

DOKTORI (PhD) ÉRTEKEZÉS

SZABÓ LÁSZLÓ

Pannon Egyetem

2018.

Pannon Egyetem
Vegyészmérnöki és Folyamatmérnöki Intézet
Folyamatmérnöki Intézeti Tanszék

Sokkomponensű elegyek szétválasztási lehetőségeinek vizsgálata rektifikálás esetén

DOI:10.18136/PE.2019.703

DOKTORI (PhD) ÉRTEKEZÉS

Szabó László

Konzulensek

Dr. Németh Sándor, egyetemi docens

Dr. Szeifert Ferenc, egyetemi docens

Vegyészmérnöki- és Anyagtudományok Doktori Iskola
Pannon Egyetem
2018.

**SOKKOMPONENSŰ ELEGYEK SZÉTVÁLASZTÁSI LEHETŐSÉGEINEK
VIZSGÁLATA REKTIFIKÁLÁS ESETÉN**

Az értekezés doktori (PhD) fokozat elnyerése érdekében készült a Pannon Egyetem
Vegyészmérnöki- és Anyagtudományok Doktori Iskolája keretében

Vegyészmérnök tudományágban

Írta: Szabó László

Témavezetők: Dr. Németh Sándor

Elfogadásra javaslom (igen / nem)
(aláírás)

Dr. Szeifert Ferenc

Elfogadásra javaslom (igen / nem)
(aláírás)

A jelölt 2017. szeptember 6-án letett komplex vizsgán %-ot ért el,

.....
(a Doktori Iskola vezetője)

Az értekezést bírálóként elfogadásra javaslom:

Bíráló neve: igen /nem
.....
(bíráló)

Bíráló neve: igen /nem
.....
(bíráló)

A jelölt az értekezés nyilvános vitáján%-ot ért el.

Veszprém,
a Bíráló Bizottság elnöke

A doktori (PhD) oklevél minősítése
Veszprém,
az EDHT elnöke

Köszönetnyilvánítás

Szeretném megköszönni témavezetőimnek dr. Németh Sándornak és dr. Szeifert Ferencnek a témavezetésüket, a dolgozat elkészüléséhez nyújtott segítségüket, és türelmüket, amely lehetővé tette, hogy az értekezés elkészüljön.

Valamint szeretném megköszönni a tanszéki kollektívának a számos szakmai építő jellegű vitát, amelyek elősegítették a szakmai fejlődésem, személtük mindig példa lesz számomra.

Köszönöm továbbá Balaton Miklós Gábor, Rádi György, Egedy Attila, Tóth László Richárd, Bárkányi Ágnes, Borsos Ákos, Dobos László és Király András, szakmai és baráti támogatását a dolgozat készítése alatt.

Szeretném megköszönni a „Desztillációs oszlopok irányítása” című fejezethez nyújtott segítségét Kubovicsné Stocz Klárának, Szabó Laurának és Komróczki Tibornak.

Valamint utoljára, de nem utolsó sorban szeretném még megköszönni feleségemnek és az egész családomnak az egyetemen töltött évek során nyújtott segítségüket és támogatásukat.

Kivonat

A dolgozat célja, hogy feltárja az összefüggést a szétválasztandó elegyek termodinamikai tulajdonságai és a szétválasztó rendszerek szerkezete valamint a szabályzórendszerek felépítése között. Az összefüggéseket négy szétválasztó rendszerekkel kapcsolatos tervezési feladat megoldásával vizsgáltam.

A dolgozatomban az osztott terű kolonna példáján keresztül mutattam be egy háromtermékes desztilláció energia hatékonyságának növelését. A vizsgált berendezés benzol-toluol-xilol elegyet választ szét. Az osztófalas desztilláló oszlop olyan tervezési változókkal rendelkezik a hagyományos konstrukció paramétereit mellett, melyek az adott műveleti egységre jellemzőek, ezek meghatározása kulcsfontosságú a rektifikáló oszlop tervezése során. Bemutattam, hogy az osztott terű rektifikáló oszlop energiafelhasználása hogyan függ az osztófal helyzetétől és méretétől, emellett érzékenység vizsgálatokat végeztem a betáplálási összetétel változására.

A dolgozatomban szintén bemutattam egy soktermékes desztillálórendszer tervezési lehetőségeit. A vizsgálatokban egy olefingyári pirogáz szétválasztórendszerét terveztem meg. Egy mintapéldán keresztül bemutattam, hogy a szétválasztandó elegy komponenseinek forráspont szerinti rendezése és az összetétel és forráspont különbség diagram elkészítésével gazdasági megfontolások alapján kiválaszthatók a szétválasztó rendszer termékei. A diagram alkalmazásával azonosíthatjuk a korlátokat, definiálhatjuk az egyes vágások helyét és a szétválasztások kulcskomponenseit. Heurisztikus szabályok alkalmazásával, a diagram segítségével meghatározhatjuk a szétválasztási sorrendet. A szétválasztó rendszer felépítése algoritmikus módszerrel is meghatározható, ennek alkalmazása során leképeztem a szétválasztási feladat megoldására alkalmas összes szétválasztó rendszert. A szimulációk eredményét felhasználva költségbecslő függvény alkalmazásával sorrendbe állítottam a szeparációs rendszereket, így megállapítottam az optimális felépítést.

A dolgozatom kitér a desztilláló berendezések üzemeltetésének témakörére. Szimulációval tanulmányoztam egy benzol-aceton elegyet kéttermékre szétválasztó rektifikáló oszlop kétszintű irányítási rendszerét. Feltérképeztem a desztillációs oszlop üzemeltetési tartományait. Bemutattam, hogy a szabályzórendszer alkalmas a kolonna szabályozására egy kiválasztott üzemeltetési tartományon belül. Ettől eltérő üzemeltetési tartományban a szabályzórendszer struktúrájának megváltoztatása szükséges. Szimulátor segítségével szintén létrehoztam egy benzin elegyeket szétválasztó desztillálóoszlop minőség szabályozását biztosító kétszintes irányítási struktúrát. A vizsgált desztilláló berendezés modelljét a Mol Nyrt. mérési adataira illesztettem. A minőséget definiáló tulajdonságok direkt módon gazdaságosan nem mérhetők, ezért üzemi adatokra alapozva becslő számításokat végeztem. A vizsgálatokban a szabályozott és

a beavatkozó jellemzők MIMO (több bemenetű, több kimenetű) problémáját stacioner és dinamikus vizsgálatokkal SISO (egy bemenetű, egy kimenetű) problémákra bontottam.

A dolgozatban a stacionárius vizsgálatokhoz Aspen PlusTM a dinamikus vizsgálatokban Aspen Plus DynamicsTM és Aspen HYSYSTM szoftvereket használtam.

Abstract

The purpose of this thesis is to reveal the relationship between the thermodynamic properties of separated mixtures, structure of the separation system and structure of the control system. Contexts are analyzed by solving several distillation related design tasks.

In the thesis energy efficiency improvement of distillation of a three component mixture is shown on the example of a dividing wall column (DWC). Feed of the column contains benzene, toluene, and xylene. DWC possesses unique design parameters beside the design parameters of ordinary columns, and determination of these parameters is very important during the design procedure of DWCs. Correlation between energy demand of the column, size, and position of the wall were analyzed; additionally effect of changing the feed composition is analyzed.

In my work I also present design possibilities of a separation system with more than three products. For this reason separation system of cracked gas in olefin plant is designed. To show this through an example graph of the boiling point difference and the concentration was introduced: the components were ordered by their boiling point and plotted with the composition of the mixture. With the graph the products could be identified easily using economic considerations. The constrains of the separation, the place of the splits and key components could be identified easily with the help of the graph. The sequence of the separation can also be determined applying heuristic rules. The structure of the separation system is also possible to design with algorithmic methods. All of the feasible column sequences were implemented with an algorithm. Based on the simulation results the cost of the separation systems were calculated. Based on this data the cost rank of the separation systems and the optimal structure are determined.

In the thesis I also deal with the operation of the distillation columns. Two stage control system of a benzene – acetone splitter is analyzed in simulations. Operation domain of the column is mapped. I show that the control system is suitable for the operation in a given domain, however in other domains modification of the structure is necessary. The control system of an industrial naphtha fractionator is also analyzed in simulation environment. Model of the column was created based on sensor data of a real life asset in Danube Refinery of the Mol Plc. The direct measurement of the controlled variables is costly, therefore soft-sensors are created based on sensor and laboratory data. MIMO (Multiple Input Multiple Output) control problem is simplified to SISO (Single Input Single Output) problems by applying steady-state and dynamic simulations.

For the steady-state calculations Aspen PlusTM software is used, dynamic simulations are performed in Aspen Plus DynamicsTM and Aspen HYSYSTM applications.

Auszug

Ziel der vorliegenden Arbeit ist es, den Zusammenhang zwischen den thermodynamischen Eigenschaften der zu trennenden Gemische und der Struktur der Trennsysteme sowie den Aufbau der Regelungssysteme aufzudecken. Die Zusammenhänge wurden durch Lösung von vier Konstruktionsaufgaben untersucht, die sich auf Trennsysteme beziehen.

In der vorliegenden Arbeit wird die Steigerung der Energieeffizienz einer Drei-Produkt-Destillation über das Beispiel einer Trennwandkolonne vorgestellt. Die untersuchte Anlage trennt ein Benzol-Toluol-Xylol-Gemisch. Die Trennwand-Destillierkolonne verfügt neben den traditionellen Konstruktionsparametern über solche Planungsvariablen, die für die jeweilige Einrichtung spezifisch sind und deren Bestimmung beim Planen der Kolonne von hervorgehobener Wichtigkeit ist. Es wird vorgeführt, wie der Energieverbrauch der Trennwand-Rektifikationskolonne von der Position und Maße der Trennwand abhängt. Außerdem wurden Empfindlichkeitsprüfungen für die Änderung der Einspeisung durchgeführt.

Ebenfalls wird in dieser Arbeit die Planungsmöglichkeiten eines Mehrprodukt-Destillationssystems vorgestellt. Bei den Untersuchungen wurde ein Pyrogas-Trennsystem einer Olefin Fabrik konzipiert. Über ein Beispiel wird vorgeführt, dass durch Ordnen der Gemischkomponenten in die Reihenfolge der Siedepunkte und durch Anfertigung eines Differenz-Diagramms der Zusammensetzung und der Siedepunkte die Produkte des Trennsystems nach wirtschaftlichen Erwägungen ausgewählt werden können. Die Anwendung des Diagramms ermöglicht, die Begrenzungen zu definieren, die Stelle der einzelnen Verschnitte und der Schlüsselkomponente der Trennungen zu identifizieren. Mit Anwendung heuristischer Regel, mit Hilfe des Diagramms kann man die Trennungsreihenfolge bestimmen. Der Aufbau des Trennsystems lässt sich auch mit algorithmischer Methode bestimmen, bei dessen Anwendung alle Trennsysteme abgebildet werden, die zur Lösung des Trennproblems geeignet sind. Mit Verwendung der Simulationsergebnisse können die Separationssysteme mithilfe einer Kostenschätzfunktion in Reihenfolge gestellt werden, um den optimalen Aufbau festzustellen.

Die Arbeit geht auch auf den Betrieb der Destilliereinrichtungen ein. Das zweistufige Steuerungssystem einer Rektifikationssäule, die ein Benzol-Azeton-Gemisch auf zwei Produkte trennt, wurde durch Simulation studiert. Die Betriebsbereiche der genannten Destillationssäule wurden ebenfalls erfasst. Es wird demonstriert, dass das Regelungssystem innerhalb einem ausgewählten Betriebsbereich geeignet ist, die Kolonne zu regeln. In einem davon abweichenden Betriebsbereich ist die Änderung der Struktur des Regelungssystems notwendig. Mit Hilfe eines Simulators wurde auch ein zweistufiges Steuerungssystem erstellt, das die Qualitätsregelung einer Benzingemisch-trennenden Destilliersäule gewährleistet. Das Modell der Trenn-Destillieranlage wird auch mit den Messangaben von Mol Nyrt. verglichen. Die Qualität

definierende Eigenschaften sind auf direkter Art wirtschaftlich nicht messbar, deshalb wurden aufgrund von Betriebsdaten schätzende Berechnungen ausgeführt. Das MIMO- Problem (Multi Input, Multi-Output) der geregelten und eingreifenden Eigenschaften werden in dieser Arbeit durch stationäre und dynamische Untersuchungen auf SISO-Probleme (Single-Input, Single-Output) zersetzt.

Im Laufe der Arbeit wurden die Aspen Plus™ Simulationssoftware für stationäre, Aspen Plus Dynamics™ und Aspen HYSYS™ Software für dynamische Simulationsuntersuchungen verwendet.

Tartalomjegyzék

Bevezetés	1
Eszközök	2
1. Irodalmi összefoglaló.....	3
1.1 Szétválaszthatóság jellemzése.....	4
Termodinamikai tulajdonságok.....	6
Műveletre jellemző mutatószámok	9
Költségfüggvények	11
1.2 Komplex desztillálóberendezések.....	13
Hőszivattyú	14
Termikus csatolás.....	16
Osztott terű kolonna.....	17
1.3 Szétválasztási stratégia megválasztása.....	22
Szeparációs rendszer szintézis	23
1.4 Energetikai szempontok.....	25
Oszlopok energetikai vizsgálata.....	25
Hőintegráció.....	29
Szétválasztó rendszer felépítésétől független hatékonyságnövelés.....	30
1.5 Irányítási szempontok	30
Főbb zavarások	31
Szabályzókörok.....	31
2. Szétválasztó rendszerek kialakítása	38
2.1 Összetett rektifikáló oszlop vizsgálata.....	38
Osztott terű kolonna leképezése stationer szimulátorban.....	39
Hőátadás hatása.....	42
Falmagasság hatása.....	43
Függőleges pozíció hatása.....	45
Keresztmetszetarány hatása	46
Osztott terű kolonna energia kihasználása	48
Következtetés.....	49
2.2 Szétválasztási struktúra meghatározása	49
Szétválasztási feladat ismertetése	50
Kéttermékes rektifikáló meghatározása	52
Szétválasztási sorrend meghatározása a termodinamikai tulajdonságok alapján.....	53

Szétválasztási sorrend meghatározása algoritmikus módszerrel.....	56
Eredmények értékelése	59
Következtetés.....	63
2.3 Desztillációs oszlopok irányítása	64
Kéttermékes desztillálóoszlop irányítása	65
Kéttermékes desztillálóoszlopon végzett számítások tapasztalatai.....	83
Háromtermékes benzinfractionáló desztillálóoszlop irányítása	84
Háromtermékes desztillálóoszlopon végzett számítások tapasztalatai	94
3. Összefoglalás	96
4. Tézisek	98
5. Publikációk.....	100
6. Változók jegyzéke.....	102
7. Irodalom jegyzék.....	105
8. Mellékletek.....	111

Ábrajegyzék

1. ábra: Szétválasztási technikák osztályozása [3]	4
2. ábra: Egyensúlyi görbék ideális elegyekre.....	7
3. ábra: Gőz-folyadék egyensúlyok típusai	8
4. ábra: A kétkomponensű szétválasztások osztályozása.....	9
5. ábra: Hőszivattyús desztilláló berendezések típusai	15
6. ábra: Termikusan csatolt desztilláló berendezések típusai.....	17
7. ábra Az osztott terű (b) kolonna és a Petlyuk kolonna (a) zónái.....	19
8. ábra: Alsó válaszfallal ellátott osztott terű kolonna	20
9. ábra: Felső válaszfallal ellátott osztott terű kolonna	21
10. ábra: Különböző helyzetű falakkal ellátott osztott terű kolonnák [22]	21
11. ábra: Több termékes osztott terű kolonnák [29].....	22
12. ábra: Desztillációs oszlop nagy kompozit görbéjének meghatározása „Top-down” szemlélettel	27
13. ábra: Egy oszlop nagy kompozit görbéje	28
14. ábra: Direkt és indirekt kolonna sorrend hő integrációja	29
15. ábra: Fejnyomás szabályozás lehetőségei	32
16. ábra: Fejtermék minőség szabályozás lehetőségei	34
17. ábra: Fenéktermék minőség szabályozás lehetőségei	35
18. ábra: Fejnyomás szabályozás lehetőségei	36
19. ábra: Modell prediktív szabályozó sémája [65]	36
20. ábra: Adaptívhangolási séma PID szabályozó esetén [67].....	37
21. ábra: Adaptívhangolási séma modell alapú szabályozó esetén [68]	37
22. ábra: Háromtermékes szétválasztó rendszerek.....	39
23. ábra: Osztott terű kolonna folyadék fázis benzol koncentrácioprofil (ld. 1. Melléklet).....	41
24. ábra: Osztott terű kolonna folyadék fázis toluol koncentrácioprofil (ld. 2. Melléklet).....	41
25. ábra: Osztott terű kolonna folyadék fázis xilol koncentrácioprofil (ld. 3. Melléklet).....	42
26. ábra: Osztott terű kolonna hőmérséklet profil (ld. 4. Melléklet).....	42
27. ábra: Osztófal hőátadásának hatása a kiforráló energiaszükségletére (ld. 5. Melléklet).....	43
28. ábra Osztófal méretének hatása a kiforráló energiaszükségletére (ld. 6. Melléklet).....	43
29. ábra Osztófal méretének és az összetétel hatása (adatokat ld. 6. Melléklet; összetételeket ld. 5. táblázat).....	44
30. ábra: Osztófal pozíció hatása a kiforráló energiaszükségletére (ld. 7. Melléklet).....	45
31. ábra: Osztófal pozíció és az összetétel hatása (adatokat ld. 7. Melléklet; összetételeket ld. 5. táblázat).....	46
32. ábra: Keresztmetszetarány hatása a kiforráló energiaszükségletére (ld. 8. Melléklet).....	47

33. ábra: A keresztmetszetarány és az összetétel hatása (adatokat ld. 8. Melléklet; összetételeket ld. 5. táblázat).....	48
34. ábra Oldalelvételes és osztott terű kolonna kiforrálóinak energiaszükséglete (ld. 9. Melléklet)	49
35. ábra: A pirogáz összetétel és forráspont különbség diagramja (ld. 10. Melléklet)	51
36. ábra: Ökölszabályokkal megalkotott szétválasztórendszer, 1. elválasztás.....	55
37. ábra: Ökölszabályokkal megalkotott szétválasztórendszer, 2. elválasztás.....	55
38. ábra: Ökölszabályokkal megalkotott szétválasztórendszer, 3. elválasztás.....	55
39. ábra: Ökölszabályokkal megalkotott szétválasztórendszer, 4. elválasztás.....	55
40. ábra: Ökölszabályokkal megalkotott szétválasztórendszer, 5. elválasztás.....	55
41. ábra: Ökölszabályokkal megalkotott szétválasztórendszer, 6. elválasztás.....	55
42. ábra: Ökölszabályokkal megalkotott szétválasztórendszer, 7. elválasztás.....	55
43. ábra: Ökölszabályokkal megalkotott szétválasztórendszer, 8. elválasztás.....	55
44. ábra: Ökölszabályokkal megalkotott szétválasztórendszer felépítése.....	56
45. ábra: Melegenergia ára a hőmérséklet függvényében (ld. 14. Melléklet).....	57
46. ábra: Hidegenergia ára a hőmérséklet függvényében (ld. 15. Melléklet)	57
47. ábra: Algoritmusok az optimális szétválasztó rendszer meghatározására.....	58
48. ábra: Optimális nyomás meghatározása (ld. 16. Melléklet).....	59
49. ábra: Öttermékes elválasztó rendszerek kapcsolási lehetőségei.....	60
50. ábra: Négytermékes elválasztó rendszerek kapcsolási lehetőségei.....	60
51. ábra: Aceton - benzol elegy egyensúlyi összefüggés	66
52. ábra: Aceton - benzol elegyet szétválasztó kolonna dinamikus szimulátorának felépítése ..	66
53. ábra: Szabályozott jellemzők kiválasztása (ld. 17. Melléklet)	68
54. ábra: Különböző üzemi tartományok hőmérséklet profiljai (ld. 18. Melléklet).....	68
55. ábra: Beavatkozó jellemzők üzemi tartományai	69
56. ábra: Hiszterézis jelenség bemutatása a 27. tányérhőmérsékleten (ld. 19. Melléklet).....	70
57. ábra Aceton - benzol elegyet szétválasztó kolonna irányítási rendszerének szintjei	70
58. ábra: Aceton - benzol elegyet szétválasztó kolonna szabályzórendszere.....	71
59. ábra: Reflux tartály szintszabályozás – nyitott köri vizsgálat	72
60. ábra: Gőz tömegáram szabályozás (FC3) – nyitott köri vizsgálat.....	73
61. ábra: Nyomás szabályozás (PC) – nyitott köri vizsgálat.....	73
62. ábra: A gőz tömegáram szabályozás bemutatása	75
63. ábra: TC1 szabályozó nyitottköri vizsgálata (TC2 nyitott).....	76
64. ábra: TC1 szabályozó nyitottköri vizsgálata (TC2 zárt)	76
65. ábra: TC2 szabályozó nyitottköri vizsgálata (TC1 nyitott).....	76
66. ábra: TC2 szabályozó nyitottköri vizsgálata (TC1 zárt)	77

67. ábra: Aceton - benzol elegyet szétválasztó kolonna hőmérséklet szabályozás nyitott körű átmeneti függvényei.....	77
68. ábra: Aceton - benzol elegyet szétválasztó kolonna szétcsatoló szabályozása	78
69. ábra: TC2 szabályozókör működése alapjel váltás esetén	79
70. ábra: Nem lineáris rendszer viselkedés (ld. 20. Melléklet)	79
71. ábra: Aceton - benzol elegyet szétválasztó kolonna programozott adaptív szabályozási sémája	80
72. ábra: TC2 szabályozókör működése alapjel váltás esetén programozott adaptív hangolással	80
73. ábra: Erősítési tényező a reflux tömegáram és a gőz tömegáram függvényében (ld. 21. Melléklet).....	81
74. ábra: Aceton - benzol elegyet szétválasztó kolonna középső irányítási szintje	81
75. ábra: TC2 szabályozókörműködése alapjel váltás esetén	82
76. ábra: Gőz tömegárama TC2 szabályozókör alapjel váltás esetén	82
77. ábra: TC1 szabályozókör működése TC2 szabályozókör alapjel váltás esetén	83
78. ábra: Reflux tömegárama TC2 szabályozókör alapjel váltás esetén	83
79. ábra: Benzinfrafracionáló oszlop folyamatábrája.....	85
80. ábra: Ipari desztilláló oszlop szabályozókör felépítése a szimulációsorán	86
81. ábra: Ipari desztilláló oszlop alapszabályozók viselkedése a szimulációsorán.....	87
82. ábra: Valós rendszer és a szimulátor eredményeinek összehasonlítása	88
83. ábra: A becslés minősége a mérési értékekre vonatkoztatva	90
84. ábra: Minőségbecslések értékelése	91
85. ábra: Ipari desztilláló oszlop szabályozási struktúrája	92
86. ábra: Ipari desztilláló oszlop szimulációjának dinamikus viselkedés lépés teszt során	93
87. ábra: Ipari desztilláló oszlop minőségsszabályozásának működése	94

Táblázatjegyzék

1. táblázat: Szétválasztó műveletek bemutatása [4].....	5
2. táblázat: Az osztott terű kolonna és a Petlyuk kolonna zónái	18
3. táblázat: Kéttermékes berendezésekből felépülő szétválasztórendszerek variációinak száma	23
4. táblázat: A heurisztikus szabályok áttekintése	24
5. táblázat: A betáplálás összetétel tömegtörtben kifejezve	39
6. táblázat: Minimális kiforráló energiaszükségletekkel rendelkező keresztmetszetarányok	47
7. táblázat: Oldalelvételes és osztott terű kolonna paraméterei.....	48
8. táblázat: Szétválasztórendszer termékei.....	52
9. táblázat: Termékek összetétele.....	56
10. táblázat: Fejterméket feldolgozó szétválasztórendszerek költségrendje - 1. eset.....	62
11. táblázat: Fenékterméket feldolgozó szétválasztórendszerek költségrendje - 1. eset.....	62
12. táblázat: Fejterméket feldolgozó szétválasztórendszerek költségrendje - 2. eset.....	62
13. táblázat: Fenékterméket feldolgozó szétválasztórendszerek költségrendje - 2. eset.....	62
14. táblázat: Fejterméket feldolgozó szétválasztórendszerek költségrendje - 3. eset.....	63
15. táblázat: Fenékterméket feldolgozó szétválasztórendszerek költségrendje - 3. eset.....	63
16. táblázat: Nyitott körű vizsgálatok eredményei.....	74
17. táblázat: Aceton - benzol elegyet szétválasztó kolonna Bristol mátrixa	75
18. táblázat: Ipari desztilláló oszlop zavarásai	86
19. táblázat: Minőségbecslések változói	89
20. táblázat: Ipari desztilláló oszlop Bristol mátrixa.....	92

Rövidítések

BTX	Benzol, Toluol, Xilol
CAPEX	Capital Expenditure (Beruházási költség)
CGCC	Column Grand Composite Curve (Desztillációs oszlop nagy kompozit görbéje)
DCS	Distributed Control System
KPI	Key Performance Indicator (Kulcs teljesítmény mutató)
MILP	Mixed-Integer Linear Programming
MIMO	Multiple-Input and Multiple-Output (Több bemenetű, több kimenetű)
MPC	Model Predictive Control (Modell prediktív szabályozás)
OPEX	Operational Expense (Üzemeltetési költség)
PID	Proportional–Integral–Derivative
SISO	Single-Input and Single-Output (Egy bemenetű, egy kimenetű)

Bevezetés

A vegyiparban a folyadék elegyek szétválasztására megközelítőleg 95%-ban desztillációt alkalmaznak. A desztillációs készülékek működtetésére felhasznált energia az emberiség energiafelhasználásának kb. 3%-át teszi ki [1]. Így érthető, hogy a komponens szétválasztás és ezen belül a rektifikálás fontos és széles körűen kutatott, ugyanakkor semmilyen értelemben sem lezárt tématerület. Érdeklődésemet a következő gondolatsor keltette fel. A szétválasztási feladat egyértelműen meghatározza a kiindulási anyag (az input szétválasztandó komponens elegy) és a termékek (output komponens elegyek) tulajdonságait (összetétel, hőmérséklet, nyomás). A komponens elegyek állapotváltozói a termodinamikai törvények alapján meghatározzák az elegyek termodinamikai tulajdonságait, s ezen keresztül a szétválasztás lehetőségeit, korlátait. Kíváncsi voltam arra, hogy hogyan függ mindezekről a kialakítandó szétválasztó rendszer struktúrája, amely magába foglalja az egyes szétválasztó kolonnák belső szerkezetét és a szétválasztó rendszert alkotó kolonnák közötti kapcsolatokat? A megtervezett szétválasztó rendszer struktúrájától hogyan függ a megvalósítható technológiai objektum irányítási struktúrája? S mind-ezek együtt, hogyan befolyásolják a szétválasztó rendszer gazdasági mutatóit? Nyilvánvaló, hogy az ambiciózus kérdésfelvetésre egyértelmű, zárt gondolatmenettel nem válaszolhatunk, viszont az rákényszerít a teljes témakör alapos ok-okozati átgondolására, néhány fontos részlet kutatására, s mindezek összefüggéseire, gazdasági lehetőségeire és korlátaira. Ennek megfelelően széleskörű irodalmi áttekintést végeztem melyben feltártam, hogy a tervezés során milyen felépítésű szétválasztó rendszerek és milyen szabályozó rendszerek közül lehet választani. A gyakorlati munkában kiválasztottam négy tervezési feladatot melyek megoldása segített meghatározni azokat az általánosítható tanulságokat, amelyek megkönnyítik a választást a különböző struktúrájú szétválasztó illetve szabályozó rendszerek között. A módszer minden esetben egy konkrét esettanulmány definiálását és megoldását, majd az általános tanulságok levonását tartalmazza.

