$

Beregning av modulfaktor med Formel A.4:

$$F_{BM} = B_1 + (F_P * F_M * B_2) \quad A.4$$

Beregning av innkjøpskostnad for "billigste" utstyr med Formel A.5:

$$\begin{aligned} \log_{10}(C_P^0) &= K_1 + (K_2 * \log_{10}(A_{dim})) + (K_3 * \log_{10}(A_{dim}))^2 \\ \rightarrow C_P^0 &= 10^{K_1 + (K_2 * \log_{10}(A_{dim})) + (K_3 * \log_{10}(A_{dim}))^2} \end{aligned} \quad A.5$$

Beregning av innkjøpskostnad og installasjonskostnad med Formel A.6:

$$C_{BM} = C_P^0 * F_{BM} \quad A.6$$

Vedlegg

**Kostnadsestimering (CAPEX) av innmat i destillasjonskolonner ("SS Valve"):**

Beregning av designtrykk med Formel A.2:

$$P_{design} = (P_{drift} + 1,7) * 1,1 \quad A.2$$

Beregning av innkjøpskostnad for "billigste" utstyr med Formel A.5:

$$\begin{aligned} \log_{10}(C_P^0) &= K_1 + (K_2 * \log_{10}(A_{dim})) + (K_3 * \log_{10}(A_{dim}))^2 \\ \rightarrow C_P^0 &= 10^{K_1 + (K_2 * \log_{10}(A_{dim})) + (K_3 * \log_{10}(A_{dim}))^2} \end{aligned} \quad A.5$$

Beregning av innkjøpskostnad og installasjonskostnad med Formel A.7:

$$C_{BM} = C_P^0 * N * F_{BM} * F_q \quad A.7$$

**Kostnadsestimering (CAPEX) av innmat i reaktor ("Gamma Alumina Catalyst"):**

Beregning av masse av katalysator med Formel A.8:

$$m[lb] = \rho \left[ \frac{kg}{m^3} \right] * V[m^3] * \frac{1[lb]}{0,4536[kg]} \quad A.8$$

Beregning av innkjøpskostnad og installasjonskostnad med Formel A.9:

$$C_{BM}[USD] = m[lb] * Pris \left[ \frac{USD}{lb} \right] \quad A.9$$

Vedlegg

**Kostnadsestimering (CAPEX) av pumper:**

Beregning av elektrisk virkningsgrad ved interpolering med Formel A.10:

$$\eta = 75 + (11,5 * \log_{10}(P_t)) - (1,5 * \log_{10}(P_t)^2) \quad \text{A.10}$$

Beregning av reell effekt med Formel A.11:

$$P_e = \frac{P_t}{\eta} * 100 \quad \text{A.11}$$

Beregning av designtrykk med Formel A.2:

$$P_{design} = (P_{drift} + 1,7) * 1,1 \quad \text{A.2}$$

Beregning av modulfaktor med Formel A.4:

$$F_{BM} = B_1 + (F_P * F_M * B_2) \quad \text{A.4}$$

Beregning av innkjøpskostnad for "billigste" utstyr med Formel A.5:

$$\begin{aligned} \log_{10}(C_P^0) &= K_1 + (K_2 * \log_{10}(A_{dim})) + (K_3 * \log_{10}(A_{dim}))^2 \\ \rightarrow C_P^0 &= 10^{K_1 + (K_2 * \log_{10}(A_{dim})) + (K_3 * \log_{10}(A_{dim}))^2} \end{aligned} \quad \text{A.5}$$

Beregning av innkjøpskostnad og installasjonskostnad med Formel A.6:

$$C_{BM} = C_P^0 * F_{BM} \quad \text{A.6}$$

**Dimensjonering av varmevekslere (varmere og kjølere):**

Varmebalanse for varmt medium med Formel A.12:

$$q_{varm}[W] = \dot{m}_{varm} \left[ \frac{kg}{h} \right] * C_{P,varm} \left[ \frac{kJ}{kg * K} \right] * (T_{varm,inn} - T_{varm,ut})[K] \quad A.12$$

Varmebalanse for kaldt medium med Formel A.13:

$$q_{kald}[W] = \dot{m}_{kald} \left[ \frac{kg}{h} \right] * C_{P,kald} \left[ \frac{kJ}{kg * K} \right] * (T_{kald,inn} - T_{kald,ut})[K] \quad A.13$$

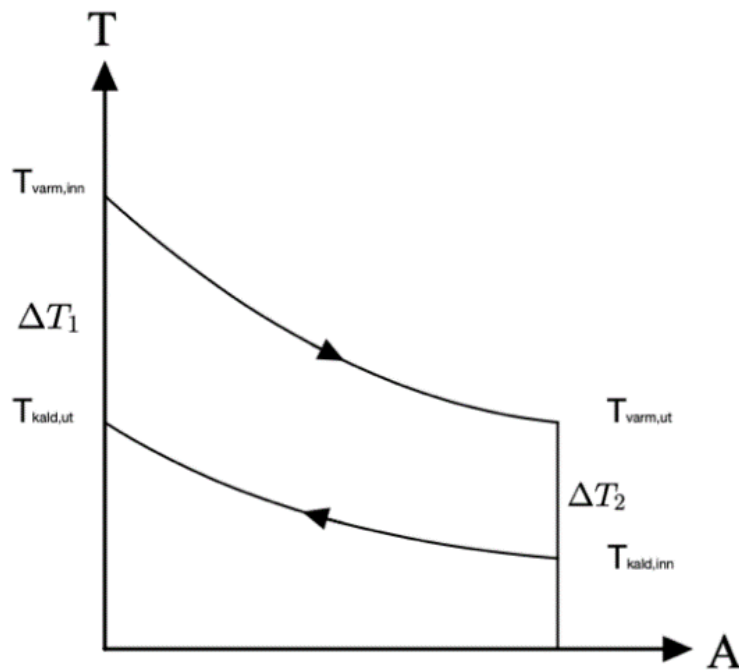
Varmebalanse over varmeveksler med Formel A.14:

$$\begin{aligned} q_{var} &= q_{kald} \\ \rightarrow \dot{m}_{varm} * C_{P,varm} * (T_{varm,inn} - T_{varm,ut}) &= \dot{m}_{kald} * C_{P,kald} * (T_{kald,inn} - T_{kald,ut}) \\ \rightarrow q[W] &= U \left[ \frac{W}{m^2 * K} \right] * A[m^2] * \Delta T_m[K] \end{aligned} \quad A.14$$

Beregning av logaritmisk middeltemperaturdifferanse for motstrøms varmeveksler med Formel A.15 og Figur A.1:

$$\Delta T_{lm} = LMTD = \frac{\Delta T_1 - \Delta T_2}{\ln \left( \frac{\Delta T_1}{\Delta T_2} \right)} \quad A.15$$

Vedlegg



Figur A.1: Motstrøms varmeveksler.

Beregning av midlere temperaturdifferanse med Formel A.16, Formel A.17 og Formel A.18:

$$\Delta T_1 = (T_{varm,inn} - T_{kald,ut}) \quad \text{A.16}$$

$$\Delta T_2 = (T_{varm,ut} - T_{kald,inn}) \quad \text{A.17}$$

$$\Delta T_{lm} = \frac{(T_{varm,inn} - T_{kald,ut}) - (T_{varm,ut} - T_{kald,inn})}{\ln\left(\frac{T_{varm,inn} - T_{kald,ut}}{T_{varm,ut} - T_{kald,inn}}\right)} \quad \text{A.18}$$

Beregning av midlere temperaturdifferanse ved bruk av korreksjonsfaktor med Formel A.19:

$$\Delta T_m [K] = F * \Delta T_{lm} [K] \quad \text{A.19}$$

Beregning av areal av varmeveksler med Formel A.20:

$$A [m^2] = \frac{q [W]}{U \left[ \frac{W}{m^2 * K} \right] * \Delta T_m [K]} \quad \text{A.20}$$

Vedlegg

**Kostnadsestimering (CAPEX) av varmevekslere (varmere og kjølere):**

Beregning av designtrykk med Formel A.2:

$$P_{design} = (P_{drift} + 1,7) * 1,1 \quad A.2$$

Beregning av trykkfaktor for en vertikal prosessstank med Formel A.21:

$$\begin{aligned} \log_{10}(F_P) &= K_1 + (K_2 * \log_{10}(P_{dim})) + (K_3 * \log_{10}(P_{dim}))^2 \\ \rightarrow F_P &= 10^{K_1 + (K_2 * \log_{10}(P_{dim})) + (K_3 * \log_{10}(P_{dim}))^2} \end{aligned} \quad A.21$$

Beregning av modulfaktor med Formel A.4:

$$F_{BM} = B_1 + (F_P * F_M * B_2) \quad A.4$$

Beregning av innkjøpskostnad for "billigste" utstyr med Formel A.5:

$$\begin{aligned} \log_{10}(C_P^0) &= K_1 + (K_2 * \log_{10}(A_{dim})) + (K_3 * \log_{10}(A_{dim}))^2 \\ \rightarrow C_P^0 &= 10^{K_1 + (K_2 * \log_{10}(A_{dim})) + (K_3 * \log_{10}(A_{dim}))^2} \end{aligned} \quad A.5$$

Beregning av innkjøpskostnad og installasjonskostnad med Formel A.6:

$$C_{BM} = C_P^0 * F_{BM} \quad A.6$$



# OPEX estimeringer

OPEX deles inn i flere kategorier; direkte produksjonskostnader (DMC), faste produksjonskostnader (FMC) og generelle produksjonskostnader (GE).

## Kostnadsestimering (OPEX) av produksjonskostnad uten avskrivninger med Formel A.22:

Driftskostnader inkluderte de direkte-, faste- og generelle produksjonskostnadene. Avskrivningene ble ikke tatt med i total OPEX.

$$COM_d = 0,180 * FCI + 2,73 * C_{OL} + 1,23(C_{UT} + C_{WT} + C_{RM}) \quad A.22$$

## Kostnadsestimering (OPEX) av direkte produksjonskostnader (DMC) med Formel A.23:

Direkte produksjonskostnadene inkluderte råmateriale, "utilites" (energi og kjølevann), avløpsvannshåndtering, driftsarbeid, direkte tilsyn og kontorarbeid, vedlikehold og reparasjoner, driftsmateriell, laboratoriekostnader, patenter og royalties.