Így a desztilláló berendezések belső szerkezetét illetően foglalkozom az ipari érdeklődést is felkeltő, a hagyományostól eltérő, osztott terű kolonnák hatékonysági kérdéseivel. Az irodalmi kutatásaim során nem találtam olyan munkát, mely az osztott terű kolonnát úgy vizsgálja, hogy a konstrukcióra jellemző paramétereket változtatva bemutatja a kolonna energiaigény változását, ezért a tervezés során így határoztam meg az optimális felépítést. A tervezési feladat megoldásával továbbá arra kerestem választ, hogy a feldolgozandó komponens elegy tulajdonságai illetve az oszlopra jellemző speciális paraméterek milyen összefüggésben állnak egymással.

A második esettanulmányban egy iparilag jelentős feladat megoldásával foglalkoztam, ami a soktermékes szétválasztórendszer tervezését jelentette. A szétválasztó rendszerek tervezésének

egy ökölszabályokon és egy feltételes szélsőérték megoldáson alapuló megoldás vizsgálatával próbáltam olyan a betáplálási illetve a termékekelegyek termodinamikai tulajdonságait figyelembe vevő ökölszabályt alkotni, amit gazdaságilag lehet igazolni. A vizsgálatok során létrehoztam egy alkalmazást, mely a szétválasztási feladat definiálása után, az összes lehetséges szétválasztó rendszert leképezi (ez technikailag egy komoly feladat volt). Majd a szétválasztórendszerek gazdasági értékelése után általánosítható következtetéseket vontam le.

Végül egy kéttermékes és egy ipari háromtermékes kolonna hierarchikus irányítási rendszerének kialakításával foglalkoztam, a berendezések kiválasztásánál figyelembe vettem, hogy olyan berendezések szabályozórendszer tervezését mutassam be, amelyek széles körben elterjedtek az iparban, így nagyjelentőségűek. A vizsgálatokban próbáltam feltárni hogyan változhat a szabályozórendszer szerkezete a szabályozott paraméterektől illetve a szabályozott objektum viselkedésétől, amit a termodinamika határoz meg. A kéttermékes oszlop üzemeltetési vizsgálatában feltártam az üzemeltetés tartomány jellegükben különböző stacionárius karakterisztikákkal jellemezhető területeit. A vizsgált karakterisztikák befolyásolják az oszlop irányítási rendszerét, így tartományonként különböző irányítási struktúrát kell alkalmazni. Ennek a jelenségnek a feltárásával bemutattam a termodinamikai tulajdonságok és az oszlop irányítási struktúrája közötti összefüggést. A háromtermékes kolonna vizsgálatában előkészítettem egy modell prediktív szabályozó alkalmazását, megalapoztam a minőség (koncentráció) becsléseket és szimulációval elvégeztem az előzetes modell alkotáshoz szükséges kísérleteket.

Eszközök

A dolgozatban leírt stacionárius vizsgálatokhoz Aspen PlusTM szimulációs szoftvert alkalmaztam. A vizsgálatok elvégzéséhez Excel-Visual Basic alkalmazásokat készítettem. A számításokban a Microsoft Excel - Aspen PlusTM kapcsolatot az Aspen Simulation Workbook segítségével hoztam létre.

A dinamikus szimulációs vizsgálatokban Aspen Plus DynamicsTM és Aspen HYSYSTM szoftvereket alkalmaztam. A szabályozórendszert Matlab SimulinkTM szoftverben hoztam létre. A két szoftver a Simulink-be beépített blokk segítségével kommunikált, amely időben szinkronizálta a két programot.

A kiegészítő számításokat (rendszerillesztés, gazdasági számítások, ábrázolások) MatlabTM, R studio és Microsoft Excel segítségével végeztem el.

1. Irodalmi összefoglaló

A vegyipari technológiák többsége a terméket előállító reaktorrendszerből, a termékek és az alapanyagok tisztítására szolgáló szétválasztó rendszerekből épülnek fel. A szétválasztó rendszerek megfelelő tervezése és irányítása nagy jelentőségű, hiszen ezektől függ a termék minősége és az üzem energiateljesítménye, amelyek jelentősen befolyásolják a gazdasági eredményt is.

A szétválasztó rendszerek tervezését a szeparációs művelet kiválasztásával kell kezdeni. A szétválasztandó komponensek tulajdonságaitól függ, hogy milyen szétválasztási technikával, milyen mértékben lehet szeparálni azokat, a gazdaságosság figyelembe vételével. A szétválasztó rendszerek tervezésénél tapasztalatok és ökölszabályok (4. táblázat) segítségével választják ki a megfelelő műveletet a szétválasztási feladat ismeretében, az anyagáramok komponenseinek tulajdonsága alapján.

A szétválasztó rendszer tervezésének különböző szintjei vannak és az egyes szinteken különböző mutatószámok segítségével csökkentik a lehetséges alternatívák számát. A tervezés szakaszaiban előre haladva egyre részletesebben dolgozzák ki a technológiát, így a lehetséges szétválasztó rendszerek halmaza - ami közül választani kell- egyre nagyobb. Ezért lényeges, hogy minden döntési szinten a lehető legjobban le kell csökkenteni a tovább vizsgálandó lehetőségek számát úgy, hogy a tervezés végén kiválasztott szétválasztó rendszer gazdaságilag a legjobb legyen. Az alkalmazott mutatószámok lehetnek tisztán az anyagok termodinamikai tulajdonságait jellemző számok, vagy az adott szétválasztó műveletre jellemző paraméterek. A szétválasztó rendszerek jellemzésére szintén alkalmasak a különböző költségfüggvények [2]. A dolgozatban bemutatom a szétválasztó rendszerek tervezését egy háromtermékes szétválasztás, valamint egy sokkomponensű szétválasztás példáján keresztül. Meghatározom azokat a mutatószámokat, amelyek az adott döntési szituációban megfelelőek a lehetséges szétválasztó rendszerek számának csökkentésére. Valamint az adott tervezési szintnek megfelelően meghatározom a legjobb szétválasztási struktúrát. Az irodalmi összefoglalóban áttekintem azokat a területeket, melyek fontosak a desztillációs rendszerek tervezésében.

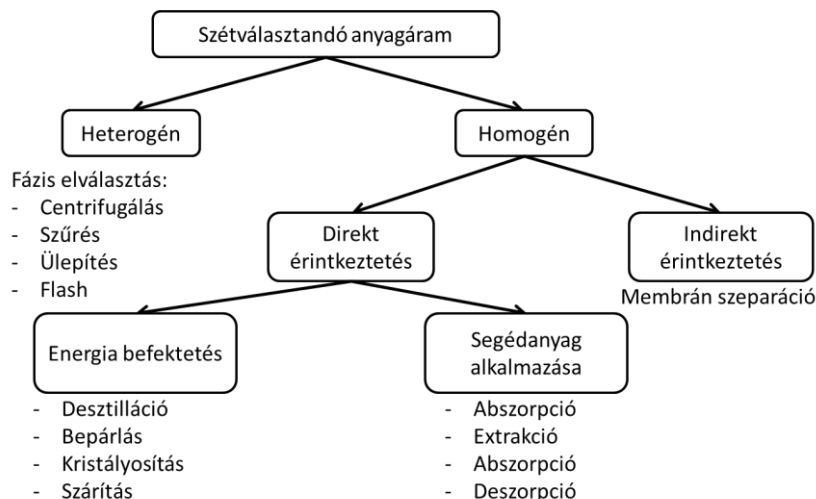
A szétválasztó rendszerek üzemeltetése során a cél a meghatározott minőségű és mennyiségű termék előállítása az adott berendezésekkel elérhető minimális üzemeltetési költség ráfordításával. A rendszereket működésük során mért és nem mért zavarások érik, ezek kompenzálására szabályzó rendszereket alkalmaznak. Az irodalmi összefoglalóban áttekintem a desztillációs berendezések főbb szabályozási sémáit, és bemutatom az üzemeltetés során fellépő kihívásokat.

A rektifikálás energetikai vizsgálata széles körben kutatott, ezeknek a célja a minél jobb hatásfokú szeparációs rendszer kialakítása. Ezzel a témával külön foglalkozom az irodalmi összefoglalóban.

1.1 Szétválaszthatóság jellemzése

A szétválasztási műveletekben energia befektetés árán érhető el, hogy a szétválasztani kívánt komponensek eltérő fizikai és kémiai tulajdonságuk alapján dúsuljanak fel a különböző fázisokban. A fázisokat külön térbe vezetve érhető el, hogy a koncentrációkülönbség megmaradjon. A szétválasztási műveletek túlnyomórésze két fázis egyensúlyán alapul, így két részre bontható a szétválasztandó komponenselegy. Az is nyilvánvaló, hogy a szétválaszthatóság jellemzésére legjobban alkalmazható mutatószámok a fázis egyensúlyt leíró fizikai és kémiai egyenletek paraméterei. Ezeknek a paramétereknek a segítségével kiválaszthatók a szétválasztási feladat megoldására alkalmas műveletek.

A megfelelő szeparációs technikát a szétválasztani kívánt elegy tulajdonságai (amelyek meghatározzák a fázisokban a komponensek eloszlását) és a szétválasztással szembeni igény határozza meg (ld. 1. ábra). Ha a szétválasztandó anyagáram heterogén (több fázis van jelen), és a szétválasztandó komponensek megfelelő mértékben dúsulnak a fázisokban, akkor a szétválasztási feladat a fázisok elkülönítésére szűkül. Ezt a feladatot fázis szeparációval lehet elvégezni (centrifugálás, szűrés, ülepités, flash szeparáció). Homogén elegyek esetén a megfelelő technika kiválasztása függ a szétválasztani kívánt komponensek tulajdonságaiból adódó korlátoktól, és gazdasági megfontolásoktól.



1. ábra: Szétválasztási technikák osztályozása [3]

A homogén anyagáramok szétválasztása esetén választhatunk membrán műveleteket, melyekben a fázisok direkt módon nem érintkeznek. Ezen kívül direkt fázisérintkeztetésen alapuló technika alkalmazása is lehetséges (desztilláció, bepárolás, kristályosítás, abszorpció, extrakció). A közvetlen fázisérintkeztetést létrehozhatjuk segédanyag alkalmazásával, valamint energia

befektetésével. Az iparban ezeket a technikákat és ezek kombinációit alkalmazzák. A szétválasztó műveleteket a 1. táblázat szemlélteti

1. táblázat: Szétválasztó műveletek bemutatása [4]

Módszer	Szétválasztandó elegy halmazállapota	Szükséges anyag, energia	Képződő vagy segéd fázis	Alkalmazott fizikai tulajdonság
Hagyományos desztilláció	Folyadék és/vagy gőz	Hőátadás vagy kompresszió	Folyadék vagy gőz	Eltérő illékonyság
Azeotróp desztilláció	Folyadék és/vagy gőz	Hordozó anyag és hőátadás	Folyadék vagy gőz	Eltérő illékonyság
Sztripplés	Folyadék	Gőz, hőátadás	Gőz	Eltérő illékonyság
Extraktív desztilláció	Folyadék és/vagy gőz	Oldószer és hőátadás	Folyadék vagy gőz	Eltérő illékonyság
Folyadék-folyadék extrakció	Folyadék	Oldószer	Extrahálószer	Eltérő oldódás
Szuper kritikus extrakció	Folyadék vagy gőz	Szuperkritikus oldószer	Szuperkritikus halmazállapot	Eltérő oldódás
Gázabszorpció	Gáz	Folyadék abszorbens	Folyadék	Eltérő illékonyság
Gáz adszorpció	Gáz	Szilárd adszorber	Szilárd	Szelektív megkötődés
Folyadék adszorpció	Folyadék	Szilárd adszorber	Szilárd	Szelektív megkötődés
Membrán	Folyadék vagy gőz	Membrán	Membrán	Különböző molekula méret
Kristályosítás	Folyadék	Hőátadás	Szilárd	Eltérő oldódás vagy olvadáspont
Szárítás	Szilárd vagy folyadék	Hőátadás	Gőz	Eltérő illékonyság
Kifagyasztás	Gőz	Hőátadás	Szilárd	Eltérő illékonyság

A desztilláció a történetileg kialakult leggyakoribb elválasztó művelet, melyet a folyadékelegyek komponens szétválasztására alkalmaznak. Ez egy olyan fizikai elválasztó művelet, melynél energia befektetés hatására az elegyek komponensei különböző illékonyságuk alapján dúsulnak fel a különböző fázisokban. Az eltérő illékonyságú vegyületeket tartalmazó rendszer esetén a folyadékkal érintkező és vele egyensúlyban lévő gőzfázisban az alacsonyabb forráspontú komponensek dúsulnak. Ezt a jelenséget hasznosítjuk a desztillációnál ill. a rektifikálásnál.

Az ipari gyakorlatban desztillációs műveletként a legtöbb esetben az ismételt lepárlást, az ún. rektifikálást alkalmazzák. A rektifikálás főbb jellemzője, hogy egy műveleti egységen belül több szétválasztó egység található, egy berendezésben végzik a szétválasztást ez alapján a rektifikálás

egy műveletnek tekinthető. Egy egyensúlyi egységnek nevezzük a készülék azon részét, melyben a gőz – folyadék komponens - és hő egyensúly (a távozó áramokra) teljes mértékben kialakul. [5]

Mivel a legelterjedtebb szétválasztóművelet a rektifikálás, így a legtöbb üzemeltetési és tervezési tapasztalat ehhez a rendszerhez tartozik. Emiatt a szétválasztási technika kiválasztásában az első kérdés, hogy az adott szétválasztási feladat megoldható-e desztillációval. A desztilláció a következő esetekben nem alkalmazható, vagy az alkalmazása költséges:

- A szétválasztandó komponensek illékonyága közel azonos (kis forráspont különbség).
- Azeotróp képződés.
- A nagyobb forráspontú termék (nehezebb termék) kis mennyiségű.
- A komponensek hőhatásra bomlanak, vákuum desztilláció esetén is.
- A szétválasztani kívánt elegy extrém korrozív tulajdonságúak, vagy koszolódást okoz.

A megfelelő szétválasztási technika kiválasztása után a cél a szétválasztó rendszer felépítésének meghatározása. A desztilláló rendszerek tervezésénél meg kell határozni a készülékek számát és konstrukcióját, valamint a köztük lévő anyag és energia kapcsolatokat. A műveleti tervezés során meghatározzák a készülékek méreteit úgy, hogy az adott üzemeltetési körülmények között a fázisok megfelelő érintkeztetése megvalósuljon. Az elválaszthatóság korlátaira sok esetben a szétválasztó rendszer tervezésénél alkalmazott mutatószámok szélsőértékeiből lehet következtetni. Ezek a korlátok befolyásolhatják a szeparációs technika alkalmazhatóságát, ill. a szeparációs rendszer felépítését. A mutatószámok általában a fázisegyensúlyt leíró egyenletek paramétereit, leggyakrabban a relatív illékonyágot tartalmazzák.

Termodinamikai tulajdonságok

Kétkomponensű rendszer szétválaszthatóságát a relatív illékonyággal jellemezhetjük, ez a két komponens illékonyágának hányadosa:

$$\alpha_j^i = \frac{K_i}{K_j} = \frac{y_i/x_i}{y_j/x_j}. \quad (1)$$

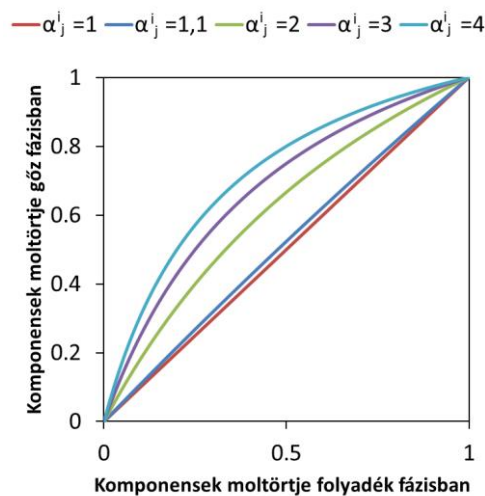
Ha a komponensek illékonyágai között kicsi a különbség (a relatív illékonyág közel 1), abban az esetben az elegy nehezen szétválasztható, mivel a gőz és a folyadék fázisban a komponensek koncentrációja közel azonos. Minél nagyobb a relatív illékonyág értéke, annál könnyebb az adott komponenseket desztillációval szétválasztani. Az illékonyág függ a rendszert alkotó komponensek anyagminőségétől és az összetételtől, a nyomástól és a hőmérséklettől.

Megfigyelhető, hogy ha a komponensek illékonyasága minél jobban eltér annál nagyobb a két vegyület közötti forráspontkülönbség. Ez alapján a szétválaszthatóságot jellemezhetjük a forráspontjaik különbségével is.

A kétkomponensű elegyeknél a gőz összetételét egyértelműen meghatározzák a komponensek relatív illékonyaságai és a folyadék összetétele az adott nyomáson. A relatív illékonyasággal a vizsgált komponens móltörtben meghatározott egyensúlyi koncentrációja az alábbi egyenlet alapján számítható:

$$y_i = \frac{\alpha_j^i \cdot x_i}{1 + (\alpha_j^i - 1)x_i} \quad (2)$$

Ezt az összefüggést felhasználva megkapjuk a vizsgált két komponensre jellemző egyensúlyi görbét (ld. 2. ábra). Ez a diagram az illékonyabb komponens összetételét ábrázolja a gőz fázisban a vele egyensúlyban lévő folyadékelegy koncentrációjának függvényében, adott nyomáson. Ezzel a karakterisztikával könnyen jellemezhetjük az elegy szétválaszthatóságát. Ideális kétkomponensű folyadékelegyeknél a relatív illékonyaság állandó az egész folyadék koncentráció tartományra vonatkoztatva.

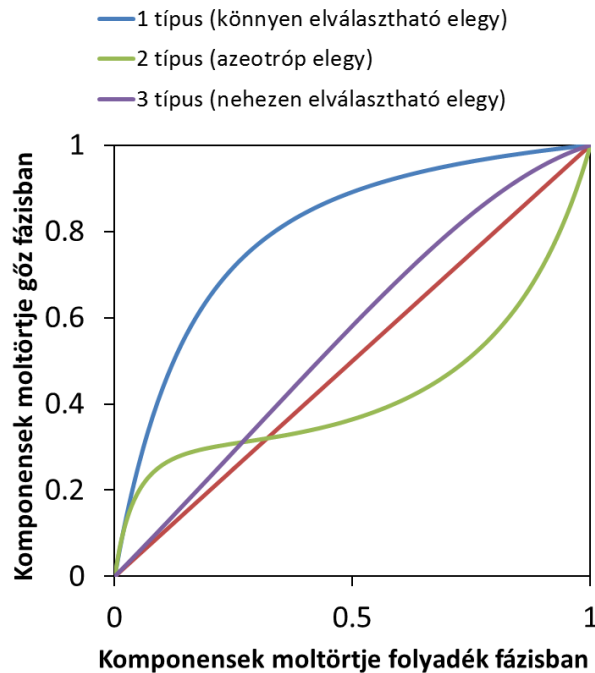


2. ábra: Egyensúlyi görbék ideális elegyekre

Ennek a karakterisztikának a segítségével következtethetünk a szétválasztás korlátaira és a nehézségeire. Abban az esetben, ha a relatív illékonyaság értéke 1, a folyadék és a gőz fázis koncentrációja megegyezik, ezt azeotróp koncentrációnak nevezzük. Ennél a gőz összetételét ábrázoló görbe keresztezi a 45°-os egyenest. Ez a pont termodinamikai korlátja a desztillációnak.

A szétválasztás szempontjából alapvető termodinamikai tulajdonság az adott nyomáson érvényes gőz-folyadék egyensúlyi összefüggés. Mivel a forralás művelete relatíve gyors folyamat, a kinetika nem játszik alapvető szerepet a rektifikáló rendszerek tervezésében és irányításában.

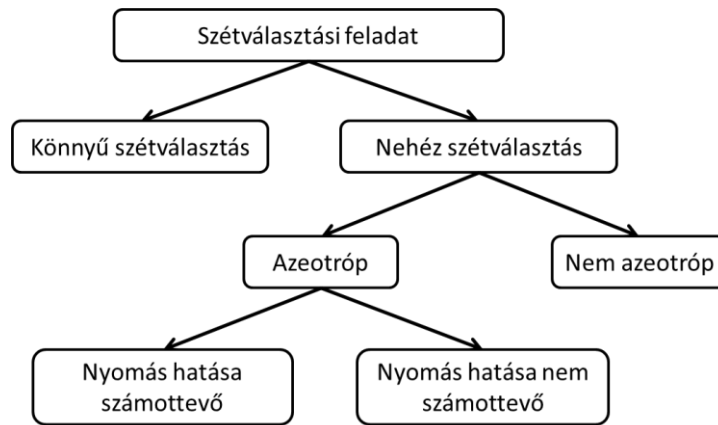
A 3. ábra a három legjellemzőbb biner elegy gőz-folyadék egyensúlyi összefüggését szemlélteti. A biner elegy szétválasztási korlátait meg lehet állapítani e karakterisztikák segítségével.



3. ábra: Gőz-folyadék egyensúlyok típusai

A szétválasztás „nehézsége” ill. „lehetetlensége” a szétválasztandó elegy összetételétől és a két termék specifikációjától függ. Az 1. típusú egyensúlyi összefüggés (pl.: benzol – toluol elegy) a teljes koncentráció tartományban viszonylag könnyű elválasztási feladatot jelent, a tökéletes elválasztáshoz persze végtelen egyensúlyi egység tartozna. A 3. típusú görbe (pl.: víz - aceton elegy) a 0,1 koncentráció alatti tartományban jelent praktikus megoldhatatlan feladatot. Az azeotrópot képező elegyeknél (2. típus pl.: víz - etanol elegy), a minimum (esetleg maximum) forráspont (az egyensúlyi összefüggés itt metszi a 45°-os egyenest) által kettéosztott különböző koncentráció tartományba eső specifikációk esetén az elválasztás lehetetlen. Ha a nyomás a minimális (maximális) forráspont helyét érdemben megváltoztatja, akkor két különböző nyomás szintű kolonnában a kettéválasztás elvégezhető (összetett probléma), azonban ez a megoldás jelentős többletköltséget von maga után.

A kétkomponensű elegyeket a 4. ábra szerint osztályozhatjuk. Ha egy konkrét elválasztási feladatot kell osztályozni, a specifikációktól függően előfordulhat, hogy egy elegyet több csoportba is lehet sorolni.



4. ábra: A kétkomponensű szétválasztások osztályozása

A kétkomponensű elegyek esetén a szétválasztandó elegyet és a termékek összetételét egyértelműen meghatározza az egyik (pl. a nagyobb illékonyaságú) komponens koncentrációja. A biner elegyet egyszerű rektifikálóval szétválasztva az illékonyabb komponens koncentrációja a fejtermékben a legnagyobb, a fenéktermékben a legkisebb, a betáplálási összetétel a két koncentráció érték közé esik. Kéttérmeles szétválasztás esetén ezeket a koncentrációkat kell meghatározni a szétválasztási feladat definiálásánál. Tiszta (0 - és 100%-os), és azeotróp koncentrációjú termék nem definiálható.

Az előbbi termodinamikai megfontolásokat figyelembe véve, akkor megoldható a szétválasztási feladat egy lépésben, ha a fej és fenéktermék által meghatározott koncentrációtartományban nincs azeotróp pontja az adott biner elegynek.

Műveletre jellemző mutatószámok

A desztilláló berendezések hálózatának tervezése során általában a szétválasztási struktúrák közül úgy választunk, hogy összehasonlíttjuk az egyes szétválasztási lépések relatív „nehézségét”. Ezt a rektifikáló oszlopok és a szétválasztási hálózat tervezésénél alkalmazott mutatószámok és karakterisztikák alkalmazásával határozhatjuk meg.

A desztilláló oszlopok tervezésére ún. „short-cut” eljárásokat alkalmaznak, ezekkel kiszámolható a szükséges minimális egyensúlyi egység szám [6], amit minimális elméleti tényérszámnak is nevezünk, ez megmutatja, hogy a szétválasztás elvégzéséhez a készüléken belül hányszor kell a folyadék-gőz egyensúlynak kialakulnia:

$$N_{\min} = \frac{\ln \left(\frac{[x_D / (1 - x_D)]_{\text{dist}}}{[x_B / (1 - x_B)]_{\text{bot}}} \right)}{\ln(\alpha_{\text{avg}})} \quad (3)$$

Ezekkel a módszerekkel szintén meghatározható a szétválasztásra jellemző minimális refluxarány [7] igénye, ami megmutatja, hogy az elválasztási feladat végrehajtásához minimum mennyi folyadékot kell a kolonnába visszavezetni a fejtermékhez arányosítva:

$$R_{\min} = \frac{1}{\alpha_{\text{avg}} - 1} \cdot \left[\frac{x_D}{x_F} - \frac{\alpha_{\text{avg}}(1 - x_D)}{1 - x_F} \right]. \quad (4)$$

Az összefüggések kettő és sok komponens szétválasztása esetén is alkalmazhatók, tartalmazzák a relatív illékonyt és az elválasztást jellemző koncentrációkat. A szétválasztás annál nehezebb minél nagyobb a számított minimális tényérszám vagy a minimális refluxarány. Ezért ezek a mutatószámok alkalmazhatók a szétválasztási feladat korlátainak megállapítására is. Kimondható, hogy a feladat megoldható, ha a minimális refluxarány és a minimális egyensúlyi egységyszám értéke véges értékű pozitív szám. A gyakorlatban tapasztalati felső korlátokat adnak meg ezeknél a mutatószámoknál. Például a minimális tényérszám nem lehet több 100-nál, de ezt a korlátot mindig gazdasági számításokkal kell alátámasztani.

A short-cut módszerekkel a kolonnák kiforrálási és kondenzációs energia igényét is meg lehet határozni, ezeket a paramétereket szintén elterjedten alkalmazzák szétválasztó rendszerek jellemzésére.

A rektifikáló rendszerek struktúráját meghatározó módszerek alkalmazásánál is jellemezni akarták a szétválasztás nehézségét. Ezért az előző mutatószámok mellett olyan indexszámokat is meghatároztak, melyekkel minősíthetők a szétválasztási feladatok. Ezek sokszor az előbbieken bemutatott paraméterek (minimális tényérszám, minimális reflux, relatív illékonyt) függvényei.

A két leggyakrabban használt mutatószám közül az egyik a szeparáció nehézségét „coefficient of difficulty of separation” (C_{DS}):

$$C_{DS} = \frac{\log\left(\frac{x_{HK}}{1-x_{HK}} \cdot \frac{x_{LK}}{1-x_{LK}}\right)}{\log(\alpha_{LK/HK})} \cdot \frac{F_D}{F_D + F_B} \cdot \left(1 + \left|\frac{F_D - F_B}{F_D + F_B}\right|\right), \quad (5)$$

a másik az elválasztás könnyűségét jellemzi „coefficient of ease of separation” (C_{ES}) [7, 8, 9, 10]

$$C_{ES} = r \cdot \Delta i. \quad (6)$$

r : termékáramok aránya F_D/F_B vagy F_B/F_D , attól függően, hogy melyik a kisebb (mol/mol);

Δi : a szétválasztandó komponensek közti forráspont különbség, vagy $(\alpha_{LK/HK}-1) \cdot 100$

Az előző szétválasztást jellemző mutatószámokból láthatók, hogy függvényei a relatív illékonyságnak. Ez alapján a relatív illékonyság nagy hatással van a berendezések méreteire és energia felhasználására. A relatív illékonyságnak az értéke változik az alkalmazott nyomástól. Így, hogy az egyes szétválasztási feladatok összehasonlíthatók legyenek, meg kell határozni az alkalmazott nyomást. Az üzemi nyomás meghatározására egy tapasztalati összefüggést ajánlanak [12]:

$$\ln(p_D) = \frac{1751}{T_{FB} + 273} - 6,777. \quad (7)$$

A rektifikálást jellemző műveleti mutatószámok közül ezek a legjelentősebbek, alkalmazásukkal megállapítható a megfelelő elválasztási sorrend, ami az egyes termékek közötti vágások sorrendjét jelenti. A heurisztikus szabályok bemutatásánál, a későbbiekben példán keresztül szemléltetem ezeknek az ismereteknek az alkalmazását.

Költségfüggvények

A tervezés célja, hogy meghatározzuk a gazdaságilag leghatékonyabb szétválasztórendszert, ezért a tervezésnél ki kell számítani a berendezések lehetséges költségeit. Ezt különböző költségbecslő módszerekkel lehet megtenni, melyek segítségével összehasonlíthatunk több azonos szétválasztási feladatot megoldó szétválasztórendszert. Így ezeket a becslő módszereket alkalmazva a tervezés során olyan mutatószámmal jellemezhetjük a szétválasztórendszereket mely a lehető legjobban elősegíti a gazdasági cél megvalósítását.

A gazdasági függvények figyelembe vehetik a szétválasztás energia költségét az üzemeltetési költségen (OPEX) keresztül, a berendezés méreteit a beruházási költségen (CAPEX) keresztül [13]. Ezeket összegezve megkapjuk a berendezés összes költségét. Ezzel a megközelítéssel azt is elemezhetjük, hogy megváltozott piaci körülmények között melyik szétválasztórendszer lehet a leghatékonyabb.

A becslőmódszerek kiválasztásánál figyelembe kell venni a szétválasztórendszer gazdasági hatékonyságát legjobban befolyásoló tényezőket. Például, ha a termékek ára nagymértékben változik a tisztasággal, akkor a gazdasági függvénybe ezt a hatást is be kell építeni. Így ezekkel a függvényekkel meg lehet határozni meddig lehet tisztítani a termékeket.

Egy szétválasztó rendszer költségét általánosan a megfelelő időintervallumokra vetített üzemeltetési és a beruházási költségek összege határozza meg

$$COST = \frac{\sum i CAPEX}{\tau} + \sum i OPEX . \quad (8)$$

Az amortizációs idő segítségével az időegységre vonatkoztatott beruházási költséget lehet meghatározni Mivel a dimenziójuk azonos, ezért összegezhető az üzemeltetési költséggel. Előnye ennek a függvénynek, hogy az alkalmazásával mind az üzemeltetési mind a beruházási költséget figyelembe lehet venni a tervezésnél. Hátránya, hogy az amortizációs időt (megtérülési időt) a feladat elején definiálni kell, így a beruházási és üzemeltetési költségek arányát előre meghatározzuk. A termékárak és alapanyagárak ismeretében a gazdasági függvényt az egyszerűsített megtérülési időre lehet rendezni, a megtérülési időt minimalizálva kapjuk meg a gazdaságilag legjobb szétválasztó rendszer struktúráját.

A beruházási költség alapvetően a műveleti egység méretétől és szerkezetianyagától függ [14]:

$$\begin{aligned} i CAPEX = & \frac{M \& S}{323} \cdot f_1^i + C_b^i + N^i \cdot f_2^i \cdot f_3^i \cdot f_4^i + C_{p1}^i + \\ & \dots \frac{M \& S}{280} \cdot 328 \cdot \left(\frac{\Delta H_{kiforráló}^i}{11250} \right)^{0,65} \cdot V_{goz,i}^{0,65} + \\ & \dots \frac{M \& S}{280} \cdot 328 \cdot \left(\frac{\Delta H_{kondenzátó}^i}{5000} \right)^{0,65} \cdot V_{foly,i}^{0,65} \end{aligned} \quad (9)$$

A vizsgálataimban alkalmazott összefüggés figyelembe veszi a nyomás hatását is, mivel a C_b változó a köpeny tömegével arányos, így a falvastagsággal is, ami a nyomás függvénye.

Az üzemeltetési költséget a berendezés hűtési és fűtési szükségletének és a segédenergia fajlagos árának szorzata adja:

$$i \text{ OPEX} = \Delta H_{\text{kiforráló}}^i \cdot C(T)_{\text{fűtés}} + \Delta H_{\text{kondenzátor}}^i \cdot C(T)_{\text{hűtés}} \cdot \quad (10)$$

A rektifikáló oszlop fej- és fenékhőmérséklete meghatározza az alkalmazható segédenergiákat. A fajlagos segédenergia árakat a hőmérséklet függvényében lehet megadni. Az egyes segédenergiák meghatározott hőmérséklet tartományban használhatók, a tartományokat a hajtóerő nagysága és a segédközegek hőmérsékletei befolyásolják. A fajlagos energiaárak annál nagyobbak, minél jobban eltér az alkalmazási hőmérséklet a környezeti hőmérséklettől.

Gazdasági szempontból az a szétválasztási feladat oldható meg, amelyre alkotható olyan szétválasztó rendszer, aminek a beruházási költsége meghatározott időintervallumon belül megtérül. Az időkorlátot a beruházó vállalat határozza meg. A megtérülési idő a beruházási költség és az átlagos évi nyereség hányadosa:

$$\tau = \frac{\text{CAPEX}}{\text{Inc-OPEX}}, \quad (11)$$

az egyes elemek a következő tényezőktől függenek:

- Bevétel a termékekből: a termék tisztaságtól, mennyiségétől (ezt a tervezés korai szakaszában meghatározzák) és a piaci viszonyoktól (ezt nem tudjuk befolyásolni) függ.
- Beruházási költség: az elméleti egyensúlyi egység számtól és az oszlopban áramló fázisok mennyiségétől és a nyomástól, valamint a szétválasztandó komponensek tulajdonságaitól (pl. korróziós) függ.
- Üzemeltetési költség: az előző tényezőktől függ.

A piac, mint külső feltétel befolyásolja a végtermék árát, ezáltal a szétválasztási feladatot a piaci követelményeknek megfelelően kell meghatározni. Gyorsan változó piaci feltételek mellett a szétválasztó rendszert úgy kell megtervezni, hogy az alkalmas legyen a termékeket gazdaságosan elválasztani egy meghatározott koncentráció tartományban.

1.2 Komplex desztillálóberendezések

A hagyományos desztilláló kolonnák műveleti paramétereinek meghatározása rutin feladat. Azonban gazdasági cél, hogy ezek a készülékek a szétválasztási feladatot a lehető legkisebb költséggel oldják meg. Ezért a kutatók olyan a hagyományostól eltérő kolonna konstrukciókkal is foglalkoznak, amelyek növelhetik a desztilláció hatásfokát, ezzel csökkentve a szétválasztórendszerek üzemeltetési és beruházási költségét [15]. Ezeket a kolonnákat összetett, ill. komplex oszlopoknak nevezem.

Ha a szétválasztási feladat célja a betáplálási anyagáramot kettőnél több termékre szeparálni, akkor ez lehetséges hagyományos desztilláló kolonnák sorba kapcsolásával, valamint többtermékes oszlopok alkalmazásával. Ha a többtermékes szétválasztási feladatot hagyományos oszlopok hálózatával oldják meg, akkor az egyes szétválasztó berendezések két részre bontják a betáplált áramot, ezzel a szétválasztási feladatot két részfeladatra dekomponálják. Ezek a fej- és fenéktermékek szétválasztása. Az egyes részfeladatok megoldásánál szintén el kell dönteni, hogy hagyományos illetve többtermékes berendezéssel oldják-e meg [16].

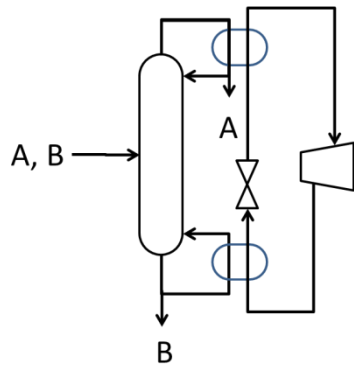
A szétválasztási struktúra meghatározása után meg kell határozni az egyes szétválasztó berendezések konstrukcióját. A lehetséges konstrukciók száma a többtermékes berendezések esetén általában több mint a hagyományos oszlopok esetén, mivel a több műveleti paraméter értékét kell meghatározni.

Hőszivattyú

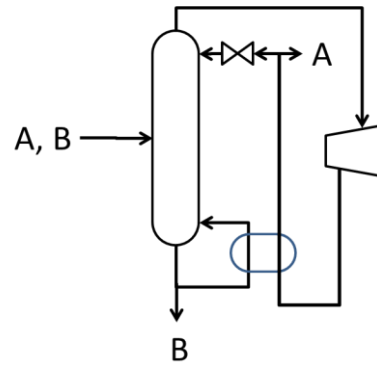
A kéttermékes desztilláló oszlopok egyik elterjedt komplex konstrukciója az ún. hőszivattyús rendszer. Ezek alkalmazása az üzemeltetési költségcsökkentés egyik módszere. Hőszivattyús oszlopoknak nevezzük azokat a konfigurációkat, melyek az oszlop tetején kilépő gőzállapotú áram kondenzációs hőjét az oszlop alján kilépő folyadék forralására hasznosítják. Egyetlen oszlopon belül ez közvetlenül nem lehetséges, mert az oszlop fejhőmérséklete alacsonyabb, mint a fenék hőmérséklet és ez a reláció nem változik az oszlop nyomásával. Ezért a kolonnából kilépő áramok nyomását úgy kell változtatni, hogy meglegyen a minimális hőmérsékletkülönbség a berendezés hőcserélőjébe belépő áramok között. Az 5. ábra négy különböző típusú hőszivattyús konstrukciót szemléltet. A hőszivattyús rendszereket akkor gazdaságos alkalmazni, ha a termékek forráspontjai közel esnek egymáshoz és a termékáramok mennyisége közel azonos [16, 17]. Például, az iparban a propán-propilén komponensek szétválasztását gyakran hőszivattyús desztillációval végzik, ezeknek a komponenseknek a forráspont különbsége $\sim 5,6^{\circ}\text{C}$.

- a. eset:** munkaközeg segítségével közlik, ill. vonják el a hőt: A kondenzátorban elvont hőt egy munkaközeg veszi fel, mely közben elpárolog. Ezután a közeg nyomását megemelik, mialatt a hőmérséklete addig emelkedik, hogy a hőtartalmát a kiforralóba le tudja adni a minimális hajtóerőt figyelembe véve. A kiforralóból távozó munkaközeg expandál, a hőmérséklete lecsökken, így a kondenzátoron a hajtóerő ismét megfelelő mértékű.
- b. eset:** fejtermék kompressziója: A kolonna tetején kilépő fejtermék nyomásszintjét kompresszor segítségével megemelik, ezért az áram hőmérséklete is emelkedik, így a kiforralóba át tudja adni a hőenergiáját. A kiforralóból kilépő áram egy részét expandáltatják, mely során lehül és teljesen kondenzál, majd visszavezetik refluxnak. Az áram többi részét fejtermékként elveszik.

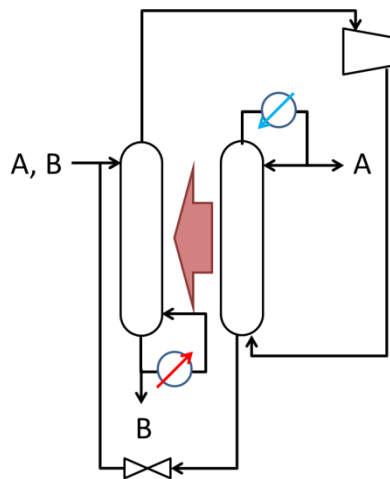
- c. eset:** hő integrált desztillációs oszlop (heat integrated distillation column): A megoldás lényege, hogy az oszlopot betáplálás alatti és feletti részre osztják (a betáplálás a kiforralóval ellátott részbe lép be). A két oszloprész nyomását úgy állítják be egy kompresszor és egy szabályószelep segítségével, hogy a felsőrész nyomása nagyobb az alsórész nyomásánál, az így kialakult nyomásviszonyok miatt a felsőrész hőmérséklete nagyobb az alsóénál. Így az oszlopkialakítással tányéronként hőt tud átadni egymásnak a két oszloprész.
- d. eset:** fejtermék kompressziója termokompresszorral: Ennek a konstrukciónak az elve megegyezik a fejtermék kompressziós megoldással (b. eset). Lényeges különbség, hogy a fejtermék kompresszióját termokompresszorral végzik. Ez a berendezés megnöveli a fejtermék nyomását úgy, hogy hajtógózt használ fel. A készülék működési elve megegyezik az ejektoréval.



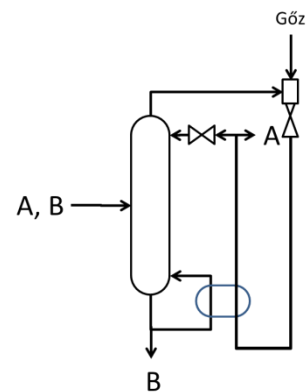
a.



b.



c.



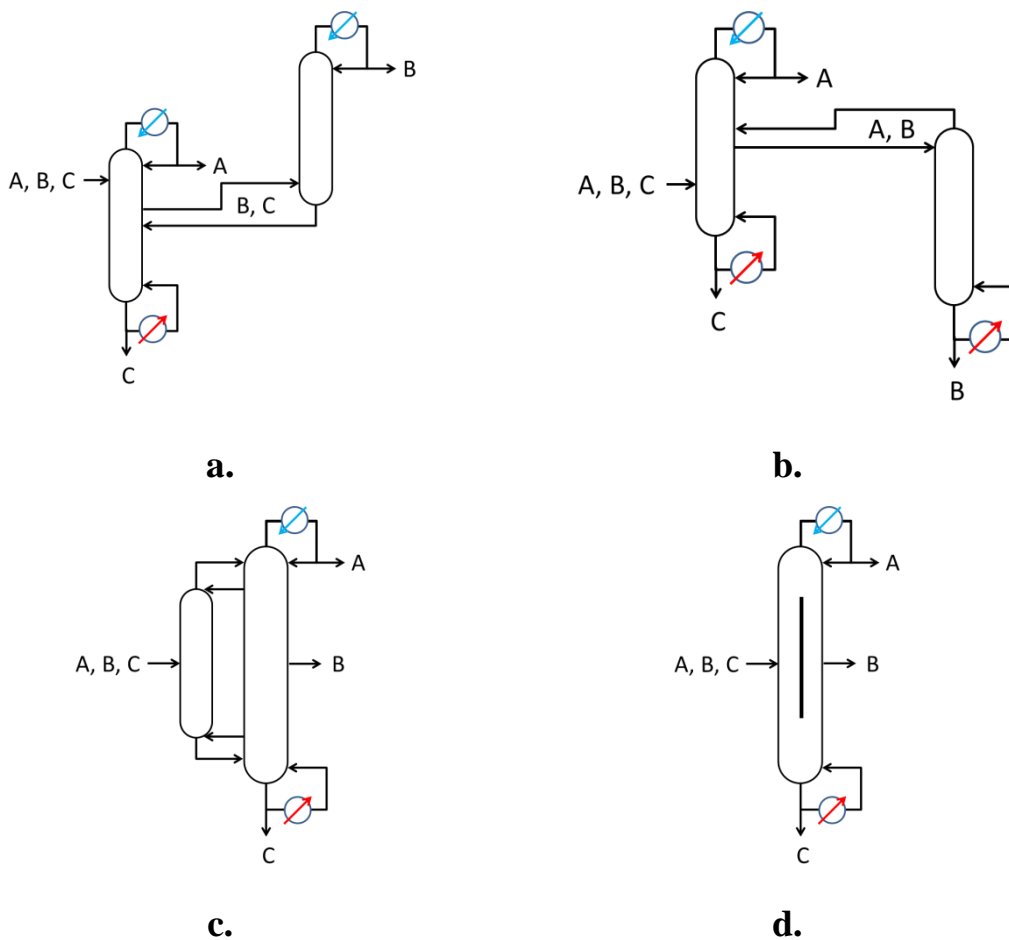
d.

5. ábra: Hőszivattyús desztilláló berendezések típusai

Termikus csatolás

Az energiahatékonyság növelésére további lehetőség a termikusan csatolt kolonna konstrukciók alkalmazása [18, 19]. Termikusan csatolt rendszernek nevezzük azokat a több oszlopból álló rendszereket, melyekben az egyes oszlopok hőcserélőiben közölt és elvont hő egy része a többi oszlopon is áthalad. A termikus csatolást az egymással szemközt haladó gőz és folyadék áramok biztosítják. Ezek közül a négy legjellemzőbb típust a 6. ábra szemlélteti, de az 5.c. ábrán szereplő konstrukció is termikusan csatolt oszlopok közé tartozik. A bemutatott példákban a szétválasztó rendszerek három komponenset választanak el, ahol a forrásponthoz a sorrend: A, B, C, és az „A” komponens forrásponthoz a legközelebb. Az oldal kolonnával rendelkező oszlop lényege (ld. 6. a. ábra), hogy gőz halmazállapotú oldalterméket veszünk el a főkolonnából és azt betápláljuk a kondenzátorral rendelkező segédkolonnába. A mellék kolonna betáplálása főként B és C komponensekből áll, és termékként B komponenset veszünk el megfelelő tisztaságban. Az oldal kolonna aljáról folyadékot vezetnek vissza a fő kolonnába. A három komponenset tartalmazó betáplálás az oldaltermék elvétel fölött van. Az oldalsztripperrel rendelkező kolonna a 6.b. ábrán látható. Ennél a konstrukciónál szintén oldalterméket vesznek el a főkolonnából, de folyadék halmazállapotú, és azt táplálják a kiforralóval ellátott segédoszlopba. Az oldalsztripper betáplálása főként A és B komponens, a kiforralóból a B komponenset veszik el megfelelő tisztaságban. A három komponenset tartalmazó betáplálás az oldaltermék elvétel alatt van. Az oldal kolonna tetejéről gőzt vezetnek vissza a fő kolonnába.

Szintén a termikusan csatolt rendszerek közé tartoznak a Petlyuk és az osztott terű kolonnák (ld. 6.c-d. ábrák). Az egyszerű osztott terű kolonna és a Petlyuk kolonna működésének alapelve megegyezik [21], amit a következő fejezetben ismertettek. Léteznek azonban olyan osztó falas kolonna megoldások is, melyeknek az elve az oldalsztripperes és oldal kolonnás rendszereknek feleltethető meg [22].