$$DMC = C_{RM} + C_{WT} + C_{UT} + 1,33 * C_{OL} + 0,03 * COM_d + 0,069 * FCI \quad A.23$$

## Kostnadsestimering (OPEX) av faste produksjonskostnader (FMC) med Formel A.24:

Faste produksjonskostnader inkluderte skatter, forsikringer og anleggskostnader.

$$FMC = 0,708 * C_{OL} + 0,168 * FCI \quad A.24$$

## Kostnadsestimering (OPEX) av generelle produksjonskostnader (GE) med Formel A.25:

Generelle produksjonskostnader inkluderte administrative kostnader, distribusjons- og salgskostnader, samt forskning og utvikling.

$$GE = 0,177 * C_{OL} + 0,009 * FCI + 0,16 * COM_d \quad A.25$$

## **Vedlegg B: CAPEX- og OPEX resultater**

### **CAPEX- og OPEX resultater**

Dette vedlegget omhandler resultater for CAPEX (investeringskostnad) og OPEX (driftskostnad). Vedlegget inneholder en oversikt over alle detaljerte resultater knyttet til CAPEX og OPEX. Disse resultatene er supplerende for de generelle og avrundede resultatene som er presentert i Kapittel 5.4 «Kostnadsestimering». Resultatene er basert på Vedlegg A «CAPEX- og OPEX estimeringer».

# CAPEX resultater

Kostnadsestimering av reaktoren (R-201) og innmaten er vist i Tabell B.1 for "base case", parameter- og energioptimalisering. Tabell B.2 viser kostnadsestimering av destillasjonskolonne (T-201) og innmaten for de tre oppsettene, mens Tabell B.3 viser for den andre destillasjonskolonnen (T-202). Tabell B.4 viser kostnadsestimering for pumper. Denne estimeringen var lik i alle oppsettene. Tabell B.5 viser kostnadsestimering for varmevekslere, som bare var nødvendig i oppsettet; energioptimalisering.

Tabell B.1: Kostnadsestimering av reaktor (R-201) og katalysator for "base case", parameter- og energioptimalisering.

Beskrivelse	"Base case"		Parameter-optimalisering		Energi-optimalisering	
	Reaktor (R-201)	Katalysator (R-201)	Reaktor (R-201)	Katalysator (R-201)	Reaktor (R-301)	Katalysator (R-301)
Pris [USD/lb]	-	5,25	-	5,25	-	5,25
MOC	CS	Gamma Alumina	CS	Gamma Alumina	CS	Gamma Alumina
D [m]	1,33	1,33	1,33	1,33	1,33	1,33
H [m]	15	13,3	15	13,3	15	13,3
V [m <sup>3</sup> ] / A[m <sup>2</sup> ]	20,84	18,48	20,84	18,48	20,84	18,48
$\rho$ [kg/m <sup>3</sup> ]	-	1,47	-	1,47	-	1,47
m [lb]	-	59,88	-	59,88	-	59,88
P <sub>drift</sub> [bar]	14,7	14,7	17	17	17	17
P <sub>design</sub> [bar]	18,04	18,04	20,57	20,57	20,57	20,57
CA [m]	0,00315	-	0,00315	-	0,00315	-
S [bar]	944	-	944	-	944	-
E	0,9	-	0,9	-	0,9	-
t <sub>min</sub> [m]	0,0063	-	0,0063	-	0,0063	-
ID-nr.	18	-	18	-	18	-
F <sub>P</sub>	2,77	-	2,77	-	2,77	-
F <sub>q</sub>	-	-	-	-	-	-
F <sub>M</sub>	1,00	-	1,00	-	1,00	-
B1	2,25	-	2,25	-	2,25	-
B2	1,82	-	1,82	-	1,82	-
K1	3,4974	-	3,4974	-	3,4974	-
K2	0,4485	-	0,4485	-	0,4485	-
K3	0,1074	-	0,1074	-	0,1074	-
F <sub>BM</sub>	7,29	-	7,88	-	7,88	-
C <sub>P</sub> <sup>0</sup> [USD]	18 868	-	18 868	-	18 868	-
C <sub>BM, 2001</sub> [USD]	137 586	314	148 681	314	148 681	314
C <sub>BM, 2023</sub> [USD]	279 638	639	302 188	639	302 188	639

Vedlegg

Tabell B.2: Kostnadsestimering av destillasjonskolonne (T-201 og T-301) og innmat for "base case", parameter- og energioptimalisering.