6. ábra: Termikusan csatolt desztilláló berendezések típusai

Osztott terű kolonna

Az osztott terű kolonnák termikusan csatolt desztilláló rendszereknek tekinthetők. Fő jellemzőjük, hogy egy kolonna testen belül válaszfalakkal több zónát különítenek el, ezek a zónák a termikusan csatolt rendszerek egy-egy oszlopának feleltethetők meg. Egyértelműen következik ebből, hogy az osztott terű kolonnák három vagy több termékesek.

Az osztott terű rektifikáló kolonna első publikációja 1949-ben jelent meg [23]. A szerző a cikkben metán, etán, propán, bután elegy szétválasztása példáján keresztül mutatja be a műveleti egységet. A kolonna egy háromtermékes konstrukció, melynek az oldalterméke nagytisztaságú propán. A betáplálás és az oldalelvétel szemben helyezkedik el egymással, és egy fal az oszlop közepén akadályozza meg a betáplálás és az oldaltermék közvetlen keveredését. Ez az osztott terű kolonna strukturálisan hasonló a Petlyuk kolonnával, a különbség a két konstrukció között az osztó falon átadott hőáram. A leírtak alapján a műveleti egység előnye, hogy az oldaltermék tisztább, mint a hagyományos háromtermékes kolonna terméke.

Az osztott terű rendszer és a Petlyuk kolonna elvét háromkomponensű elegy szétválasztására alkalmas berendezések bemutatásával ismertetem (ld. 7. ábra). A betáplált elegy a következő komponenseket tartalmazza: (növekvő forráspontszerinti sorrendben): benzol (B), toluol (T), xilol (X).

A leírásban szereplő felső és az alsó termikus csatolás definíciói az alábbiak.

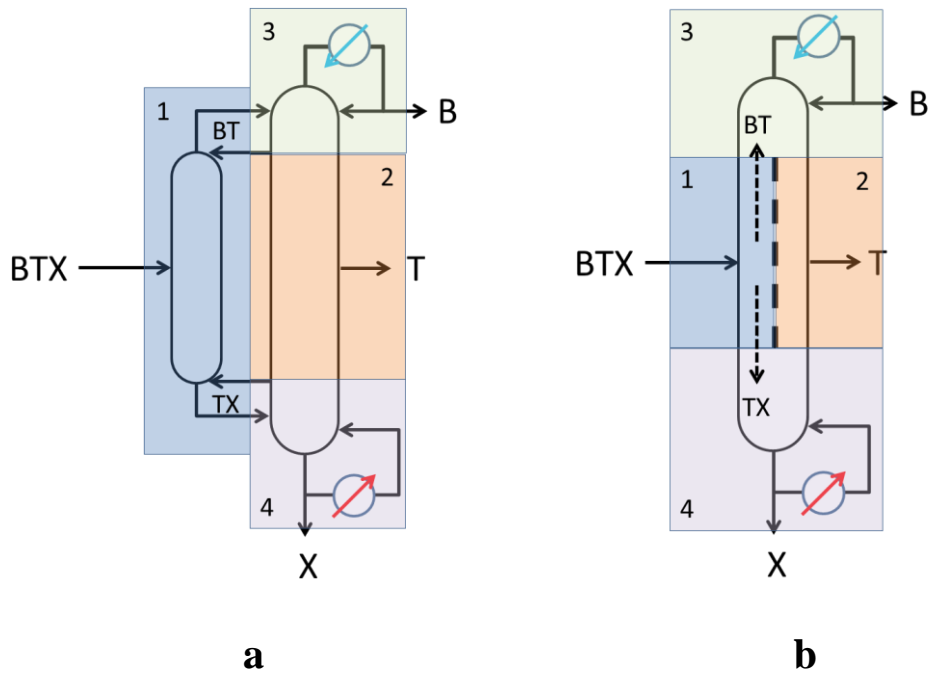
Felső termikus csatolás az a belső (nem termék) árampár a Petlyuk kolonnánál, ami az előfrakcionálóból távozó gőz és a főkolonnából nem termékként elvett folyadékelegy. Ezek az áramok az osztott terű kolonna betáplálási zóna tetejéről távozó és belépő anyagáramoknak felelnek meg, a mintapéldában főként benzolt és toluolt tartalmaznak.

Alsó termikus csatolás az a belső (nem termék) árampár a Petlyuk kolonnánál, ami az előfrakcionálóból távozó folyadék és a főkolonnából nem termékként elvett gőzelegy. Ezek az áramok az osztott terű kolonna betáplálási zóna aljáról távozó és belépő anyagáramoknak felelnek meg, a mintapéldában főként toluolt és xilolt tartalmaznak.

Az osztott terű kolonnát és a Petlyuk kolonna rendszert, funkcionálisan négy kolonna részre lehet elkülöníteni (2. táblázat, 7. ábra). A szétválasztandó elegyet az 1. zónába vezetjük be, itt válik szét a benzol és a xilol, miközben a toluol megoszlik a felfelé és a lefelé haladó áramok között. A kolonna ezen részén törekedni kell a nehéz és a könnyű komponens minél élesebb elválasztására, mert az megakadályozza az oldaltermék szennyeződését. Így a felső termikus csatolás benzol-toluol elegyet, az alsó toluol-xilol elegyet tartalmaz. A benzol-toluol szétválasztása a 3. zónában, a toluol-xilol szétválasztása a 4. zónában történik. A 2. zónában a toluol koncentrációja egy maximumot ér el, ezekbe a részekbe anyagáram csak felülről és alulról lép be így az elvétel tisztaságát nem zavarja a betáplálási áram [24].

2. táblázat: Az osztott terű kolonna és a Petlyuk kolonna zónái

Zóna	Petlyuk kolonna	Osztott terű kolonna
1. Betáplálási zóna	Előfrakcionáló	Osztófallal kettéválasztott kolonna rész betáplálás felőli oldala
2. Oldalelvételi zóna	Főfrakcionáló oszlop felső és alsó termikus csatolása közé eső része	Osztófallal kettéválasztott kolonna rész oldalelvétel felőli oldala
3. Rektifikáló zóna	Főfrakcionáló oszlop felső csatolás feletti része	Osztófal feletti rész
4. Kiforráló zóna	Főfrakcionáló oszlop alsó csatolás alatti rész	Osztófal alatti rész



7. ábra Az osztott terű (b) kolonna és a Petlyuk kolonna (a) zónái

Ennek a termikusan csatolt rendszernek a sajátossága, hogy a betáplálási és elvételi zónában az egymással szemben lévő egyensúlyi egységekben a fázisok koncentrációi eltérnek, így hőmérséklet különbség van a két oldal között. A későbbiekben mintapéldán keresztül szemléltetem a speciális kolonna profilokat. Lényeges különbség a 7. ábrán bemutatott két műveleti egység között, hogy az osztott terű kolonnánál ennek a hőmérséklet különbségnek a hatására hőátadás van az osztófalon, míg a Petlyuk kolonnánál nincs ilyen folyamat.

Az első publikáció után az osztott terű kolonna nem terjedt el megbízható tervezési eljárás és üzemeltetési tapasztalatok hiányában. Szintén gátat szabott az elterjedésnek, hogy a kivitelező cégeknek nem voltak eljárásaik a műveleti egység gépészeti tervezésére és gyártására. 1980-as energiaválság után került előtérbe újra a konstrukció, mint az energia megtakarítás egyik ígéretes alternatívája. 1985-ben építette meg a BASF az első ipari alkalmazású osztott terű kolonnát Németországban Ludwigshafen-ben [25], amely finomkemikáliákat választ el. A rendszer ipari alkalmazása bebizonyította, hogy az osztott terű konstrukció teljesíti az elvárásokat. Napjainkban több mint száz osztott terű rendszer működik világszerte, és évente megközelítőleg tízet építenek a vegyipar minden területén [26].

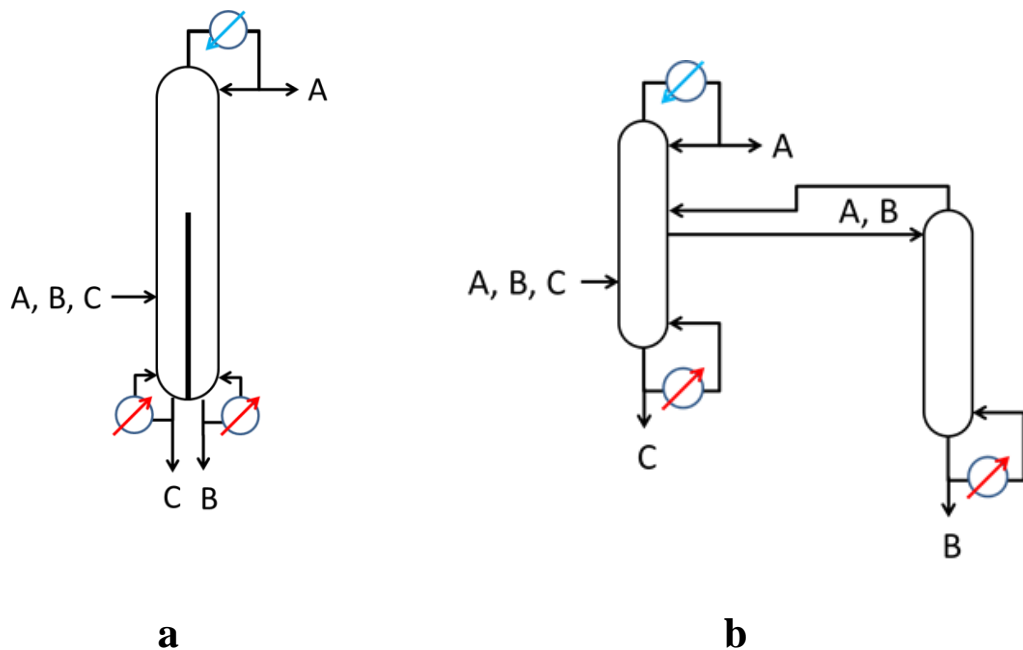
Az osztott terű oszlopok nem csak az üzemeltetési költséget csökkentik, hanem a beruházási költséget is, mivel a rendszer installálásakor egy kolonnatestet kell felépíteni, melynek kisebb lesz a mérete, mint egy hagyományos rendszer oszlop mérete. Egy példa a beruházási költség megtakarítására az UOP cég „Pacol Enhancement Process” eljárása, mellyel 14%-os költségcsökkenést értek el [25].

Az osztott terű kolonna már meglévő oszlopköpeny felhasználásával is létrehozható. Példaként kiemelendő, hogy a Koch-Glitsch cég átalakított egy oldaltermékes kolonnát az ExxonMobil vállalatnak a Fawley finomítójukban (Southampton, Anglia). Az átalakítás harminc nap alatt készült el, és a kolonna energia felhasználás csökkenése 53%-os lett [25].

Típusok

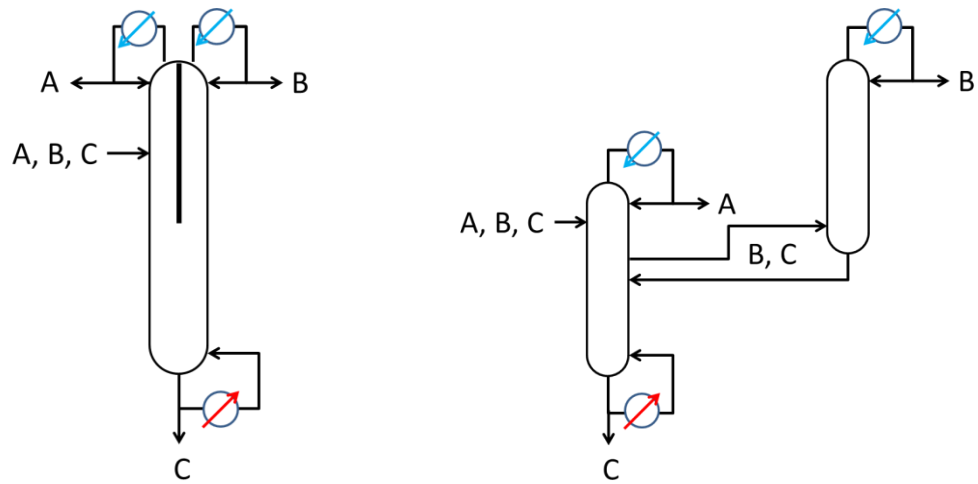
Az előző fejezetekben ismertetett konfiguráció a legelterjedtebben alkalmazott és kutatott [27]. Általában a betáplálás és az oldalelvétel is az oszlop közepén történik [22].

A 8.a. ábrán az osztott terű kolonna egy lehetséges típusa látható, ennek az alapelve megegyezik az oldalrektifikálóval rendelkező termikusan csatolt (ld. 8.b. ábra) konfigurációval. Ezt a konfigurációt a Monro [28] szabadalmaztatta, először 2004-ben alkalmazták [29].



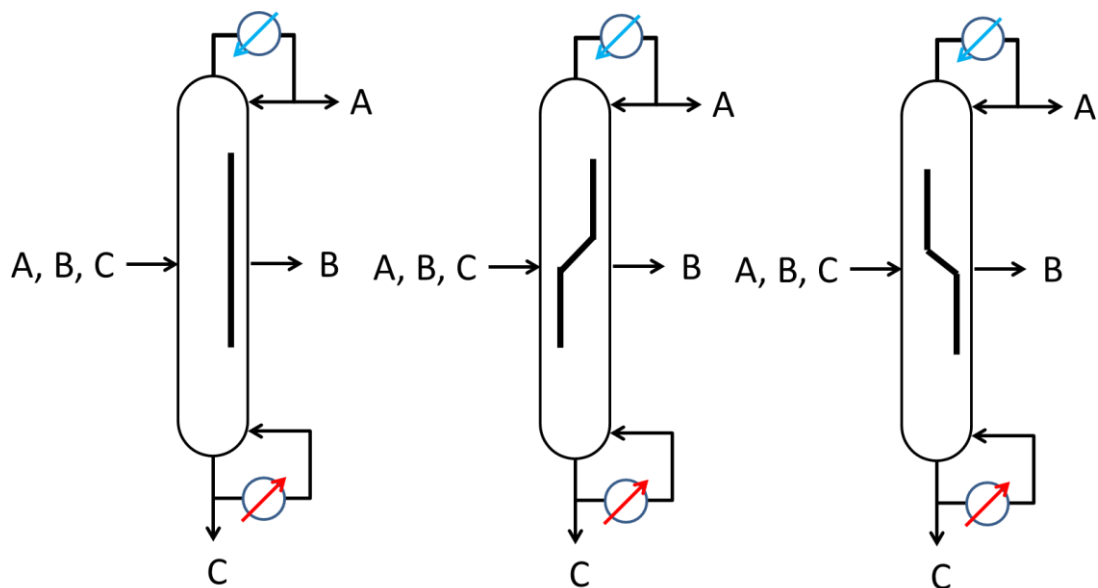
8. ábra: Alsó válaszfallal ellátott osztott terű kolonna

A 9.a. ábra az osztott terű kolonna egy másik lehetséges típusát szemlélteti, amely alapelve az oldalrektifikálóval rendelkező termikusan csatolt konfigurációval (ld. 9.b. ábra) egyezik meg [22].



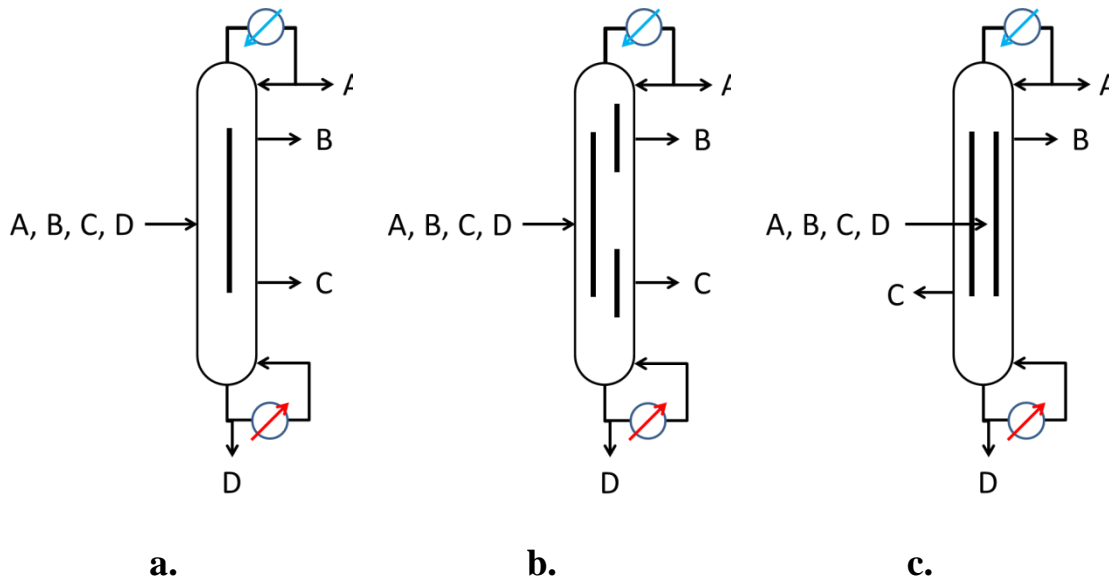
9. ábra: Felső válaszfalal ellátott osztott terű kolonna

Léteznek olyan osztott terű konfigurációk, melyekben az osztófal nem felezi a kolonna keresztmetszetét, erre mutat néhány példát a 10. ábra. A fal helyét a fal melletti kolonna rész folyadék és gőz terhelése határozza meg, (a közegek áramát az oszlop tervezése során határozzák meg).[22]



10. ábra: Különböző helyzetű falakkal ellátott osztott terű kolonnák [22]

A 11. ábra a háromnál több termékes osztott terű konfigurációkat szemlélteti. Az „a” konfigurációt Kaibel kolonnának nevezik. Ez a konfiguráció egy fallal és két oldaltermék elvezetéssel rendelkezik [30]. A nagyobb oldaltermék tisztaság érdekében a négytermékes osztott terű kolonnában több osztófalat alkalmaztak (ld. 11. b. ábra) [29]. További négytermékes megoldást szemléltet az ábra „c” része. Itt a betáplálást a középső oszloprészbe vezetik be [30, 31].



11. ábra: Több termékes osztott terű kolonnák [29]

1.3 Szétválasztási stratégia megválasztása

A soktermékes szétválasztási feladatok megoldásánál az első lépésben specifikálni kell a szétválasztási feladatot és meg kell vizsgálni, hogy a kijelölt termékek szétválaszthatók-e. Ezután következik a szétválasztórendszer struktúrájának meghatározása. Ebben a fejezetben bemutatom azokat a tervezési technikákat, melyek hagyományos oszlopok sorba kapcsolásával oldják meg a szétválasztási feladatot, tehát az alkalmazott kolonnákban mindig két részre választjuk szét az elegyet. Így az egyes lépésekben dekomponáljuk a szétválasztási feladatot. Ha az egyes rész szétválasztási feladatok termodinamikailag, műveletileg és gazdaságilag megoldhatók, akkor a soktermékes szétválasztás megoldható.

A hagyományos desztillálóberendezésekből álló szétválasztó rendszerek felépítésének meghatározása széles körben kutatott. A szétválasztó rendszer tervezésének módszere lehet [7, 32, 33]:

- heurisztikus szabályokon alapuló módszer,
- szélsőérték keresésen alapuló algoritmikus módszer,
- evolúciós stratégián alapuló módszer, amely a kezdőlépésben megadott szétválasztó rendszert fejleszti tovább,
- energetikai módszer, mely a desztillációs oszlopok exergiavesztését és nagykompozit görbáját vizsgálja, és
- esetleg ezek különböző kombinációi [11].

A szétválasztandó elegy összetétele, a szétválasztandó komponensek tulajdonságai, a termékáramok száma és a termékek tisztasága alapvetően meghatározzák a szeparációs rendszer felépítését. A szétválasztási feladat ismeretében lehet kiválasztani a megfelelő módszert, mellyel

meghatározható a rendszer struktúrája. Abban az esetben, ha a szétválasztandó elegy két részre szeparálása a cél, akkor egy hagyományos oszlop elegendő a szétválasztási feladat megoldására. Kettőnél több termékes rendszerek esetén a megvalósítható szétválasztó rendszerek száma ugrásszerűen nő a termékek számával. Így a tervezésnél nagyszámú lehetőség közül kell kiválasztani azt a rendszert, amelyik az előírt kritériumokat legjobban teljesíti.

A szétválasztó rendszert hagyományos oszlopok kapcsolatával felírva, „C” számú termék esetén a szétválasztási feladat megoldására minimálisan C-1 darab oszlopot kell sorba kapcsolni abban az esetben, ha nincs termodinamikai korlát a komponensek szétválaszthatóságában. Egy C termékes szétválasztásnál a lehetséges kapcsolások száma a következő összefüggéssel határozható meg (A kapcsolatok számát numerikusan a 3. táblázat szemlélteti) [5]:

$$N_C = \frac{[2 \cdot (C-1)]!}{C! \cdot (C-1)!} \quad (12)$$

3. táblázat: Kéttermékes berendezésekből felépülő szétválasztórendszerek variációinak száma

Termékek száma	2	3	4	5	6	7	8	9
Lehetséges kapcsolások száma	1	2	5	14	42	132	429	1430

Ha a hálózat meghatározása során, nem lett figyelembe véve a belső anyagáramok hőcseréjének lehetősége, akkor a szeparációs rendszert energetikailag kell elemezni, és meg kell határozni az energia integráció lehetőségét. A struktúra meghatározása után a berendezések fő méreteinek meghatározása, valamint a gépészeti tervezés a feladat.

Szeparációs rendszer szintézis

A vegyiparban legtöbbször a megfelelő terméktisztaság nem érhető el egy desztilláló oszlop alkalmazásával, ebben az esetben több termékes szétválasztó rendszer tervezése a cél, amely több szeparációs lépésből áll. A megfelelő szétválasztási sorrend megállapítására alkalmazott módszereket fentebb ismertettem.

A szélsőérték keresésen és evolúciós stratégián alapuló megoldások hátránya, hogy speciális matematikai tudást és számítástechnikai készséget követel a felhasználótól. Az energetikai módszerek a már meghatározott struktúrák fejlesztésében nyújtanak segítséget. A heurisztikus megoldások könnyebben alkalmazhatóak, viszont sokszor ellentmondó és átfedő szabályokat tartalmaznak [5].

A főbb heurisztikus szabályok fejlődését a 4. táblázat tartalmazza [9, 35, 36] .

4. táblázat: A heurisztikus szabályok áttekintése

Heurisztikus szabály	Szerző, év
Első lépésben a legkönnyebb szétválasztás	Harbert (1957)
Az utolsó lépésre hagyni a legnehezebb elválasztást	Rudd (1973)
Az első lépésben a legnagyobb energiaigényű lépést	Nishimura, Hiraizumi (1971); King (1971); Rudd (1973)
Az 50/50%-os elválasztás elve	Harbert (1957); Heaven (1969); King (1971);
Első lépésben a legolcsóbb elválasztás	Harbert (1957); Rudd(1973)
A legkisebb C_{DS} -el rendelkező szétválasztást először	Nath, Motarrd (1981)
A legnagyobb C_{ES} -el rendelkező szeparáció	Nagdir, Liu (1983)
A legkisebb energia indexű elválasztás az első lépésben	Lien (1988)
A direkt szétválasztást helyezi előtérbe	King (1971)
Kulcskomponensek előnybe részesítése	Heaven (1969); King(1971); Gomez, Seader (1976)

A heurisztikus szabályokat, vagy ökölszabályokat tapasztalati úton alkották meg abból a célból, hogy ezeknek a szabályoknak a segítségével több lehetséges megoldás közül kiválaszthatók legyenek azok a szétválasztó rendszerek, amelyek a legjobbak a szétválasztási feladat megoldására. Mivel az egyes heurisztikus szabályok sokszor ellentmondanak egymásnak, ezért több lehetséges szétválasztási rendszert adnak eredményül. Az egyes kiválasztott elválasztási struktúrák részletes műszaki és gazdasági elemzésével lehetséges végleges döntést hozni az elválasztó rendszer szerkezetéről. Ezért az ilyen jellegű tervezés esetén csak azt mondhatjuk ki, hogy egy szűkebb megoldáshalmazból választottuk ki az optimális szétválasztó rendszert. Ha a heurisztikus szabályok megfelelőek, akkor a lehetséges megoldások száma úgy szűkül le, hogy az optimális megoldás a lehetséges megoldások között marad.

Az algoritmikus szétválasztó rendszer tervezési módszerek a heurisztikus tervezéssel szemben pontosan leírt lépéseken keresztül egyértelmű szabályok segítségével határozza meg a szétválasztó rendszer struktúráját.

A matematikai szélsőérték keresést alkalmazó módszer lényege, hogy egy szuperstruktúra definiálása után az egzisztenciaváltozókat és a rendszer paramétereit változtatva egy célfüggvény szerinti optimális megoldást határoznak meg. Előnyük, hogy a szuperstruktúra megalkotásával az esetleges hő integrációs lehetőségeket is lehet definiálni [2].