Beskrivelse	"Base case"		Parameter-optimalisering		Energi-optimalisering	
	Kolonne (T-201)	22 plater (T-201)	Kolonne (T-201)	22 plater (T-201)	Kolonne (T-301)	22 plater (T-301)
MOC	CS	SS Valve	CS	SS Valve	CS	SS Valve
D [m]	0,79	0,79	0,79	0,79	0,79	0,79
H [m]	15,8	-	15,8	-	15,8	-
V [m <sup>3</sup> ] / A[m <sup>2</sup> ]	7,74	0,49	7,74	0,49	7,74	0,49
P <sub>drift</sub> [bar]	10,6	10,6	10,5	10,5	10,5	10,5
P <sub>design</sub> [bar]	13,53	13,53	13,42	13,42	13,42	13,42
CA [m]	0,00315	-	0,00315	-	0,00315	-
S [bar]	944	-	944	-	944	-
E	0,9	-	0,9	-	0,9	-
t <sub>min</sub> [m]	0,0063	-	0,0063	-	0,0063	-
ID-nr.	18	61	18	61	18	61
F <sub>P</sub>	1,51	-	1,50	-	1,50	-
F <sub>q</sub>	-	1	-	1	-	1
F <sub>M</sub>	1,00	-	1,00	-	1,00	-
B1	2,25	-	2,25	-	2,25	-
B2	1,82	-	1,82	-	1,82	-
K1	3,4974	2,9949	3,4974	2,9949	3,4974	2,9949
K2	0,4485	0,4465	0,4485	0,4465	0,4485	0,4465
K3	0,1074	0,3961	0,1074	0,3961	0,1074	0,3961
F <sub>BM</sub>	4,99	1,80	4,98	1,80	4,98	1,80
C <sub>P</sub> <sup>0</sup> [USD]	9 572	785	9 572	785	9 572	785
C <sub>BM, 2001</sub> [USD]	47 809	31 068	47 665	31 068	47 665	31 068
C <sub>BM, 2023</sub> [USD]	97 171	63 145	96 878	63 145	96 878	63 145

## Vedlegg

Tabell B.3: Kostnadsestimering av destillasjonskolonne (T-202 og T-302) og innmat for "base case", parameter- og energioptimalisering.

Beskrivelse	"Base case"		Parameter-optimalisering		Energi-optimalisering	
	Kolonne (T-202)	22 plater (T-202)	Kolonne (T-202)	26 plater (T-202)	Kolonne (T-302)	26 plater (T-302)
MOC	CS	SS Valve	CS	SS Valve	CS	SS Valve
D [m]	0,87	0,87	0,87	0,87	0,87	0,87
H [m]	14,9	-	14,90	-	14,90	-
V [m <sup>3</sup> ] / A[m <sup>2</sup> ]	8,86	0,59	8,86	0,59	8,86	0,59
P <sub>drift</sub> [bar]	7,30	7,30	7,60	7,60	7,60	7,60
P <sub>design</sub> [bar]	9,90	9,90	10,23	10,23	10,23	10,23
CA [m]	0,00315	-	0,00315	-	0,00315	-
S [bar]	944	-	944	-	944	-
E	0,9	-	0,9	-	0,9	-
t <sub>min</sub> [m]	0,0063	-	0,0063	-	0,0063	-
ID-nr.	18	61	18	61	18	61
F <sub>p</sub>	1,31	-	1,34	-	1,34	-
F <sub>q</sub>	-	1	-	1	-	1
F <sub>M</sub>	1,00	-	1,00	-	1,00	-
B1	2,25	-	2,25	-	2,25	-
B2	1,82	-	1,82	-	1,82	-
K1	3,4974	2,9949	3,4974	2,9949	3,4974	2,9949
K2	0,4485	0,4465	0,4485	0,4465	0,4485	0,4465
K3	0,1074	0,3961	0,1074	0,3961	0,1074	0,3961
F <sub>BM</sub>	4,63	1,80	4,68	1,80	4,68	1,80
C <sub>p</sub> <sup>0</sup> [USD]	10 439	821	10 439	821	10 439	821
C <sub>BM, 2001</sub> [USD]	48 380	38 415	48 897	38 415	48 897	38 415
C <sub>BM, 2023</sub> [USD]	98 331	78 077	99 382	78 077	99 382	78 077

Vedlegg

Tabell B.4: Kostnadsestimering av pumper for "base case", parameter- og energioptimalisering.

Beskrivelse	Pumpe (P-201A/B)	Pumpe (P-203A/B)
Type	Reciprocating	Centrifugal
MOC	CS	CS
$P_t$ [kW]	7,2	5,2
$\eta$ [%]	83,8	82,5
$P_e$ [kW]	8,60	6,31
$P_{drift}$ [bar]	15,5	16
$P_{design}$ [bar]	18,92	19,47
C1	-0,245382	-0,3935
C2	0,259016	0,3957
C3	-0,01363	-0,00226
$F_p$	1,16	1,30
ID-nr.	26	38
$F_M$	1,45	1,55
B1	1,89	1,89
B2	1,35	1,35
$F_{BM}$	4,15	4,60
K1	3,8696	3,3892
K2	0,3161	0,0536
K3	0,1220	0,1538
$C_p^0$ [USD]	18 682	3 392
$C_{BM, 2001}$ [USD]	155 207	31 232
$C_{BM, 2023}$ [USD]	315 452	63 478

Vedlegg

Tabell B.5: Kostnadsestimering av varmevekslere for energioptimalisering.