Mind a három megközelítésnél alkalmazhatók a korábban már ismertetett mutatószámok.

1.4 Energetikai szempontok

A szétválasztó rendszerek energetikai vizsgálata két csoportba sorolható. Az egyik szemlélet alkalmazása során az egyes oszlopok hatékonyságát vizsgálják és a lejátszódó folyamatokat termodinamikailag elemzik, így javítva a szétválasztó rendszer hatékonyságán [37]. A másik megközelítésben az egész szeparációs rendszert vizsgálják, a cél a megfelelő felépítés kiválasztása és/vagy az energia felhasználás csökkentése hő integrációval.

Az alább bemutatott módszereket hagyományos desztillációs oszlopok példáján keresztül szemléltetem, azonban ezek a metodikák többtermékes, ill. összetett rendszerek vizsgálatára is alkalmasak.

Oszlopok energetikai vizsgálata

Az egyszerű oszlopok (egybetáplálású kéttermékes) jellemzésére két fő kutatási irányt tárgyal a szakirodalom: az exergiavesztés vizsgálatát és az oszlopok nagy kompozit görbéjének a vizsgálatát. Ezeknek a kutatási irányoknak az alapjait ebben a fejezetben szeretném bemutatni.

Az exergia (a kinyerhető energia) fogalmát Zoran Rant vezette be 1953-ban, míg a kémiai exergia koncepcióját Szargut 1986-ban. A desztillációs rendszerek exergia vizsgálatát a kilencvenes évek második felében kezdték el publikálni, azóta jelentős mennyiségű publikáció jelent meg ebben a témakörben [38].

A publikációkban az egyes oszlopokat általában exergiavesztéssel, vagy termodinamikai hatásfokkal jellemzik. Az exergia vizsgálatok a termodinamika első és második főtételén alapulnak. Az első főtétel az energia megmaradást írja le:

$$\frac{d(nU)_{sys}}{dt} + \Delta \left[\dot{n} \left(H + \frac{1}{2} u^2 + zg \right) \right]_{fs} - \dot{Q}_o - \sum_i \dot{Q}_i + \sum_j \dot{W}_j = 0, \quad (13)$$

a második főtétel a spontán folyamatok irányát szabja meg az entrópia segítségével:

$$\frac{d(nS)_{sys}}{dt} + \Delta [\dot{n}(S)]_{fs} - \frac{\dot{Q}_o}{T_o} - \sum_i \frac{\dot{Q}_i}{T_i} = \Phi. \quad (14)$$

Az alábbi mérlegegyenletek a megfelelő extenzív mennyiségek térfogati sűrűségeire vonatkoznak [39].

Az előző összefüggéseket (13-15.) átrendezve és a Q_0 tagot, illetve a potenciális és a kinetikai energiát elhanyagolva 15. összefüggés adódik

$$\frac{d[n(H-T_0S-PV)]_{sys}}{dt} + \Delta[\dot{n}(H - T_0S)]_{fs} - \sum_i \left(1 - \frac{T_0}{T_i}\right) \dot{Q}_i + \sum_j \dot{W}_j + T_0\dot{\Phi} = 0. \quad (15)$$

A Helmholtz függvény:

$$G = H - T_0S \quad (16)$$

felhasználásával kifejezhető az egységnyi térfogatú és állandó hőmérsékletű rendszerből hasznosítható munka, ez az energia (szabadenergia) az exergia.

Az átalakított összefüggésben a $T_0\dot{\Phi}$ tag a rendszer munkavesztését jelenti ez az exergiavesztés, amely mindig nagyobb nullánál. Ez az energia mennyiség növeli a rendszer energia szükségét a csak a reverzibilis folyamatokat magába foglaló rendszerhez képest. Így felírható az irreverzibilis folyamatokban bekövetkező energiavesztés:

$$ExV = \frac{d[G-PV]_{sys}}{dt} + \Delta[\dot{n}(G)]_{fs} - \sum_i \left(1 - \frac{T_0}{T_i}\right) \dot{Q}_i + \sum_j \dot{W}_j \geq 0. \quad (17)$$

Ezt az összefüggést a desztilláló oszlop összes egyensúlyi egységére fel lehet írni. Az oszlop hossza mentén ábrázolt exergiavesztés profilok segítségével meghatározhatók a műveleti egység azon a részei, ahol az irreverzibilis folyamatok túlsúlyban vannak.

A rendszerbe belépő és kilépő hasznosítható energiataralom közötti különbséggel felírható a rendszer minim munkaszükséglete:

$$W_{min} = \sum_{out} nG - \sum_{in} nG. \quad (18)$$

A minimális energiaszükséglet és az exergiavesztés segítségével felírható a rendszer termodinamikai hatásfoka:

$$\eta = \frac{W_{min}}{W_{min} + ExV}. \quad (19)$$

Az oszlopok vizsgálatára szintén elterjedten alkalmazzák az oszlop nagy kompozit görbáját (CGCC). A módszer bevezetése a szakirodalomba Dhole és Linnhoff nevéhez fűződik, bár a T-H diagramot korábban is alkalmazták [40].

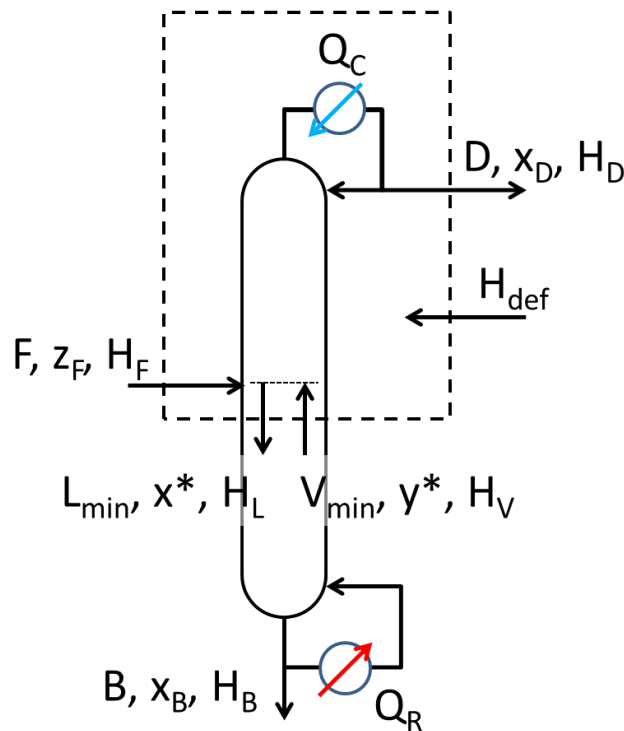
A desztillációs oszlop nagy kompozit görbéjének meghatározása a könnyű és nehéz kulcskomponensekre értelmezett mérlegegyenletek felírásával kezdődik. Az összefüggések felírása előtt definiálni kell a könnyű és nehéz kulcskomponenseket, a szeparáció feladata ezeknek a komponenseknek a szétválasztása meghatározott tisztaságban. A könnyű kulcskomponens a kisebb forráspontú a két komponens közül. A görbe létrehozásához az oszlop szimulációjára van szükség, mivel olyan információkra van szükség melyeket nehéz mérni, mivel a tömeg, komponens és entalpia mérlegegyenletet a készülék egy meghatározott részére írunk fel

$$V_{min} \cdot F = L_{min} + D \quad (20)$$

$$V_{min} \cdot y^* + F \cdot z_F = L_{min} \cdot x^* + D \cdot x_D \quad (21)$$

$$V_{min} \cdot H_V + F \cdot H_F + H_{def} = L_{min} \cdot H_L + D \cdot H_D, \quad (22)$$

amit a szaggatott vonal jelöl a 12. ábrán [41, 42].



12. ábra: Desztillációs oszlop nagy kompozit görbéjének meghatározása „Top-down” szemlélettel

A (21, 22) összefüggésből kifejezhetők a L_{min} és a V_{min} , ezek a következő összefüggések:

$$L_{min} = \frac{[D \cdot (x_D - y^*) - F \cdot (z_F - y^*)]}{(y^* - x^*)} \quad (23)$$

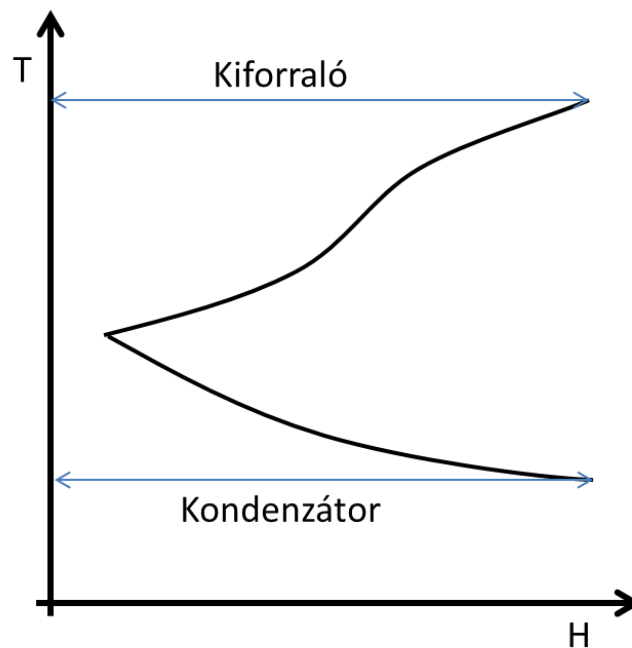
$$V_{min} = \frac{[D \cdot (x_D - x^*) - F \cdot (z_F - x^*)]}{(y^* - x^*)} \quad (24)$$

Az entalpia mérlegből kifejezhető az adott készülékrészben nettó entalpia deficit, ehhez hozzáadva a kondenzátor energia igényét megkaphatjuk a kolonna nagy kompozit görbéjén ábrázolt energia mennyiséget ($H_{CGCC}(x)$):

$$H_{CGCC}(x) = Q_C + \left(\frac{[D \cdot (x_D - y^*) - F \cdot (z_F - y^*)]}{(y^* - x^*)} \right) \cdot H_L + D \cdot H_D - \left(\frac{[D \cdot (x_D - x^*) - F \cdot (z_F - x^*)]}{(y^* - x^*)} \right) \cdot H_V - F \cdot H_F \quad (25)$$

Ezt az energia mennyiséget ahhoz a tányérhoz rendeljük, amiről a L_{\min} áramú folyadék kilép, ill. amire a V_{\min} áramú gőzt betáplálják. A H_{CGCC} energia áramot az összes egyensúlyi egységre ki lehet számolni. A kondenzátor és a kiforraló esetén a H_{CGCC} a kondenzátor és a kiforraló hőigényével egyezik meg.

Az oszlop tányér hőmérsékleteivel és a hozzájuk tartozó H_{CGCC} értékekkel ábrázolni tudjuk az oszlop nagy kompozit görbéjét. Egy jellemző kompozit görbét a 13. ábra szemléltet. A tányérhőmérséklet függvényében ábrázolják a H_{CGCC} értékeket, úgy hogy a függőleges tengelyen a tányérhőmérsékletek vannak.



13. ábra: Egy oszlop nagy kompozit görbéje

A kompozit görbe megmutatja, hogy az adott hőmérsékletű tányéron mennyi energiát lehet befektetni illetve elvonni a szétválasztás befolyásolása nélkül. Így a függőleges tengely és a H_{CGCC} távolságából következtetni lehet arra, hogy az oszlop nyomásváltoztatásával ill. reflux változtatásával lehet-e energiát megtakarítani. Ugyancsak lehet következtetni arra is, hogy melyik

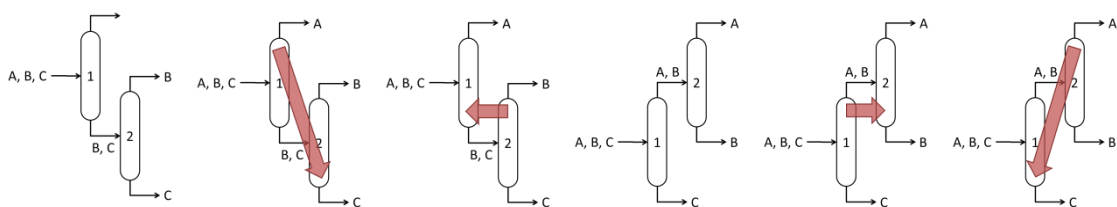
hőmérsékletű tányérhoz érdemes oldal visszaforraltól ill. oldal kondenzátort kapcsolni és ott mekkora teljesítményű hűtadás lehetséges a szétválasztás befolyásolása nélkül. Szintén információt ad a görbe arról, hogy a betáplálás megfelelő hőállapotú-e [40, 43].

Hőintegráció

A hőintegrációval szintén lehet növelni a szétválasztó rendszerek és technológiák energia hatékonyságát. Szétválasztó rendszerek esetén integrált oszlopokról beszélünk, ha a hőforgalmat kettős célú kondenzátor – kiforráló hőcserélők valósítják meg. Az egyik oszlop kondenzátora egyben a másik oszlop kiforralója. Az ilyen kapcsolás megvalósításának feltétele, hogy a forrás oszlop fejhőmérséklete nagyobb legyen a nyelő oszlop fenék hőmérsékleténél úgy, hogy a minimális hajtóerőnél nagyobb legyen a hőmérsékletkülönbség. Általánosan a hőintegráció lényege, hogy a technológián belül a technológiai áramok hűtését és melegítését úgy valósítják meg, hogy a megfelelő hőmérséklet különbséggel rendelkező és ellentétes hőmérsékletváltozást igénylő anyagáramok egymással cseréljenek hőt. Így csökkenthetjük a technológia segédenergia szükségletét, ezzel az üzemeltetési költséget.

A hőintegráció tervezésére a legismertebb eljárás a termodinamika első és második főtételét alkalmazó pinch analízis [44, 45]. A vizsgálat első lépéseként az elemzett rendszer anyag és energia mérlegét kell felírni, ezt általában szimulációs szoftver segítségével végzik. Ezután a mérlegek adataiból meghatározzák a nagy és a kis kompozit görbét. Ezek segítségével meghatározható a minimális segédenergia szükséglet, a segédenergiák megfelelő hőmérséklete, valamint az optimális minimális hajtóerő. A kompozit görbék segítségével meghatározható a szükséges hőcserélő hálózat.

A szakirodalomban olyan kutatásokról is beszámolnak, melyek kizárólag a szétválasztó rendszereken belüli hőintegrációt vizsgálják. Erre példa a háromtermékes szétválasztó rendszer hőintegrációját vizsgáló munka [12, 40]. A 14. ábra direkt és indirekt kolonna sorrend integrációját szemlélteti.



14. ábra: Direkt és indirekt kolonna sorrend hő integrációja

Léteznek olyan módszerek, amelyek a hőintegrációt és a kolonna sorrendet egyszerre határozzák meg. Ezeknek a közös jellemzőjük, hogy egy szuperstruktúrából kiindulva MILP (Mixed-Integer Linear Programming) szélsőérték kereséssel határozzák meg az optimális szétválasztó rendszert [46].

Szétválasztó rendszer felépítésétől független hatékonyságnövelés

Az ipari gyakorlatban elterjedten keresik és alkalmazzák azokat az energia megtakarítási megoldásokat, melyekkel alacsony beruházási költség mellett csökkenthető az oszlopok üzemeltetési költsége. Az egyik legkézenfekvőbb lehetőség az üzemeltetési költség csökkentésére a már meglévő desztilláló berendezések esetén a megfelelő szabályzórendszer kiépítése. A desztilláló oszlopokat az üzemelés során zavarások érik, ezeknek a kompenzálására szabályozókat alkalmaznak, azonban ezek alkalmazásával is a termékek minősége az időben változik, ingadozik. A termékáramok minőségét biztosító szabályozó körök alapjeleit úgy kell meghatározni, hogy mindig biztosítsák az elvárt minőséget, mivel a határértékek átlépésével a termék értékcsökkenést szenved el. Rosszul hangolt szabályozókörök esetén a szabályozott jellemző ingadozása nagy, így az alapjelet nem lehet a termékspecifikációhoz közel állítani. Ezért jobb minőségű terméket állítanak elő, mint az előírás. Jól behangolt szabályozók esetén az alapjeleket közelíteni lehet az előírt minőséghez. Mivel egy adott oszlopon jobb szétválasztás csak több energia befektetéssel lehetséges, így az oszlop energia igénye csökken a kevésbé tiszta termék előállításával.

Meglévő desztilláló berendezések esetén az energiahatékonyság növelésének további lehetősége a nagyobb hatékonyságú kolonna belső alkalmazása. Ezzel a műveleti egységben megnövelhető az egyensúlyi egységek száma. Ha az oszlop termékeinek minősége nem változik (és a betáplálás minősége sem), akkor nagyobb elméleti tányérszámmal kisebb refluxot és kiforralási energiát kell alkalmazni egy adott mennyiségű betáplálásnál.

Az integrált műveletek, vagy szeparációs eljárások jelentősen csökkenthetik a technológiák költségeit. Ezek közül jelenleg az egyik jelentős megoldás a reaktív desztilláció, ezért a szakirodalomban nagy mennyiségű publikáció található ezzel a berendezéssel kapcsolatosan [47, 48, 49].

1.5 Irányítási szempontok

A vegyipari technológiák üzemeltetése során számos követelménynek kell megfelelni, mint például termék előírásoknak, üzemeltetési korlátoknak és környezetvédelmi előírásoknak. A technológiát úgy kell tervezni, hogy ezeket a követelményeket betartva gazdaságosan üzemeltethető legyen. A desztillációs berendezések irányítórendszerét úgy kell kialakítani, hogy az irányított rendszer tulajdonságait figyelembe vegye, amelyek a következők [50]:

- A desztillációs oszlop dinamikus és stacioner viselkedése függ a munkatartománytól (betáplálás és termékek mennyisége és minősége).
- Több bemenetű és több kimenetű rendszer, melynél a bemenetek különböző mértékben hatnak a kimenetekre.

- A desztillációs oszlopokat az üzemeltetés során folyamatos zavarások érik, melyeket úgy kell kompenzálni, hogy a termékek minősége megfelelő maradjon. Például a betáplálás mennyisége és a minősége állandóan változik így az oszlop nem tudja elérni a stationer állapotot.

Főbb zavarások

A zavarások típusa és nagysága közvetlen hatással van a termék minőségre. Lentebb bemutatom a desztillációs oszlopok lehetséges főbb zavarásait és elemzem azok hatását.

Az üzemeltetés során a *betáplálás összetételváltozása* a legjelentősebb zavarás. Ez befolyásolja a berendezésben a koncentrációprofil és ez nagyhatással van a termékek minőségére. Az iparban legtöbb esetben nem mérik on-line analizátorral a betáplálás összetételét, így ennek változása nem mért zavarás. Abban az esetben, ha van on-line információ a betáplálási áram minőségére, akkor előrecsatolással kompenzálható ez a hatás [50].

A *betáplálás mennyiségének változása* közvetlen hatással van a kolonna belsőáramainak nagyságára. Ezért ennek hatása az egyik belső áram és a betáplálás arányának szabályozásával kompenzálható. [50] Az arányszabályozás tervezésnél azt is figyelembe kell venni, hogy a betáplálás mennyiség változása dinamikusan hogyan hat a termékminőségekre.

A desztillációs oszlop betáplálás mennyiség - és minőségváltozása mellett zavarás lehet a *belépő anyagáram hőtartalmának változása* is. Ez a hatás akkor lehet jelentős, ha a reflux áram mennyisége kicsi, így az oszlop folyadék-gőz arányát (ami a szétválasztás élességét befolyásolja) nagymértékben a betáplálás entalpiája határozza meg. Ezt a zavarást a betáplálási áram hőmérsékletszabályozásával lehet kompenzálni [50].

Desztillációs oszlopoknál a fejtermék kondenzáltatására elterjedten alkalmaznak légmentes kondenzátorokat. Az ilyen hőcserélők esetén a külsőhőmérséklet csökkenése túlűtheti a reflux áramot, ezzel befolyásolva a kolonna folyadék-gőz arányát. Ezért a reflux mennyiségét úgy kell szabályozni, hogy ezt a hatást kompenzálja, így a minőség nem fog változni [50]. Ezzel analóg zavarás a fűtőgáz - vagy gőzrendszerekben történő nyomáscsökkenés a kemencék vagy kiforralók esetén.

Szabályzókörok

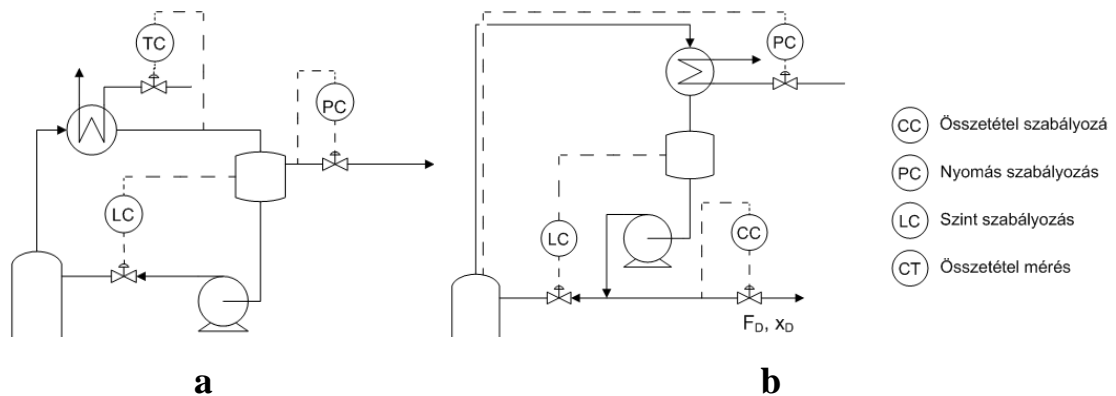
Az előzőekben ismertetett tulajdonságok és zavarások miatt a desztillációs oszlopok szabályozása összetett feladat. Ezért a szabályozási feladat megoldásánál több körből álló összetett szabályozórendszereket alkalmaznak. Az oszlopok szabályzóköreit funkció szerint két csoportra oszthatjuk. Az üzemeltetést biztosító szabályozók csoportjába tartoznak azok a szabályozókörok, amelyek a működéshez szükséges feltételeket biztosítják. Az összetétel szabályozók csoportjába

tartoznak azok a körök melyek, biztosítják a termékek közötti hőmérsékletkülönbséget így koncentráció különbséget is [51].

Az üzemeltetést biztosító szabályozó körök csoportjába tartoznak a *tömegáram és a térfogatáram szabályozók*, ezek biztosítják a kolonna belső áramait és a segédenergiák mennyiségeit ért zavarásokat kompenzálják valamint az esetleges szelephibák hatását csökkentik. Ezek alapjeleit általában a szint- és a koncentrációsabályozók határozzák meg [51].

A *szintszabályozók* szintén a berendezés üzemeltetését biztosítják. Ezek a szabályozókörök megakadályozzák, hogy a folyadék leürüljön a reflux tartályból vagy a kolonna aljáról. A kolonna alján és a reflux tartályban azért van szükség a puffer kapacitásra, hogy a kolonna üzemeltetése során a folyadékok térfogatárama mindig biztosítható legyen [51, 52].

A *fejnyomás szabályozás* is a megfelelő üzemmenetet biztosítja. A nyomássabályozásban alapvetően két szabályozási stratégia lehetséges attól függően, hogy a kondenzátorból kilépő anyagáram halmazállapota milyen. Abban az esetben, ha a hőcserélőből kilépő áram tartalmaz gőz/gáz fázist, akkor gőz/gáz halmazállapotú fejtermék mennyiségével szabályozzák a kolonna tetején a nyomást (15. a. ábra). Folyadéktermék esetén, a kondenzátoron elvont hő a beavatkozó jellemző (15. b. ábra), ezt a hőmennyiséget a kondenzátor típusa szerint többféleképpen is lehet befolyásolni [51].



15. ábra: Fejnyomás szabályozás lehetőségei

A desztilláló oszlopok üzemeltetése során a cél a megfelelő üzemmenet biztosítása mellett a *megfelelő összetételű termékek előállítása*. A termék összetétel mérése azonban számos nehézségbe ütközik. A laboratóriumi mérések nem alkalmasak a zártkörű szabályozásra, így az online minőségérték biztosítására online analizátort és minőség becslést alkalmaznak [53]. Általában az on-line analizátorok drága eszközök és nagy holtidővel rendelkeznek, ez megnehezítheti a megfelelő szabályozást. Ezért ezeket a berendezéseket nagy időállandóval rendelkező oszlopok szabályozása esetén alkalmazzák. Viszont előnye ezeknek az eszközöknek, hogy valós analitikai mérés, így olyan munkaponton is megbízható minőségértéket tud

biztosítani, amin a berendezés még nem üzemelt (feltételezve, hogy a méréstartományon belül marad a koncentrációérték). Jellemzően olyan oszlopok szabályozására lehet alkalmazni zártkörben, amelyek olyan szétválasztási feladatot oldanak meg, ahol a forráspontkülönbség kicsi a termékek között, így nagy refluxot alkalmaznak.