Beskrivelse	Veksler (E-301)	Veksler (E-303)
Type	Floating head	Floating head
A [m <sup>2</sup> ]	43,7	43,5
MOC skall-side	CS	CS
MOC rør-side	CS	CS
P <sub>drift</sub> [bar]	15,75	7,25
P <sub>design</sub> [bar]	19,20	9,85
C <sub>1</sub>	0,03881	0,03881
C <sub>2</sub>	-0,11272	-0,11272
C <sub>3</sub>	0,08183	0,08183
F <sub>P</sub>	1,07	1,02
ID-nr.	1	1
F <sub>M</sub>	1,00	1,00
B <sub>1</sub>	1,63	1,63
B <sub>2</sub>	1,66	1,66
F <sub>BM</sub>	3,40	3,32
K <sub>1</sub>	4,8306	4,8306
K <sub>2</sub>	-0,8509	-0,8509
K <sub>3</sub>	0,3187	0,3187
C <sub>P</sub> <sup>0</sup> [USD]	19 605	19 591
C <sub>BM, 2001</sub> [USD]	66 740	65 028
C <sub>BM, 2023</sub> [USD]	135 647	132 166

Vedlegg

Tabell B.6: Kostnadsestimering av varmer for "base case", parameter- og energioptimalisering.

Beskrivelse	"Base case"	Parameter- optimalisering	Energi- optimalisering
Type	Floating head	Floating head	Floating head
A [m <sup>2</sup> ]	301,4	301,4	301,4
MOC skall-side	CS	CS	CS
MOC rør-side	CS	CS	CS
P <sub>drift</sub> [bar]	15,5	20,0	17,0
P <sub>design</sub> [bar]	18,92	23,87	20,57
C <sub>1</sub>	0,03881	0,03881	0,03881
C <sub>2</sub>	-0,11272	-0,11272	-0,11272
C <sub>3</sub>	0,08183	0,08183	0,08183
F <sub>P</sub>	1,07	1,09	1,08
ID-nr.	1	1	1
F <sub>M</sub>	1	1	1
B <sub>1</sub>	1,63	1,63	1,63
B <sub>2</sub>	1,66	1,66	1,66
F <sub>BM</sub>	3,40	3,45	3,42
K <sub>1</sub>	4,8306	4,8306	4,8306
K <sub>2</sub>	-0,8509	-0,8509	-0,8509
K <sub>3</sub>	0,3187	0,3187	0,3187
C <sub>P</sub> <sup>0</sup> [USD]	47 845	35 023	39 739
C <sub>BM, 2001</sub> [USD]	162 759	120 668	135 769
C <sub>BM, 2023</sub> [USD]	330 801	245 253	275 945



Vedlegg

Tabell B.7: Kostnadsestimering av kjøler for "base case" og paramteroptimalisering.

Beskrivelse	"Base case"		Parameter-optimalisering	
	Kjøler (E-203)	Kjøler (E-205)	Kjøler (E-203)	Kjøler E-205)
Type	Floating head	Floating head	Floating head	Floating head
A [m <sup>2</sup> ]	114,4	7,5	72,5	3,6
MOC skall-side	CS	CS	CS	CS
MOC rør-side	CS	CS	CS	CS
P <sub>drift</sub> [bar]	14,7	8,4	20,0	8,4
P <sub>design</sub> [bar]	18,04	11,11	23,87	11,11
C <sub>1</sub>	0,03881	0,03881	0,03881	0,03881
C <sub>2</sub>	-0,11272	-0,11272	-0,11272	-0,11272
C <sub>3</sub>	0,08183	0,08183	0,08183	0,08183
F <sub>p</sub>	1,06	1,02	1,09	1,02
ID-nr.	1	1	1	1
F <sub>M</sub>	1	1	1	1
B <sub>1</sub>	1,63	1,63	1,63	1,63
B <sub>2</sub>	1,66	1,66	1,66	1,66
F <sub>BM</sub>	3,39	3,33	3,45	3,33
K <sub>1</sub>	4,8306	4,8306	4,8306	4,8306
K <sub>2</sub>	-0,8509	-0,8509	-0,8509	-0,8509
K <sub>3</sub>	0,3187	0,3187	0,3187	0,3187
C <sup>0</sup> <sub>p</sub> [USD]	26 878	21 358	22 417	28 592
C <sub>BM, 2001</sub> [USD]	91 218	71 129	77 234	95 221
C <sub>BM, 2001, 6/10 justert</sub> [USD]	-	59 990	-	51 530
C <sub>BM, 2023</sub> [USD]	185 397	121 928	156 975	104 732

# OPEX resultater

Kostnadsestimering av "utilities" (elektrisk strøm, kjølevann og damp) er vist i Tabell B.8, mens Tabell B.9 viser kostnadsestimatet av utgift for råmateriale og avløpsvannrensing. Tabell B.10 viser kostnadsestimering av totale produksjonskostnader (OPEX).

Tabell B.8: Kostnadsestimering av utgift for strøm, kjølevann og damp ("utilities").

Beskrivelse	"Base case"	Parameter- optimalisering	Energi- optimalisering
Pris strøm [USD/kWh]	0,192	0,192	0,192
Strømførbbruk [kW]	8 792	5 929	5 851
Kostnad [USD/år]	14 787 441	9 972 104	9 832 504
Pris damp [USD/kg]	0,00961	0,00954	0,00954
Massestrøm [kg/h]	10 193	7 677	5 255
Kostnad [USD/år]	1 744 085	1 303 967	892 581
Pris kjølevann [USD/m <sup>3</sup> ]	0,0157	0,0157	0,0157
Volumstrøm [m <sup>3</sup> /h]	228,89	153,13	58,97
Kostnad [USD/år]	63 981	42 803	16 484

Tabell B.9: Kostnadsestimering av utgift for metanol ( $C_{RM}$ ) og avløpsvannrensing ( $C_{WT}$ ).

Beskrivelse	"Base case"	Parameter- optimalisering	Energi- optimalisering
Pris metanol [USD/US gallon]	1,49	1,49	1,49
Volumstrøm [m <sup>3</sup> /h]	10,63	10,63	10,63
Kostnad [USD/år]	36 653 083	36 653 083	36 653 083
Pris avløpsvannrensing [USD/ m <sup>3</sup> ]	0,041	0,041	0,041
Volumstrøm [m <sup>3</sup> /h]	2,777	2,800	2,764
Kostnad [USD/år]	2 027	2 044	2 018

Tabell B.10: Kostnadsestimering av totale produksjonskostnader (OPEX).

Beskrivelse	"Base case"	Parameter- optimalisering	Energi- optimalisering
Produksjonskostnad uten avskrivning ( $COM_d$ / OPEX)	65 845 368	59 332 221	58 629 920
Direkte produksjonskostnader (DMC)	55 359 040	49 878 247	49 282 844
Faste produksjonskostnader (FMC)	131 126	122 471	125 424
Generelle produksjonskostnader (GE)	10 552 615	9 509 366	9 397 389
Prosentandel DMC av $COM_d$	83,8 %	83,8 %	83,8 %
Prosentandel FMC av $COM_d$	0,2 %	0,2 %	0,2 %
Prosentandel GE av $COM_d$	16,0 %	16,0 %	16,0 %

## **Vedlegg C: Netto nåverdi estimeringer**

### **Netto nåverdi estimeringer**

Dette vedlegget omhandler netto nåverdi (NV) estimeringer. NV er et mål på hvor lønnsomt et prosjekt er, basert på nåverdien av alle inntekter og kostnader knyttet til prosjektet. Dette vedlegget inneholder en oversikt over antagelser og variabler som er brukt i NV-beregningene, f.eks. diskonteringsrente, tidsperspektiv, investeringskostnad og driftskostnad. Vedlegget viser også detaljerte resultater av beregningene i Excel som er utgangspunktet for NV-diagrammer i rapporten. Estimeringen er gjort i henhold til emnet «Energieffektivisering» ved USN.

# Netto nåverdi estimeringer

Tabell C.1 viser alle antagelser og variabler i NV-beregningene. Variablene er investeringskostnad ( $FCI_L$ ), inntekt ( $R$ ) og driftskostnader ( $COM_d$ ).

Tabell C.1: Oversikt over antagelser og variabler i beregningene.

Beskrivelse	Forkortelse	Verdi
Land / Tomt [mill USD]	L	-1
Investeringskostnad uten land [mill USD]	$FCI_L$	-1,84
Arbeidskapital [mill USD]	WC	-1
Inntekt [mill USD]	R	54,34
Driftskostnader (OPEX) [mill USD]	$COM_d$	-58,63
Skatt på overskudd [%]	t	0,22
Restverdi av utstyr [mill USD]	S	0,5
Diskonteringsrente [%]	i	0,1
Antall byggeår [år]	$n_b$	2
Antall driftsår [år]	$n_d$	23

MACRS ("Modified Accelerated Cost Recovery System") metoden ble benyttet for beregning av avvirkningene for utstyret i prosessen, som vist i Tabell C.2. Denne metoden kombinerer de to metodene DDB ("Double Decling Balance") og SL ("Straight Line").

Tabell C.2: MACRS metoden med avskrivningsprosent.

År	Avskrivningsprosent
1	20,00
2	32,00
3	19,20
4	11,52
5	11,52
6	5,76

Vedlegg

Beregning av netto profitt + avskrivning med Formel C.1:

$$(R - COM_d - d_k)(1 - t) + d_k \quad C.1$$

Beregning av diskontert kontantstrøm med Formel C.2:

$$Disk\ CF = \frac{CF}{(1 + i)^n} \quad C.2$$

Ved å sette verdiene i Tabell C.1 og Tabell C.2 i et Excel-ark sammen med Formel C.1 og Formel C.2, kan diskonterte lønnsomhetskriterier illustreres. Videre kan målsøk-funksjonen i Excel estimere salgsprisen for DME slik at kumulativ diskontert kontantstrøm i år 25 er lik null. Disse diskonterte lønnsomhetskriteriene er vist i Tabell C.3. Ved å plote antall år med kumulativ diskontert kontantstrøm kan et NV-diagram illustreres.

Tabell C.3: Diskonterte lønnsomhetskriterier i Excel med nåverdi (NV) lik null i år 25.