Könnyen szétválasztható komponensek esetén általában a rektifikáló berendezés jellemző hőmérsékletét tartják megfelelő értéken, így biztosítva a termékáramok megfelelő tisztaságát (közvetett mérésen alapuló szabályozás). Ezzel a megoldással egy olcsóbb, gyorsabb és megbízhatóbb méréstechnikára váltható az on-line analízátor. Ebben az esetben a szabályozott hőmérséklet – termék összetétel karakterisztikával meghatározható az alapjel értéke. Kétkomponensű elegyek szétválasztása esetén általában a termékáramok nagy tisztaságban tartalmazzák a szétválasztani kívánt komponenseket, ezért a termékek hőmérséklete kismértékben változik a beavatkozó jellemzők változására. Ezért a betáplálás feletti rektifikáló szakaszban ill. a betáplálás alatti kiforráló szakaszban kijelölt két hőmérsékletet kell szabályozott jellemzőnek választani. A hőmérséklet mérési pont kiválasztásának a négy legismertebb ökölszabálya a következők [52, 54, 55]:

- A szabályozott hőmérsékletet azon a tényéron kell mérni, amelyen a hőmérsékletprofil a legmeredekebb.
- A szabályozott hőmérsékletet úgy kell kiválasztani, hogy a betáplálást ért zavarásnak minél kisebb hatása legyen rá.
- A szabályozott hőmérsékletet úgy kell kiválasztani, hogy a beavatkozó jellemzőnek a legnagyobb legyen a hatása.
- A szabályozott hőmérsékletet úgy kell kiválasztani, hogy annak kézbentartásával a termékminőség legkevésbé változzon a betáplálási áram minőségváltozásával.

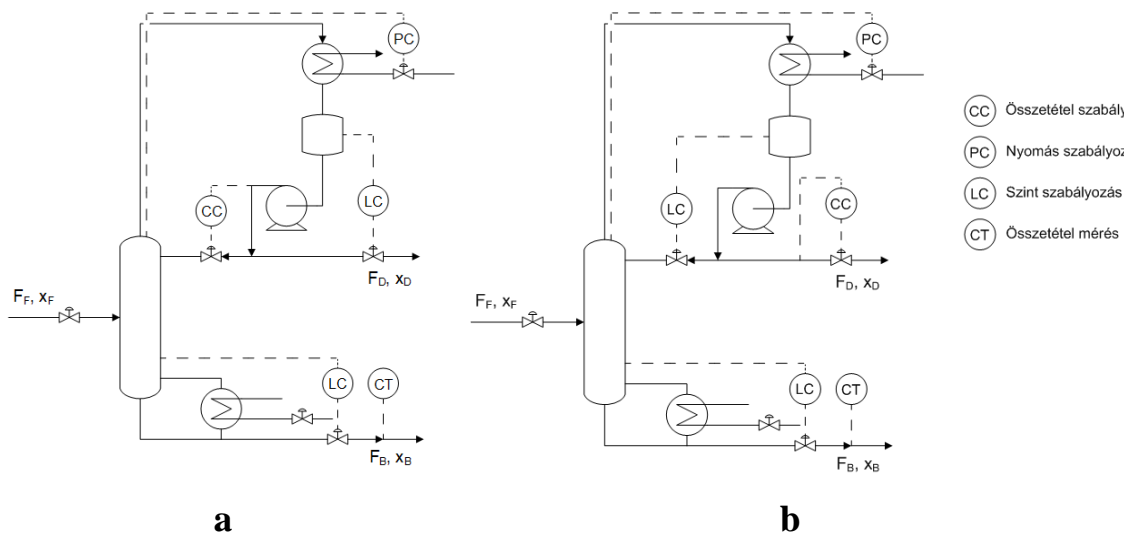
Az online minőségérték biztosítására egy másik lehetséges megoldás a minőségbecslések vagy szoft-szenzorok alkalmazása. A minőségbecslések olyan számítások melyeknek a végeredménye a termékek komponens összetétele vagy az azt jellemző mutatószám (pl.: desztillációs görbe egy meghatározott pontja), és a bemenetei az egyszerű szenzorok (hőmérséklet-, nyomás-, áramlásmérés) kimenetei. Ennek a módszernek az előnye, hogy a szenzorok gyorsaságával reagál az eszközben történt változásokra, valamint olyan tulajdonságokat is meg lehet becsülni amelyek nehezen mérhetők online [56]. Azonban ez egy közvetett mérés, így csak a megfelelő matematikai modell felállítása után, meghatározott korlátok között tud megbízható minőségértékeket biztosítani.

A termékszabályozás tervezésénél az első lépésben meg kell határozni, hogy melyik termék vagy termékek minőségét kell kézben tartani. Ez egy gazdasági döntés, amelyben mérlegelni kell a

mérőeszköz költségét, a segédenergia költséget, a kihozatal nagyságát, és a terméktisztaság hatását az eladási árra. A hagyományos oszlopok szabályozása esetén az ipari gyakorlatban az esetek 90%-ban csak az egyik termék minőségét tartják kézben. A fennmaradó esetekben mind a két termékminőséget szabályozzák, ez különleges szabályozási technikát igényel, mivel a koncentrációsabályozók hatással vannak egymás működésére [57].

Az alábbiakban a *fejtermék minőségszabályozás* módjai láthatók (16. ábra). A bemutatott esetekben a fenéktermék minősége mért, de nem szabályozott. A 16.a ábrán látható szabályozórendszer a reflux mennyiségével állítja be a termék minőségét, és a reflux tartály szintjét a kilépő fejtermék mennyiségével. Ez az iparban az egyik legelterjedtebb módszere a fejtermék minőségszabályozásának, mivel a reflux mennyisége határozza meg a lefelé folyó folyadék mennyiségét az oszlopban. Így közvetlen és gyors hatást fejt ki az oszlopból kilépő termékáramok tisztaságára. A 16.b ábrán bemutatott szabályozási séma az elvett desztillátum mennyiségével szabályozza a termék minőségét, ezt direkt anyagmérleg szabályozásnak is nevezik, hiszen a termékek mennyisége meghatározza azok minőségét. A komponensmérleget átrendezve így számítható ki a két komponenst elválasztó desztillációs oszlop fejtermék minősége [55, 57, 58]:

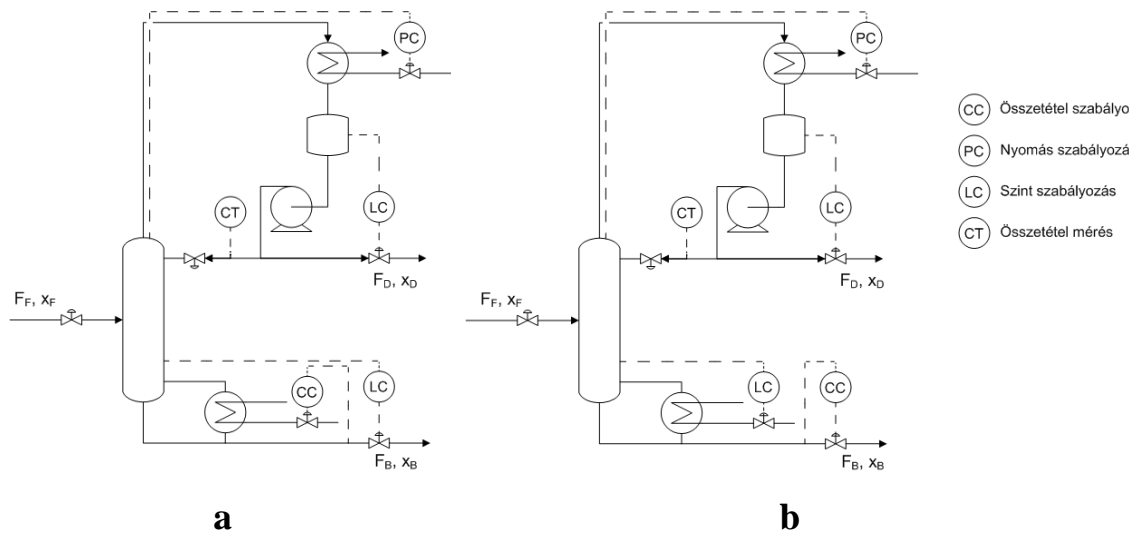
$$x_D = x_B + \frac{x_F - x_B}{F_D/F_F} \quad (26)$$



16. ábra: Fejtermék minőségszabályozás lehetőségei

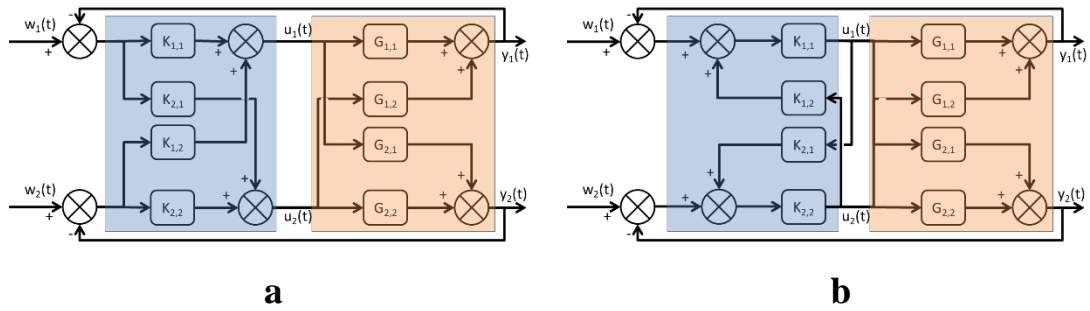
A desztillációs oszlopok leggyakrabban alkalmazott *fenéktermék szabályozási* megoldásait a 17. ábra szemlélteti. A példákban a fejtermék minősége mért, de nem szabályozott jellemző. Az „a” esetben a kiforrálás mértékével tartjuk kézben a fenéktermék tisztaságát. Ez az egyik leggyakrabban alkalmazott szabályozási séma, mert a hőcserélőben átadott hő meghatározza a kolonnába visszavezetett gőz mennyiségét és így a folyadék-gőz arányt is. Így ez a séma analóg

a 16.a ábrán bemutatott szabályozórendszerrel. A 17.b ábrán bemutatott rendszer a fenéktermék mennyiségével tartja kézben a termékminőséget, így ez is egy direkt anyagmérleg szabályozás [55, 57, 60]



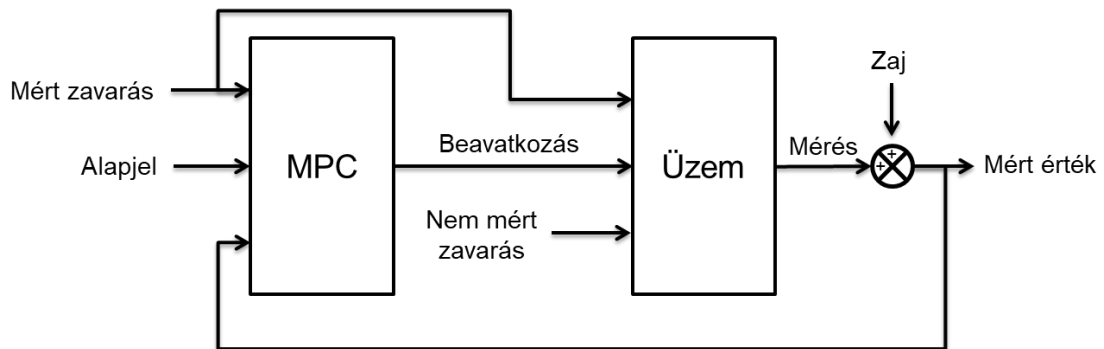
17. ábra: Fenéktermék minőség szabályozás lehetőségei

Abban az esetben, ha az egyszerű desztillációs oszlopok mindkét minőségét szabályozni kell, akkor az előzőekben bemutatott sémák kombinációjával lehet a termékek minőségét kézben tartani [61]. Ebben az esetben a *szabályzókörök kölcsönhatása nagy*, így ezt a szabályzórendszer tervezésénél figyelembe kell venni [62]. Ez úgy lehetséges, hogy a szabályzó kör paramétereit úgy állítjuk be, hogy a zárt körök szabályozási időállandói lényegesen eltérjenek egymástól. Lehetséges olyan szabályzórendszer alkalmazása is, ami kompenzálja a szabályzó körök kölcsönhatását. Az egyik ilyen megoldás a szétcsatoló szabályozás [63]. Ennek lényege, hogy a hagyományos szabályozók mellett úgynevezett szétcsatoló szabályzókat alkalmaznak. Ezek a szabályozók a körök közötti kölcsönhatást kompenzálják („megszüntetik”) és a szabályzókat független szabályzóként kezelhetők. A szétcsatolás lehetséges sémáit egy két szabályozott - és két beavatkozó jellemzőjű rendszerre a 18. ábra szemlélteti. A „G”-vel jelölt rendszerek a szabályozott objektum viselkedését írják le, a „K”-val jelölt blokkok a szabályzót leíró függvények. A 18. a ábrán a hagyományos szétcsatolás a 18 b ábrán a invertált szétcsatolás látható. Az invertált szétcsatolásnak előnye, hogy a szabályzórendszer elemeit könnyebb meghatározni és a modellek is egyszerűbbek, mint a hagyományos szétcsatolás esetén. [64]



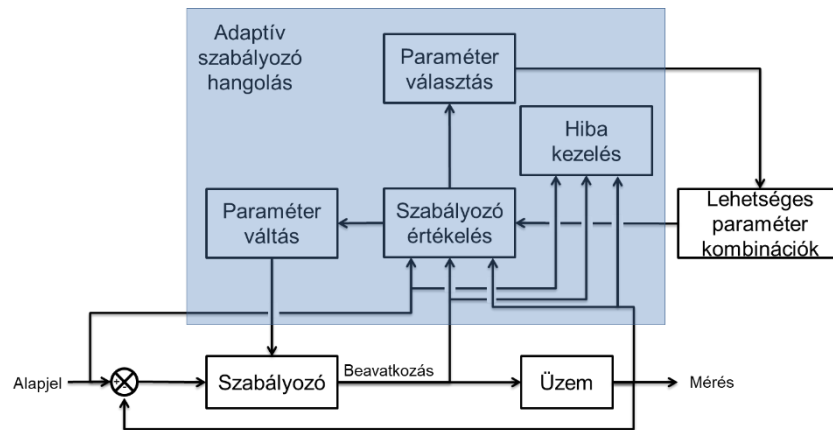
18. ábra: Fejnyomás szabályozás lehetőségei

Azoknál a rendszereknél amelyeknél az egyes beavatkozók nagymértékben hatnak a több szabályozott jellemzőre (előző bekezdésben bemutatott példa), vagy a szabályozott rendszer viselkedése olyan, hogy azt visszacsatoló szabályozással nagy szabályozási időállandóval lehet megoldani; akkor modell prediktív szabályozás (MPC) az egyik alkalmazható szabályozási megoldás [53]. Az irányítás sémáját a 19. ábra szemlélteti [65]. A szabályozó működési elve, hogy egy meghatározott predikciós horizonton kiszámítja azokat a munkapontokat és az ezekhez tartozó szabályozott- és beavatkozóparaméter értékeket, amelyeken keresztül eljut a szabályozott rendszer az alapjelig, ezt a szabályozott rendszer dinamikus modelljéből számítja ki [66]. Az alapjelet egy kijelölt üzemeltetési tartományban a berendezés stacioner modelljéből egy gazdasági célfüggvény alapján szélsőérték kereséssel határozza meg. Ezzel biztosítja a maximális termék kizozatalt és a minimális energia felhasználást.



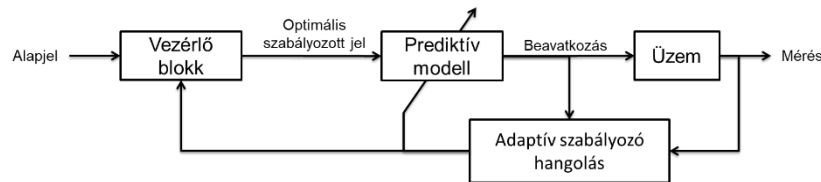
19. ábra: Modell prediktív szabályozó sémája [65]

A desztillációs rendszerek szabályozásánál problémát jelent az előzőekben említett nem lineáris viselkedés. Ennek a következménye, hogy a szabályozott objektum dinamikus és stacioner viselkedése változik a munkapont függvényében. Ennek a jelenségnek a hatása csökkenthető, ha a szabályozókat adaptívan hangolják. A 20. ábra egy példát mutat be PID szabályozó adaptív hangolására, az algoritmus értékeli az éppen aktív paraméterekkel a szabályozás minőségét és egy előre meghatározott paraméter kombinációk halmazából választja ki az optimális paramétereket [67].



20. ábra: Adaptívhangolási séma PID szabályozó esetén [67]

A modell alapú szabályozóknál az adaptív hangolás a modell paraméter változtatását jelenti a munkatartomány függvényében, ezt szemlélteti a 21. ábra [68]. Látható, hogy mind a stacioner (vezérlő blokk) mind a dinamikus modellt (prediktív modellt) változtatják.



21. ábra: Adaptívhangolási séma modell alapú szabályozó esetén [68]

Az előbbieken kívül alkalmazható még a programozott adaptív szabályozás, amelynek az a lényege, hogy a szabályozó paramétereit előre meghatározott karakterisztika alapján, egy kiegészítő változó (szakaszos desztilláció esetén pl. az idő) függvényében határozza meg. A vegyiparban elterjedtek még az önhangoló szabályozók is, amelyek on-line paraméter identifikációra és modell alapú szabályozó tervezésre épülnek.

2. Szétválasztó rendszerek kialakítása

A dolgozat célkitűzése, hogy feltárja az összefüggést a szétválasztandó elegy tulajdonságai és a szétválasztó rendszer szerkezete, valamint a szabályozórendszer felépítése között. Az összefüggéseket szétválasztási rendszerekkel kapcsolatos tervezési feladatok megoldása során vizsgáltam.

Ebben a részben először egy egyszerű háromtermékes szétválasztási probléma megoldását mutatom be osztott terű rektifikáló oszloppal. Stacioner szimuláció segítségével meghatározom a műveleti egységre jellemző főbb paraméterek optimális értékét.

A dolgozat második témakörében a soktermékes szétválasztó rendszer felépítésének tervezését vizsgálom. A desztilláló rendszert hagyományos oszlopok hálózataként építem fel. A struktúra meghatározást termodinamikai mutatószámok és ökölszabályok segítségével végzem el, valamint szélsőérték keresésen alapuló algoritmikus módszerrel választottam ki az optimális konstrukciót.

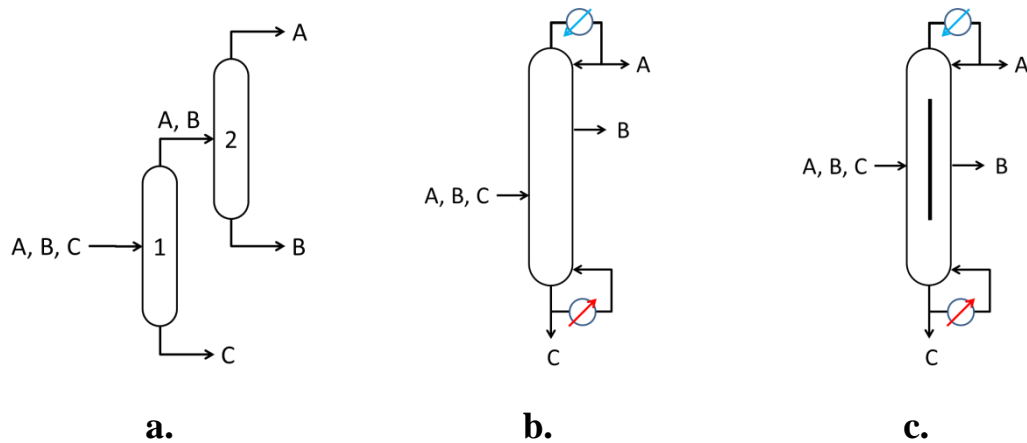
Az utolsó fejezetben egy hagyományos kéttermékes és egy ipari háromtermékes desztilláló oszlop szabályozását mutatom be, egy többszintes szabályozórendszer megalkotása során.

A vizsgálatok során kiemelem azokat az általánosítható alapelveket, melyek segítséget nyújthatnak a desztillálóberendezések tervezése során.

2.1 Összetett rektifikáló oszlop vizsgálata

Az egyszerűbb szétválasztási feladatok egy berendezéssel is megoldhatók. A szétválasztó berendezések struktúrájának meghatározása termodinamikai, műveleti és gazdasági megfontolásokon alapszik. Például a háromtermékes szétválasztási feladat esetén, amiben a termékek könnyen szétválaszthatók meg kell vizsgálni, hogy az üzemeltetési és beruházási költség csökkenthető-e összetett oszlopok alkalmazásával.

A 22.a ábrán a háromtermékes szétválasztórendszer látható, ez a szétválasztó rendszer hagyományos oszlopok sorba kapcsolásával hozható létre. Előnye, hogy tervezési eljárása egyszerű, és a termékminőségek viszonylag könnyen szabályozhatók. Elterjedten alkalmazzák ennek egy változatát, az oldaltermékes oszlopokat, melyet a 22.b. ábra szemléltet, ezzel a beruházási költség csökkenthető. A beruházási költség ennél a konstrukciónál azért alacsonyabb, mert a két oszlop helyett egyet kell installálni, és négy hőcserélő helyett kettőt kell alkalmazni. Hátránya, hogy az oldaltermék tisztasága csak korlátozottan kézben tartható. Az ipari gyakorlat során fellelhetők olyan megoldások, melyekben az ilyen készülékek energiaigényét osztófal beépítésével csökkentik (ld. 22.c. ábra), e mellett ezzel az oldaltermék tisztaságát is növelhetik.



22. ábra: Háromtermékes szétválasztó rendszerek

Irodalmi kutatásaim során nem találtam olyan munkát, mely az osztott terű kolonnát úgy vizsgálja, hogy a konstrukcióra jellemző paramétereket változtatva bemutatja a kolonna energiaigény változását és így határozza meg az optimális struktúrát.

A következőkben bemutatott esettanulmányban számoltam egy termodinamikai szempontból könnyen megoldható szétválasztási feladat megoldásával az osztófalal rendelkező háromtermékes osztott terű kolonna különböző konstrukcióinak energiaszükségletét, valamint a konstrukciók energiaigényének változását különböző összetételű szétválasztandó elegyekre. A számítások során megvizsgáltam a kolonnába épített fal nagyságát illetve pozícióját. A vizsgálatok eredményeként meghatároztam az optimális konstrukciót, ennek az energiafelhasználását összehasonlítottam az azonos geometriai méretű oszlop energia felhasználásával.

Osztott terű kolonna leképezése stationer szimulátorban

Az esettanulmány kidolgozása során az első lépésben definiáltam az elválasztási feladatot, amelyet Aspen PlusTM stationer szimulációs szoftver segítségével oldottam meg. A szétválasztandó elegy forrásponthoz benzolt, toluolt és xilolt (BTX) tartalmaz, a vizsgálatok során több betáplálási összetétellel számoltam, ezeket a 5. táblázat szemlélteti. A betáplálási áram komponens összetétele miatt a Peng-Robinson [69] tulajdonságbecslő módszert alkalmaztam a számításokhoz. A koncentrációkat úgy határoztam meg, hogy a szétválasztási feladat ne változzon meg jelentősen, de szemléltetni tudjam a betáplálás változás hatását. Az eredmények bemutatása során vizsgált paraméter hatását külön szemléltettem a D összetételű elegyen.

5. táblázat: A betáplálás összetétel tömegtörtben kifejezve

Elegy:	A	B	C	D
Benzol	0,4	0,3	0,3	0,33
Toluol	0,3	0,4	0,3	0,33
Xilol	0,3	0,3	0,4	0,33

A vizsgálatok során az oszlop kiforralási teljesítményét használtam az oszlopok jellemzésére. Ezt az egyszerűsítést a következő megfontolások alapján alkalmaztam:

- Az összehasonlított konstrukciók főbb méretei nem változnak, így a beruházási költségek közel azonosnak tekinthetők.
- A kondenzátor és a kiforráló hőmérséklete a konstrukciók esetén nem változnak, mivel a termékek összetétele a definiált paraméter és az oszlopnymás sem változik. Ezért a segédenergiák hőmérsékletét nem kell megváltoztatni, így a hőcserélőkön átadott hőmennyiség határozza meg az oszlop üzemeltetési költségét.
- Az oszlop fejhőmérséklete $\sim 80^{\circ}\text{C}$ a fenékhőmérséklete $\sim 143^{\circ}\text{C}$, ilyen hőmérséklet viszonyok mellett a kiforralóban alkalmazott segédenergia ára jelentősen nagyobb, mint a kondenzátorban alkalmazott segédenergia ára.

A szétválasztási feladat megoldására tányéros oszlopokat vizsgáltam, melyben egy tányér egy egyensúlyi egységnek felel meg. Az osztófal két oldalán megegyező számú tányér helyezkedik el. Az osztófal két oldalán egymás mellett elhelyezkedő tányér az oszlop tányérszám meghatározása során egy tányérnak felel meg.

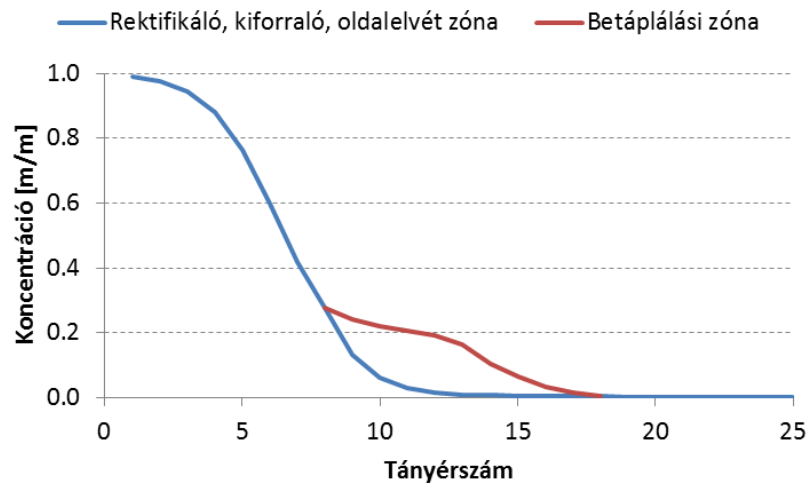
A vizsgálatok során a következő paraméterek nem változnak:

- Tányérszám: 25
- Betáplálási tányér: 13
- Elvételi tányér: 13

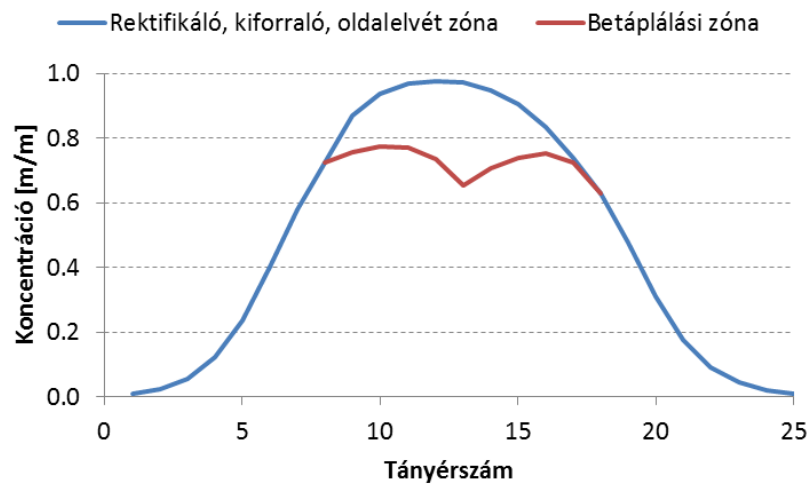
Az irodalmi összefoglalóban az 7. ábra jobb oldala szemlélteti az osztott terű kolonna dekompozícióját. Mivel a szimulációs szoftverben nincs olyan blokk, amellyel a műveleti egységet modellezni lehetne, ezért négy részletes oszlop blokk összekapcsolásával alkottam meg a készülék szimulátorát. Az egyes blokkok az oszlop egyes zónáit írják le (ld. 7. b ábra):

- Betáplálási blokk: Kiforralót és kondenzátort nem tartalmazó kolonna blokk. Tányérszáma megegyezik a betáplálási zóna tányérszámával. A blokk csak kör keresztmetszetű oszlop leképezésére alkalmas, ezért a blokkban megadott átmérőt úgy határoztam meg, hogy az osztott terű kolonna betáplálási zónájának áramlási keretmetszetével megegyezzen a blokk keretmetszete.
- Oldalelvét blokk: a betáplálási blokkal analóg módon határoztam meg a paramétereit.
- Rektifikáló blokk: Csak kondenzátort tartalmazó blokk. A tányérszáma megegyezik az osztófal feletti tányérszámmal.
- Kiforráló blokk: Csak kiforralót tartalmazó blokk. A tányérszáma megegyezik az osztófal alatti tányérszámmal.

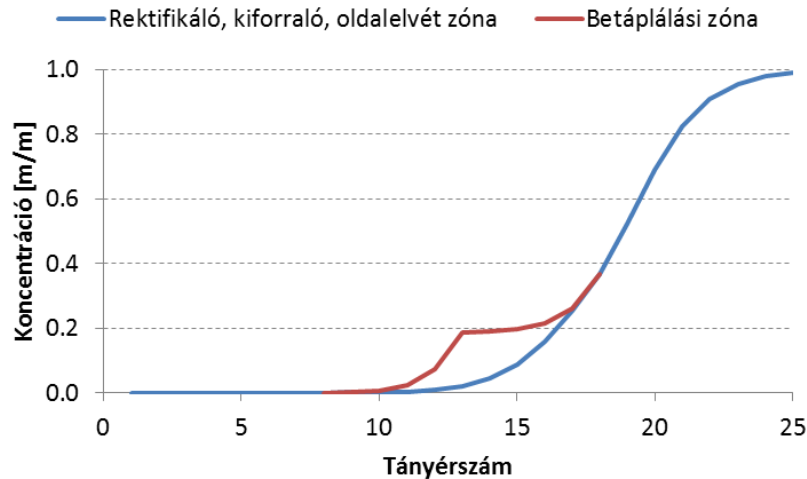
A 23-26. ábrák szemléltetik a kolonna jellegzetes profiljait. A 24. ábrán látható a toluol koncentrációprofilja az osztott rendszerben. Jól látható, hogy az elvételi oldalon a toluol koncentrációja magasabb, mint a betáplálási oldalon, és nem zavarja a betáplálási áram hatása. Ezért a betáplálási tényér helyét nagyobb szabadsággal választhatjuk meg, mivel így csak a betáplálási oszloprészben kialakuló koncentrációprofil kell figyelembe venni. Ha a benzol és a xilol elválasztása éles a betáplálási részen, akkor látható, hogy a kolonna felső részében a xilol koncentráció (ld. 25 ábra) az alsó részében a benzol koncentráció (ld. 23. ábra) elhanyagolható. Mivel a fal két oldalán a szembe levő terekben az összetétel eltér egymástól, így a hőmérsékletprofil is más alakú a két oldalon (ld. 26 ábra).



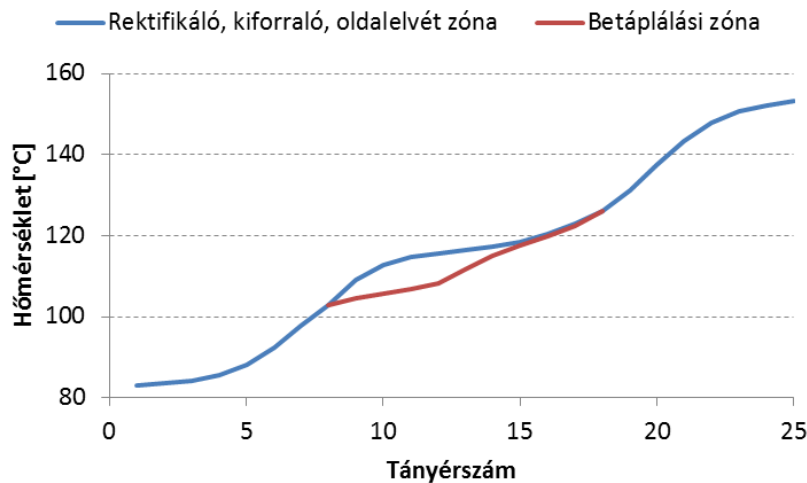
23. ábra: Osztott terű kolonna folyadék fázis benzol koncentrációprofil (ld. 1. Melléklet)



24. ábra: Osztott terű kolonna folyadék fázis toluol koncentrációprofil (ld. 2. Melléklet)



25. ábra: Osztott terű kolonna folyadék fázis xilol koncentrácioprofil (ld. 3. Melléklet)



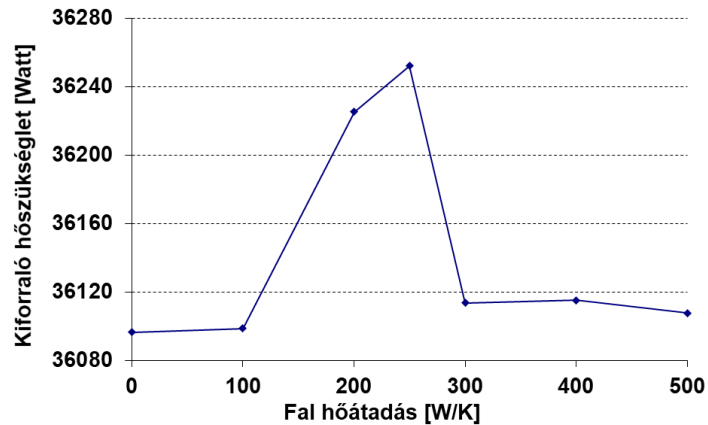
26. ábra: Osztott terű kolonna hőmérséklet profil (ld. 4. Melléklet)

Hőátadás hatása

Az első vizsgálatban tanulmányoztam, a hőátadási együttható változtatásával hogyan változik az osztott terű kolonna energiaigénye. A hőátadási tényező és a felület szorzatának értékét 0 W/K-tól 500 W/K értékig változtattam. A számítás eredményei azt mutatják, hogy az említett paraméter változása nem befolyásolja szignifikánsan a kiforraló energiaigényét, mivel az egyes hő szükségletek eltérése a hibahatáron belül volt. (ld. 27. ábra)

Ez azzal magyarázható, hogy a falon átadott energia legalább két nagyságrenddel kisebb a kiforraló energia igényénél, így a kolonna belsejében kialakuló hőáramok sokkal nagyobbak annál, hogy az átadott hőnek meghatározó szerepe legyen.

Ezért a következő vizsgálatokban a hőátbocsátási tényező és a felület szorzatát 250 W/K-nak vettem, így számítottam ki a tányéronként átadott hőt. Ez egy 1 m² szénacél fal hőátbocsátási tényezője.

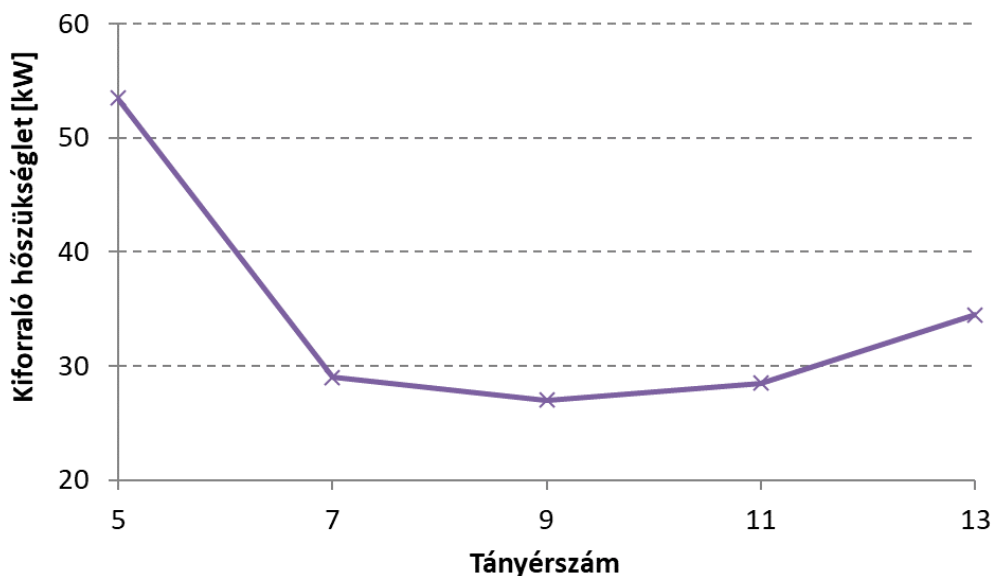


27. ábra: Osztófal hőátadásának hatása a kiforráló energiaszükségletére (ld. 5. Melléklet)

Falmagasság hatása

Ebben a vizsgálatban a különböző falmagasságok hatását tanulmányoztam, ahol a betáplálási és elvételi oldal keresztmetszete megegyezik. Ennek során centrális helyzetű falakat vizsgáltam, ez azt jelenti, hogy a betáplálási és elvételi tányérok fölött és alatt ugyanannyi egyensúlyi egység van kettéosztva, így csak páratlan számú tányért elválasztó fal lehetőségeit vizsgáltam.

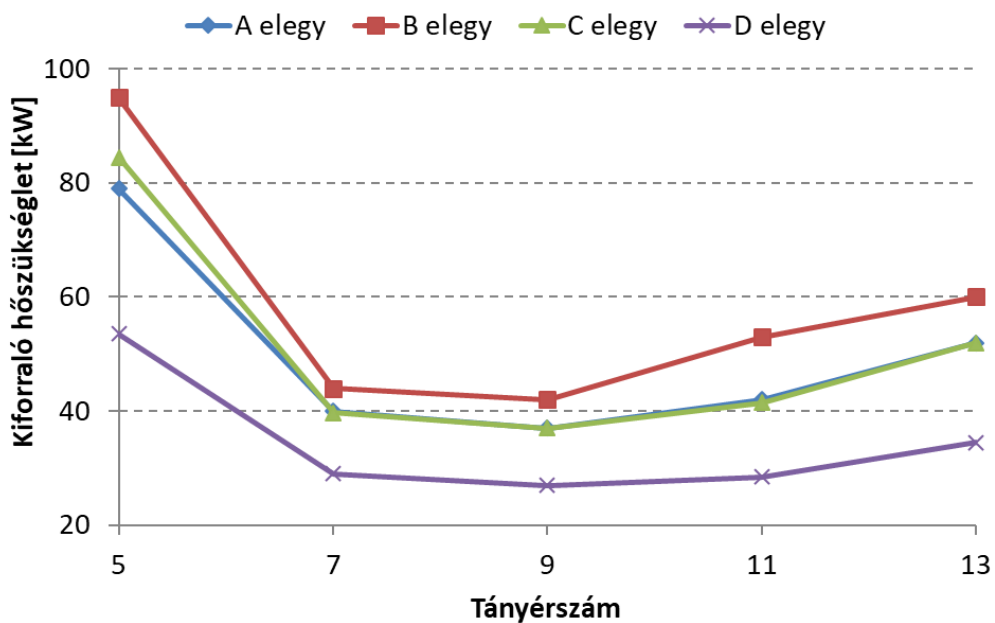
Az első vizsgálat során a BTX elegy komponensei azonos koncentrációjúak, eredményét a 28. ábra szemlélteti. Az eredményekből látszik, hogy a kilenc tányér magasságú fallal ellátott kolonna kiforrálási energiája a legkisebb ötödik tányértól a minimum pontig meredeken csökken az energia igény, a minimumtól enyhén emelkedik.



28. ábra Osztófal méretének hatása a kiforráló energiaszükségletére (ld. 6. Melléklet)

A meredeken csökkenő szakasz magyarázata, hogy minél kisebb a fal magassága, az osztott falú kolonna annál jobban közelít az oldalelvételes kolonnához, így a fal nem akadályozza meg a betáplálási és az elvételi áramok keveredését. Ezért növelve a fal magasságát, csökkenő energiaigényt kapunk. Az energiaigénynek van egy minimuma, esetünkben 9 tányérmagasságnál, ami után növelve a fal magasságát ismét nő az energiaigény. Ez magyarázható azzal, hogy a növekvő osztott rész miatt a felső és az alsó rész mérete lecsökkent, így ott a komponensek szétválasztásához nagyobb reflux és kiforralási arány szükséges.

A vizsgálat második felében a szétválasztandó elegy koncentráció hatását vizsgáltam. A vizsgálat eredményeit a 29. ábra tartalmazza.



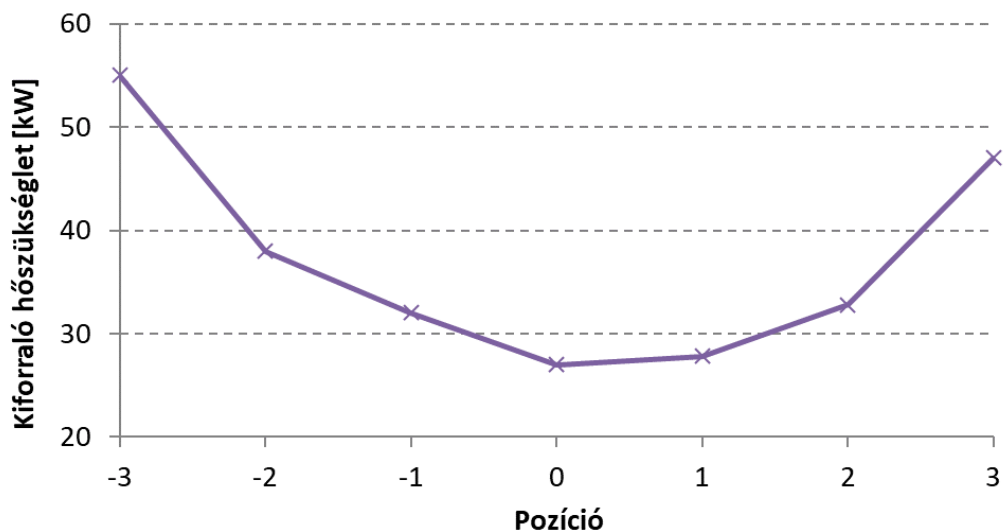
29. ábra Osztófal méretének és az összetétel hatása (adatokat ld. 6. Melléklet; összetételeket ld. 5. táblázat)

Az eredményekből látható, hogy minden elegynél az energiaszükséglet-görbe alakja hasonló és mindegyik minimuma a 9 tányérmagasságú falnál van. A kolonna konstrukciók energiaigénye akkor a legkisebb, ha az egyenlő tömegtörttel rendelkező elegyet választott szét. Legnagyobb energiaigénye a rendszereknek akkor van, ha az elegyben a toluol van túlsúlyban. Ez azzal magyarázható, hogy a felső és alsó részbe nagyobb lesz a toluol koncentráció, így több energiát kell befektetni a kolonna alján és tetején a megfelelő terméktisztaság elérésének érdekében. Az „A” és „C” elegy esetén az energia igények megegyeznek. Ha a szétválasztandó elegyben a benzol van túlsúlyban, akkor a rendszerekben több energiát kell a kiforralókba bevinni a kellő terméktisztaság elérése érdekében, mivel az oszlop aljáról több benzolt kell elgőzölgöztetni. Ha az elegyben a xilol koncentráció a legnagyobb, akkor nagyobb refluxot kell biztosítani a rendszerekben és ez a kiforralók energiaigényét is megnöveli. A két elegy esetén az energiaigények azért egyeznek, mert a benzol és a xilol párologáshője közel azonos.

Függőleges pozíció hatása

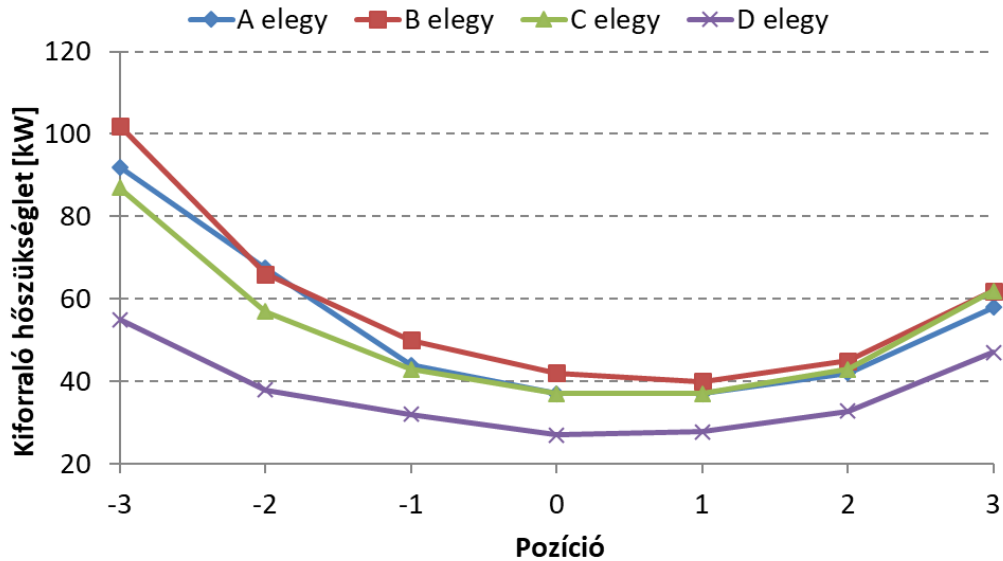
Ezután tanulmányoztam a 9 tányér magasságú fal függőleges helyzetének hatását a kiforráló energia igényére. A fal helyzetét úgy változtattam, hogy a fal két oldalán lévő rész tányérszámát állandónak vettem, lefele mozgás esetén az alsó rész tányérszámát ugyanannyival csökkentettem, mint amennyivel növeltem a felsőrész tányérszámát. A vizsgálat során a betáplálási és elvételi oldal keresztmetszete megegyezik.

Az egyenlő tömegarányú elegyre végzett vizsgálat eredményeit a 30. ábra szemlélteti, a centrális elhelyezésű falat az abszcisszán „0” értékkel jelöltem, az ehhez képest lentebb elhelyezkedő falat negatív előjellel jelöltem. A vizsgálat eredményeiből látszódik, hogy akkor a legkisebb a kolonna kiforrálási hőigénye, ha a fal centrális helyzetű. Az aszimmetriával az energiaigény nő. Az energia minimum helye magyarázható azzal, hogy a szétválasztandó komponensek tömegárama megegyezik. A centrálistól lentebb helyezkedő fal pozíciójú konstrukciók energiaigénye nagyobb, mint a velük azonos helyzetű, de a centrálistól magasabban lévő fallal ellátott konstrukciók energiaigénye. Ez magyarázható azzal, hogy a betáplált elegy toluol mennyiségének nagyobb hányada a fal alatt jut az elvételi részbe az alsó részen keresztül. (24. ábra) Ha a falat alacsonyabb pozícióba juttatjuk, azzal az alsó rész tányérszámát csökkentjük, így nagyobb energia kell a kívánt termékminőség eléréséhez.



30. ábra: Osztófal pozíció hatása a kiforráló energiaszükségletére (ld. 7. Melléklet)

Megvizsgáltam az energiaigény változását az egyes konstrukciónál abban az esetben, ha a betáplálás összetétele megváltozik. A betáplálás tömegtörtjeit a 5. táblázat, a vizsgálat eredményit a 31. ábra tartalmazza.



31. ábra: Osztófal pozíció és az összetétel hatása (adatokat ld. 7. Melléklet; összetételeket ld. 5. táblázat)

Az eredményekből látható, hogy minden elegynél az energiaszükséglet-görbe alakja hasonló. A „B” elegy esetén az energia minimum a „+1” pozíciónál van, ez azzal magyarázható, hogy ebben az elegyben a toluol koncentráció a legnagyobb. Mivel ez a komponens nagy része az alsó részen keresztül megy át az elvételi részbe, ezért előnyösebb a nagyobb tányérszám ebben az oszloprészben. Az „A, C, D” esetben az energia minimum a centrális helyzetnél van. Ebben az esetben is a kolonna konstrukciók energiaigénye akkor a legkisebb, ha az egyenlő tömegűvel rendelkező elegyet választjuk szét.