	år	investering	avskrivning	igjen å avskrive	inntekt	driftskostnad	netto profitt + avskrivning	kontantstrøm	kumulativ ikke-diskontert kontantstrøm	diskontert kontantstrøm	kumulativ diskontert kontantstrøm
	k		$d_k$	$FCI_t - Ed_k$	R	$COM_d$	$(R - COM_d - d_k)(1-t) + d_k$	CF	$\Sigma CF$	Disc CF	Disc CF
byggefase	0	-1	0	1,84	0	0	0	-1	-1	-1	-1
	1	-1,42	0	1,84	0	0	0	-1,42	-2,42	-1,29	-2,29
	2	-1,42	0	1,84	0	0	0	-1,42	-3,84	-1,18	-3,47
driftsfase	3	0	0,37	1,48	59,15	58,63	0,49	0,49	-3,36	0,37	-3,10
	4	0	0,59	0,89	59,15	58,63	0,54	0,54	-2,82	0,37	-2,73
	5	0	0,35	0,53	59,15	58,63	0,49	0,49	-2,33	0,30	-2,43
	6	0	0,17	0,36	59,15	58,63	0,44	0,44	-1,89	0,25	-2,18
	7	0	0,21	0,15	59,15	58,63	0,45	0,45	-1,44	0,23	-1,95
	8	0	0,15	0	59,15	58,63	0,44	0,44	-1,00	0,21	-1,74
	9	0	0	0	59,15	58,63	0,41	0,41	-0,59	0,17	-1,57
	10	0	0	0	59,15	58,63	0,41	0,41	-0,18	0,16	-1,41
	11	0	0	0	59,15	58,63	0,41	0,41	0,23	0,14	-1,27
	12	0	0	0	59,15	58,63	0,41	0,41	0,63	0,13	-1,14
	13	0	0	0	59,15	58,63	0,41	0,41	1,04	0,12	-1,02
	14	0	0	0	59,15	58,63	0,41	0,41	1,45	0,11	-0,92
	15	0	0	0	59,15	58,63	0,41	0,41	1,85	0,10	-0,82
	16	0	0	0	59,15	58,63	0,41	0,41	2,26	0,09	-0,73
	17	0	0	0	59,15	58,63	0,41	0,41	2,67	0,08	-0,65
	18	0	0	0	59,15	58,63	0,41	0,41	3,08	0,07	-0,58
	19	0	0	0	59,15	58,63	0,41	0,41	3,48	0,07	-0,51
	20	0	0	0	59,15	58,63	0,41	0,41	3,89	0,06	-0,45
	21	0	0	0	59,15	58,63	0,41	0,41	4,30	0,06	-0,39
	22	0	0	0	59,15	58,63	0,41	0,41	4,70	0,05	-0,34
	23	0	0	0	59,15	58,63	0,41	0,41	5,11	0,05	-0,30
	24	0	0	0	59,15	58,63	0,41	0,41	5,52	0,04	-0,26
	25	2	0	0	0	59,65	58,63	0,80	2,80	8,32	0,26

### Vedlegg

Da prisen for nullpunktet i år 25 ble estimert av Excel, som vist i Tabell C.3, kunne prisen for DME settes over dette nullpunktet. Dette blir illustrert i Tabell C.4 og kan bli benyttet til å finne tilbakebetalingstiden (DPBP) ved å plote år med kumulativ diskontert kontantstrøm i et NV-diagram.

Tabell C.4: Diskonterte lønnsomhetskriterier i Excel med pris for dimetyleter (DME) større enn nullpunktet i år 25.

	år	investering	avskrivning	igjen å avskrive	inntekt	driftskostnad	netto profit + avskrivning	kontantstrøm	kumulativ ikke-diskontert kontantstrøm	diskontert kontantstrøm	kumulativ diskontert kontantstrøm
	k		$d_k$	$FCI_k - Zdk$	R	$COM_k$	$(R - COM_k - d_k)(1-t) + d_k$	CF	ICF	Disc CF	Disc CF
byggefase	0	-1	0	1,84	0	0	0	-1	-1	-1	-1
	1	-1,42	0	1,84	0	0	0	-1,42	-2,42	-1,29	-2,29
	2	-1,42	0	1,84	0	0	0	-1,42	-3,84	-1,18	-3,47
driftsfase	3	0	0,37	1,48	60,11	58,63	1,24	1,24	-2,61	0,93	-2,54
	4	0	0,59	0,89	60,11	58,63	1,28	1,28	-1,32	0,88	-1,66
	5	0	0,35	0,53	60,11	58,63	1,23	1,23	-0,09	0,77	-0,90
	6	0	0,17	0,36	60,11	58,63	1,19	1,19	1,10	0,67	-0,22
	7	0	0,21	0,15	60,11	58,63	1,20	1,20	2,30	0,62	0,39
	8	0	0,15	0	60,11	58,63	1,19	1,19	3,49	0,55	0,95
	9	0	0	0	60,11	58,63	1,15	1,15	4,64	0,49	1,44
	10	0	0	0	60,11	58,63	1,15	1,15	5,80	0,45	1,88
	11	0	0	0	60,11	58,63	1,15	1,15	6,95	0,40	2,28
	12	0	0	0	60,11	58,63	1,15	1,15	8,11	0,37	2,65
	13	0	0	0	60,11	58,63	1,15	1,15	9,26	0,33	2,99
	14	0	0	0	60,11	58,63	1,15	1,15	10,41	0,30	3,29
	15	0	0	0	60,11	58,63	1,15	1,15	11,57	0,28	3,57
	16	0	0	0	60,11	58,63	1,15	1,15	12,72	0,25	3,82
	17	0	0	0	60,11	58,63	1,15	1,15	13,88	0,23	4,05
	18	0	0	0	60,11	58,63	1,15	1,15	15,03	0,21	4,25
	19	0	0	0	60,11	58,63	1,15	1,15	16,19	0,19	4,44
	20	0	0	0	60,11	58,63	1,15	1,15	17,34	0,17	4,61
	21	0	0	0	60,11	58,63	1,15	1,15	18,50	0,16	4,77
	22	0	0	0	60,11	58,63	1,15	1,15	19,65	0,14	4,91
	23	0	0	0	60,11	58,63	1,15	1,15	20,80	0,13	5,04
	24	0	0	0	60,11	58,63	1,15	1,15	21,96	0,12	5,16
	25	2	0	0	60,61	58,63	1,54	3,54	25,50	0,33	5,49

# Vedlegg D: Prosjektbeskrivelse

## **Prosjektbeskrivelse**

Dette vedlegget inneholder en prosjektbeskrivelse for denne bacheloroppgaven. Prosjektbeskrivelsen gir en oversikt over bakgrunnen, problemstillingen, målene og metodene for rapporten. Prosjektbeskrivelsen er utarbeidet av USN.

# TS3000 Bacheloroppgave

**Studieretning: Ren energi- og prosess teknologi**

**Prosjektgruppe: K6-2-23**

**Tittel: Grønn produksjon av dimetyleter (DME) – indirekte konvertering av syntesegass produsert fra biomasse**

**Veileder: Marianne S. Eikeland og Terje Bråthen**

**Samarbeidspartner:**

## **Prosjektets bakgrunn:**

Dimetyleter (DME) er et syntetisk produsert alternativ til diesel for bruk i spesialdesignede dieselmotorer med kompresjonstenning. I overgangen til en fossilri transportsektor kan bruk av DME være et grønt alternativ. Det forutsetter at DME produseres fra karbonnøytale ressurser som biomasse.

DME kan produseres fra syntesegassen fra gassifisering av biomasse- bioDME. Syntesegassen består av hovedsakelig CO, H<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub> og CH<sub>4</sub>. Denne gassen kan benyttes til å produsere enten DME direkte ved å bruke Haldor-Topseøs ett-trinns prosess, eller via metanol i en totrinns prosess.

Våren 2022 ble det gjennomført et bachelorprosjekt der man vurderte metanolproduksjon basert på syntesegass fra gassifisering av biomasse. Med utgangspunkt bachelorprosjektet vår 2022, skal man studere produksjonen av dimetyleter. Oppgaven vil innebære vurdering av prosessdesign, prosessoptimalisering og kostnadsvurdering av DME syntesen. Aspen Hysys benyttes for prosesssimuleringene.

## **Arbeidsoppgaver for prosjektet:**

Studentene skal i denne oppgaven ved hjelp av Aspen Hysys simulere og optimalisere DME prosessen.

- Beskrive alternative synteseruter for produksjon av dimetyleter.
- Lage simuleringsmodeller av DME i Aspen Hysys.
- Vurdere ulike termodynamiske beregningsmodeller i Aspen Hysys.
- Vurdere ulike reaktor konfigurasjoner i Aspen Hysys.
- Vurdere optimale prosessparametere (trykk, temperatur, kinetikk, oppholdstid i reaktor etc.) for produksjonen gjennom sensitivitetsanalyser.
- Vurder energioptimalisering for prosessen.
- Utfør en kostnadsestimerting av DME prosessen.



# Vedlegg E: Medforfattererklæring



## Medforfattererklæring

Dette vedlegget inneholder en medforfattererklæring for bacheloroppgaven. Erklæringen beskriver det selvstendige forskningsarbeidet til hver medforfatter. Vedlegget er også signert av alle medforfatterne.

# Medforfattererklæring

<b>Tittel på oppgaven</b>	Grønn produksjon av dimetyleter (DME) - Indirekte konvertering av syntese-gass fra biomasse
<b>Veileder fra USN</b>	Marianne Sørflaten Eikeland og Terje Bråthen

<b>Beskriv hva hver student i prosjektgruppen har bidratt med i bacheloroppgaven:</b>
Sebastian Larsen har bidratt med: <ul style="list-style-type: none"> <li>- Aspen Hysys simuleringer</li> <li>- Analyse/tolking av data</li> <li>- Kapittel 4.1-4.4</li> <li>- Kapittel 5.1-5.3</li> </ul>
Eivind J. R. Trasti har bidratt med: <ul style="list-style-type: none"> <li>- Litteratursøk</li> <li>- Referanser</li> <li>- Kapittel 2</li> <li>- Møtereferent</li> </ul>
Oliver Numme har bidratt med: <ul style="list-style-type: none"> <li>- Kapittel 1</li> <li>- Kapittel 2.2-2.4</li> <li>- Kapittel 3</li> <li>- Kapittel 4</li> <li>- Kapittel 5</li> <li>- Vedlegg</li> <li>- Analyse/tolking av data</li> <li>- Møteleder</li> </ul>
Gruppe K6-2-23 har bidratt i fellesskap med: <ul style="list-style-type: none"> <li>- Problemformulering, gruppeavtale, veiledningsavtale</li> <li>- Resterende kapitler (Kapittel 6, 7 og Sammendrag)</li> <li>- Deltatt på ukentlige prosjektmøter med veileder</li> </ul>

<b>Dato</b>	<b>Signatur</b>
19.05.2023	
19.05.2023	
19.05.2023	