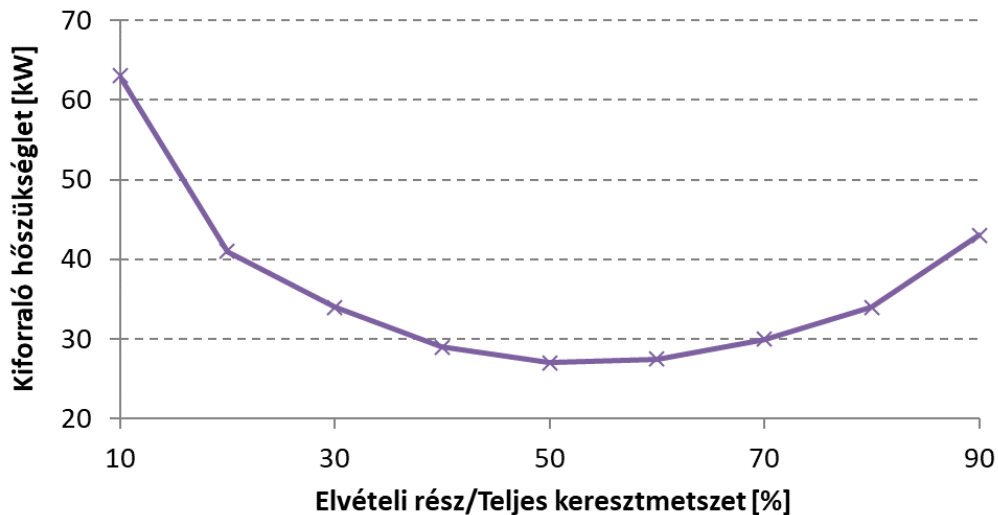
Keresztmetszetarány hatása

A következő vizsgálat során a fal sugárirányú pozíciójának hatását vizsgáltam a kolonna energia igényére. A fal ebben az esetben kilenc tányérmagasságú és függőlegesen középhezletű. Az osztott térbe belépő áramok (a felső részből lefolyó folyadék és az alsó részből felszálló gőz) arányait úgy határoztam meg, hogy azok megegyezzenek az osztott rész keresztmetszeteinek arányával, így a két oszloprészben a nyomásesések megegyeznek. Az eredmények a 32. ábra szemlélteti.

Látható, hogy ha az elvételi oldal keresztmetszete 50%-os a köpeny keresztmetszetéhez képest, akkor a legkevesebb az energiaigénye az oszlopnak. Megfigyelhető, hogy 10 - 50% között az energiaigény gyorsabban növekszik, mint 50 - 90% között.

A keresztmetszet arány meghatározza, hogy a felső és az alsó részből kilépő gőz és folyadék milyen arányban oszlik meg a középső rész két oldala között. Minél több egy oszloprészbe alulról belépő gőz és felülről belépő folyadék mennyisége, annál élesebb az elválasztás. A betáplálási oldalon benzol és a xilol elválasztása történik, a két komponens forráspontja távol esik egymástól, így könnyen elválaszthatók egymástól, ezért kevesebb gőz és folyadék szükséges a

frakcionáláshoz, mint az elvételi oldalon. Ha az elvételi részt lecsökkentjük, akkor kevesebb reflux és kiforrálás esik az oszlop e részére, mivel itt nehezebb az elválasztási feladat, így érzékenyebb lesz a keresztmetszet csökkentésére, mint a betáplálási rész.



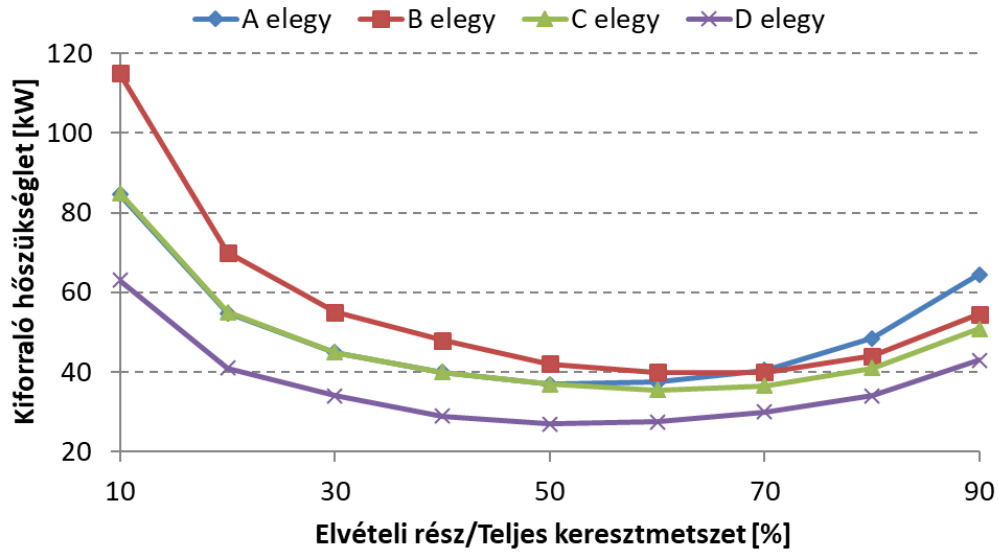
32. ábra: Keresztmetszatarány hatása a kiforráló energiaszükségletére (ld. 8. Melléklet)

A számítások második felében megvizsgáltam, hogyan változik az egyes konstrukciók energiaigénye a betáplálási áram koncentrációjával. A betáplált elegyek tömegtörtjeit a 5. táblázat, a vizsgálat eredményeit a 33. ábra tartalmazza.

Az eredményekből látszik, hogy a görbék alakja hasonló. Az kiforrálási energiaminimumok helyét a 6. táblázat tartalmazza, látható a „B” elegy energia minimumához rendelhető a legnagyobb elvételi rész. Ez azért van, mert ebben a keverékben a legmagasabb a toluol koncentráció. Az „A” és „C” elegy görbéje 50%-os pontig megegyezik, ezután a benzolban dús „A” elegyhez tartozó energiaszükségletek nagyobbak, ez azért van, mert több gőz kell a benzol kihajtásához.

6. táblázat: Minimális kiforráló energiaszükségletekkel rendelkező keresztmetszatarányok

Elegy megnevezése	Energiaminimum helye (Elvételi rész/Teljes keresztmetszet [%])
A	50
B	65
C	60
D	50



33. ábra: A keresztmetszetarány és az összetétel hatása (adatokat ld. 8. Melléklet; összetételeket ld. 5. táblázat)

Osztott terű kolonna energia kihasználása

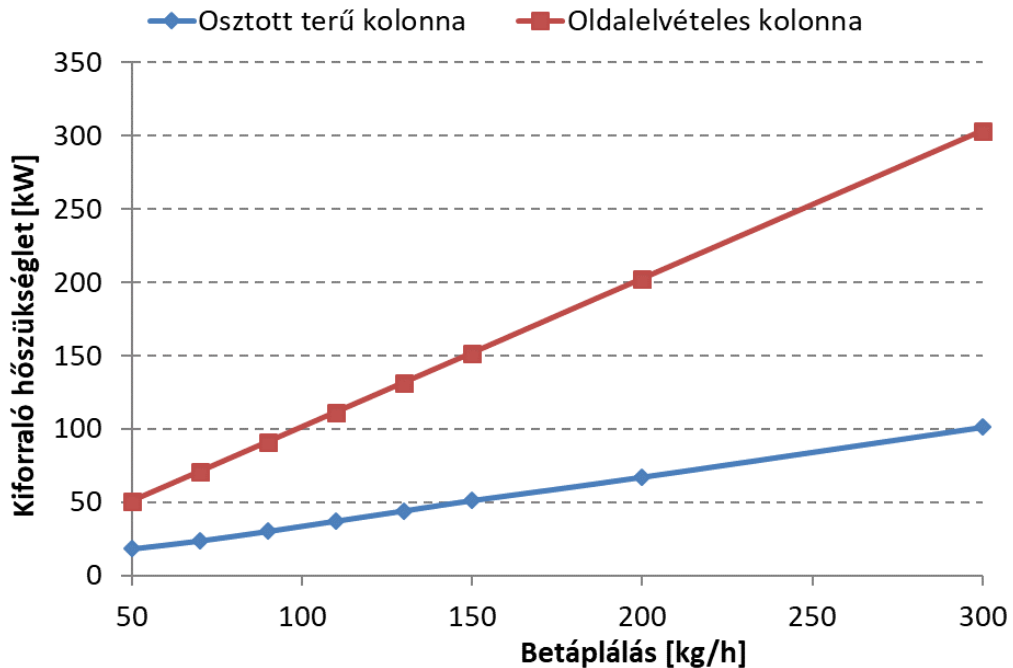
Ezen vizsgálat során az osztott terű rendszer energiaszükségletét összehasonlítottam egy vele azonos tányérszámú oldalelvételes kolonna energia igényével (ld. 7. táblázat), változó betáplálási mennyiség mellett. A hagyományos oldalelvételes kolonnánál meghatároztam a minimális kiforrálási energia szükségletű konstrukciót a betáplálási és oldalelvételi hely változtatásával.

7. táblázat: Oldalelvételes és osztott terű kolonna paraméterei

	Oldalelvételes kolonna	Osztott terű kolonna
Tányérszám	25	25
Betáplálási tányér	20	13
Elvételi tányér	13	13
Elvételi rész/Teljes keresztmetszet [%]		50 %
Fal függőleges pozíciója		centrális
Fal melletti tányérok száma		9

A vizsgálatok eredményeit a 34. ábra szemlélteti. Látható, hogy mind a két rendszer energiaigénye lineárisan változik a betáplált anyag mennyiségével, ez várható, hiszen a modellek egyensúlyi tányérokkal számolnak. A vizsgálatot a „D” elegyre végeztem el, a lineáris viselkedésből feltételezhető, hogy a többi elegyel is hasonló eredmény születne.

Megállapítottam, hogy az oldalelvételes kolonna energiaigénye háromszorosa az osztott rendszer hőigényéhez képest.



34. ábra Oldalelvételes és osztott terű kolonna kiforrálóinak energiaszükséglete (ld. 9. Melléklet)

Következtetés

A vizsgálatok során feltárt összefüggésekből az alábbiakat állapítottam meg:

- Az osztott terű kolonna paraméter meghatározása során a bemutatott tartományokban nem ütköztem gazdasági korlátba, azaz a hagyományos oszlophoz képest az üzemeltetési költsége mindig kisebb volt, mivel az energiaigénye kisebb minden esetben. Ezért a háromtermékes elválasztások esetén meg kell vizsgálni a beruházási költséget figyelembe véve, hogy gazdaságos-e az alkalmazása.
- A vizsgálatokból látszik, hogy az energia megtakarítás mértéke függ a betáplálás összetételétől.
- A fal méretétől és pozíciójától nagymértékben függ a desztillálóberendezés energiaigénye. A falra vonatkozó optimális paraméter kombináció változhat a betáplálás összetételével, ezért javaslok érzékenységvizsgálatokat végezni az adott üzemeltetési tartományban.
- A bemutatott paramétervizsgálat algoritmizálható és optimális megoldást ad az adott szétválasztási feladatra, így meghatározható a gazdaságilag megfelelő oszlopkonstrukció.

2.2 Szétválasztási struktúra meghatározása

A sokkomponensű elegyeket szétválasztó rektifikáló rendszerek struktúrájának meghatározása összetett feladat. A feladat megoldása előtt definiálni kell a szétválasztási feladatot, amely során először meg kell határozni, hogy a szétválasztandó komponenseket hogyan definiáljuk. Az elegyek összetételét megadhatjuk desztillációs görbék segítségével, ezt olyan szénhidrogén

elegyek tulajdonságainak meghatározása során szokták alkalmazni, melyekben a nagyszámú komponensek mennyisége és koncentrációja nehezen meghatározható laboratóriumi eszközökkel. Ha a szétválasztandó elegy komponensei könnyen mérhetők, az egyes komponensek mennyiségével és koncentrációjával definiálhatjuk az áramok összetételét a szétválasztási feladat megoldása során. Az általam bemutatott szétválasztási feladatban a komponensek és azok koncentrációival írrom le az anyagáramok tulajdonságait.

N darab komponensből álló sokkomponensű elegyek esetén a szétválasztási feladat meghatározása során meg kell adni a szétválasztandó elegyben N-1 komponens koncentrációját. Ezután definiálni kell a szétválasztás termékeit. A termékek definiálása során a betáplálási áram komponenseit forrásponjtjuk alapján sorrendbe állítjuk. Egy-egy termékáramba csak forrásponji sorrend szempontjából szomszédos komponensek kerülhetnek, mivel desztilláció alkalmazásánál az anyagok tulajdonságai miatt ez a sorrend kötött. A termék áramokban meg kell határozni azt az egy vagy több komponens (kulcs komponens, állhat több komponensből is), melynek az arányát definiálni kell az termékáramban lévő összes komponenshez képest, ez az arány a tisztaság.

A termékek definiálása után meg kell állapítani, hogy az adott szétválasztási feladat termodinamikailag megoldható-e. A sokkomponensű elegyek esetén a szétválasztási feladat megoldható, ha a szétválasztási feladatot kéttermékes szétválasztásokra dekomponáljuk és az összes rész szétválasztási feladat megoldható.

Sokkomponensű elegyek esetén a szétválaszthatóság definíciója műveleti és gazdasági szempontból a kéttermékes elegyek szétválaszthatóságára vezethető vissza.

Szétválasztási feladat ismertetése

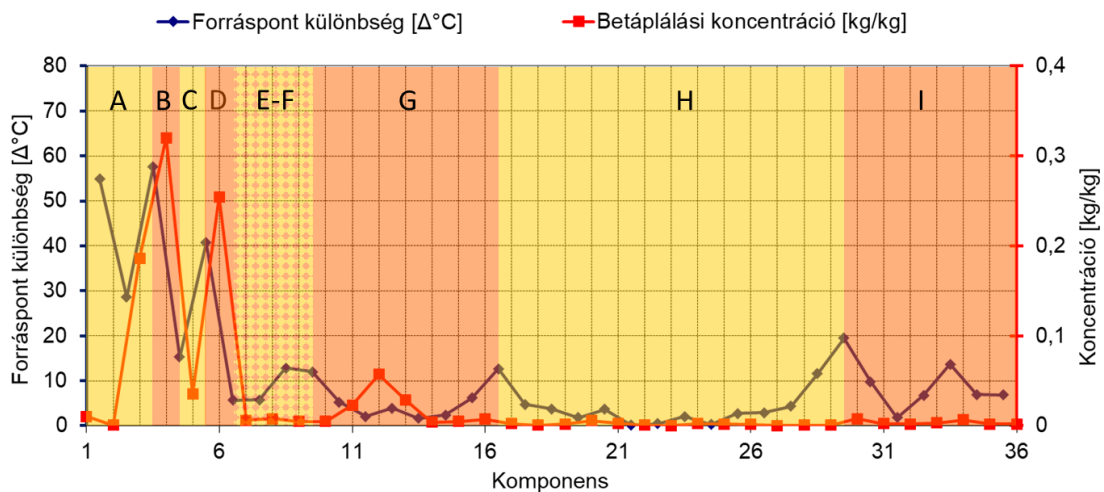
A sokkomponensű elegyek szétválasztására egy olefingyári pirogáz szétválasztásának vizsgálatát mutatom be. A kemencék utáni tisztított és lehűtött gáz 36 komponensből áll, a fő alkotói metán, etilén és propilén és különböző atomszámú egyéb szénhidrogén [70]. Ebben a fejezetben meghatározom a szétválasztó rendszer termékeit, és a termodinamikai mutatószámok alkalmazásával megvizsgálom a termékek szétválaszthatóságát.

Az iparban léteznek szétválasztórendszerek ennek a sokkomponensű elegynek a szétválasztására, azonban a számítások elvégzése során nem az iparban alkalmazott szétválasztórendszer értékelése vagy reprodukálása volt a céltom, hanem a szétválasztórendszer tervezés vizsgálata.

1. lépésként a sokkomponensű elegy komponenseit a normálforrásponjtjuk alapján sorba rendeztem. Ezt a sorrendet nevezem *forrásponji sorrendnek*. Megjegyzem, hogy a nyomás megfelelő tartományban való változása a sorrendet nem változtatta meg, más esetben viszont a forrásponji sorrend nyomás függő is lehet. (Ha változik a szétválasztás során a nyomás, akkor a

művelési nyomásokon kell a rendezést elvégezni.) A továbbiakban az egyes komponenseket a forrásponthoz sorszámmal jelölöm úgy, hogy a legillékonyabb komponens az első. A szétválasztási stratégia meghatározásának 2. lépéseként elkészítettem a pirogáz „összetétel és forráspont különbség” diagramját (ld. 35. ábra). A forráspont különbség két „szomszédos” komponens forráspontjai közötti különbség adott nyomáson. Ez a diagram szolgál arra, hogy 3. lépésként definiáljam a szétválasztás termékeit, a piaci igényeket is figyelembe véve. Az ábrán láthatók azok a helyek, ahol a szomszédos komponensek között a forráspont különbség kicsi, itt a desztilláció alkalmazása termodinamikai korlátba ütközik.

A termék állhat egy-egy komponensből, vagy a forrásponthoz sorrendben szomszédos komponensek csoportjaiból. A definiálásnál termodinamikai és gazdasági szempontokat kell mérlegelni, különösen nagy legyen a forráspont különbség, ill. a szétválasztás terméke piaci értelemben legyen értékes. A bemutatott feladatban kétfajta terméket határoztam meg aszerint, hogy tiszta komponens vagy egy komponens csoportot akartam termékként elvezetni. Tiszta komponensként az etilént (forrásponthoz sorrend: 4; B termék), az etánt (5; C termék) és a propilént (6; D termék) választottam el. A gázfrakcióban (A termék) elválasztottam a hidrogént (1) a szénmonoxidot (2) és a metánt (3). Céлом továbbá a négy szénatomszámú „C4” (10-16; G termék), az öt szénatomszámú „C5” (17-29; H termék) és az aromásokat (30-36; I termék) tartalmazó nehéz frakció szétválasztása. A cél az, hogy ezeket a komponenseket és komponens csoportokat nagy tisztaságban legyenek kinyerhetők. A szétválasztási feladat összes termékét az 8. táblázat foglalja össze.



35. ábra: A pirogáz összetétel és forráspont különbség diagramja (ld. 10. Melléklet)

Látható, hogy a három szénatomszámú „C3” frakciónál (7-9; E-F termék) könnyebb komponensek nagyobb mennyiségben vannak jelen a szétválasztandó elegyben, mint a három szénatomszámú frakciónál nehezebb vegyületek. Mivel a két eltérő koncentrációjú tartomány határán az éles szétválasztás nagy energiaigényű lenne, így az első szétválasztási lépésként egy

nem éles szétválasztással két termékre szeparáltam az elegyet. A fejtermékben a nagy koncentrációjú komponensek és a könnyű három szénatomszámú frakció (6-8; E termék), a fenéktermékben a kiskoncentrációjú komponensek és a nehéz C3 frakció (7-9; F termék) vannak jelen. Így a három szénatomszámú elegyet egy nehéz és egy könnyű frakcióban nyerem ki.

A termékek komponensei nem képeznek egymással azeotrópot, így a szétválasztásnak termodinamikai korlátja nincs.

8. táblázat: Szétválasztórendszer termékei

Termék elnevezése	Termék komponensei	Termék neve
A	1-3	Gáz frakció
B	4	Etilén
C	5	Etán
D	6	Propilén
E	6-8	Könnyű C3 frakció
F	7-9	Nehéz C3 frakció
G	10-16	C4 frakció
H	17-29	C5 frakció
I	30-36	Aromás frakció

A szétválasztó rendszerek struktúrájának meghatározása széles körben kutatott, így többféle megközelítéssel határozhatjuk meg a szeparációs rendszer felépítését. Az irodalmi összefoglalóban leírtak alapján az általam kiválasztott módszer első lépése a szétválasztó rendszer felépítése egybetáplálásos kéttermékes oszlopokkal. Ezután meg kell vizsgálni a szeparációs rendszert vagy egyes elemeit abból a szempontból, hogy hogyan lehet a költségeket csökkenteni.

Kéttermékes rektifikáló meghatározása

A soktermékes szétválasztó rendszerek hagyományos oszlopok hálózataként adható meg. Az egyes egységek energiafelhasználása és mérete határozza meg az egész szeparációs rendszer üzemeltetési és beruházási költségét. Ezért a szétválasztási sorrend meghatározása során elengedhetetlen meghatározni az egyes műveleti egységek paramétereit (egyensúlyi egységsszám, energia felhasználás, refluxarány. stb.).

Az egyszerű oszlopok konstrukcióját az irodalmi összefoglalóban bemutatott mutatószámok alapján lehet meghatározni. Ezeket a következőképpen lehet rangsorolni a kéttermékes szétválasztó rendszer felépítésének meghatározása során betöltött szerepük szerint:

1. A termodinamikai mutatószámok (pl.: α_j^i , Δt , forráspontgörbe) segítségével meg kell vizsgálni a szétválasztási feladat megoldhatóságát és a szétválasztandó komponensekre jellemző korlátokat. Ezek a vizsgálatok a szétválasztani kívánt

elegy komponenseinek tulajdonságából és a szétválasztási feladat ismeretében végrehajthatók.

2. A műveletet jellemző mutatószámok (pl.: N_{min} , R_{min}) meghatározásával információt kapunk a művelet megvalósíthatóságára. A tervezés során, tapasztalati úton szabnak korlátot ezeknek a mutatószámoknak. A bemutatott vizsgálatok során a 200 minimális elméleti egység számnál többel rendelkező elválasztásokat nem vizsgáltuk tovább.
3. A tervezési paramétereket változtatva az előző két lépésben meghatározott korlátokon belül a költségfüggvények alkalmazásával meg kell határozni az optimális konstrukciót.
4. Az „Energetikai szempontok” című fejezetben bemutatott módszereket alkalmazva vizsgálni kell, hogyan lehet a szétválasztó rendszer üzemelési költségét csökkenteni. Ezt a lépést akkor célszerű elvégezni, ha megvizsgáltuk annak lehetőségét, hogy összetett oszlopok alkalmazásával csökkenthető-e a szétválasztó rendszer költsége.

Szétválasztási sorrend meghatározása a termodinamikai tulajdonságok alapján

Ebben a fejezetben az ismertetett szétválasztási feladat megoldására alkalmas szétválasztó rendszer tervezését mutatom be. A tervezést termodinamikai mutatószámok alapján végeztem, és törekedtem az 50/50 %-os ökölszabály betartására. Az egyes szeparációs lépésekben kiszámoltam a minimális egyensúlyi egység számot, ha ez nagyobb mint 200, a szétválasztást nem megoldhatónak minősítettem. Gazdasági értékelést a következő fejezetben bemutatott algoritmikus módszer alkalmazása során végeztem.

A szétválasztási stratégia meghatározásának lépéseiben az egyes vágások helyét és a szétválasztási specifikációkat határoztam meg. Az 1. vágás helye a komponenseket két komponens osztályba sorolja (fej és fenék termékek osztálya). A 36. ábra alapján az $A = (1, 8)$ (könnyű komponens osztály), $B = (9, 36)$ (nehéz komponens osztály) vágást választottam az alábbiak miatt:

- Az A-ban vannak nagyobb koncentrációjú komponensek, szétválasztás után egy nagy tömegáramú néhány komponenset tartalmazó és egy kis tömegáramú sok komponenset tartalmazó elegyet kapunk. Így a termékek feldolgozása során elkerültem azt, hogy a desztillációknál nagy mennyiségeltérés legyen a termékek között, tehát be tudtam tartani az 50-50%-os ökölszabályt.
- A betáplálás gáz/gőz fázisú, amelyből a kisebb mennyiségben jelenlevő B-t kell kihűteni.
- A vágás határán a forráspont különbség kellően nagy, a szétválasztás könnyebb.

- A vágás határán kis koncentrációjú komponensek vannak (várhatóan kicsi lesz az átfedés).

Így összemérhető lesz a két ág termék száma, 4 és 5.

A szétválasztást „shortcut” módszerrel végeztem el, amihez kulcs komponenseket kell definiálnunk. Az A osztály kulcs komponenseként a propilént (6. komponens), a B osztály kulcs komponenseként pedig a 1,3- butadiént (12. komponens) választottam az alábbiakat szem előtt tartva:

- Vágási pont közeliek.
- Nem alacsony a koncentrációjuk.
- A forráspont különbségük jelentős.

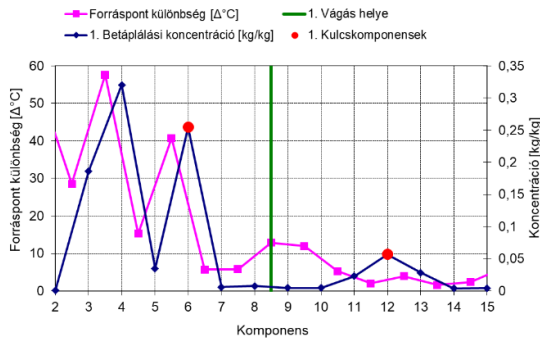
A kulcs komponensekre 99 %-os kihazatali specifikációt előírva, „shortcut” módszert alkalmazva elvégeztem a szétválasztást.

A következő szétválasztási lépésekben a vágások helyei a termékhatárookra esnek. A második elválasztásban az *1. szétválasztás* fejterméke volt a kiindulási elegy úgy, hogy a 3-as és a 4-es komponensek között volt a vágás helye és a kulcs komponenseknek is ezeket az anyagokat választottam (ld. 37. ábra) az alábbiak miatt:

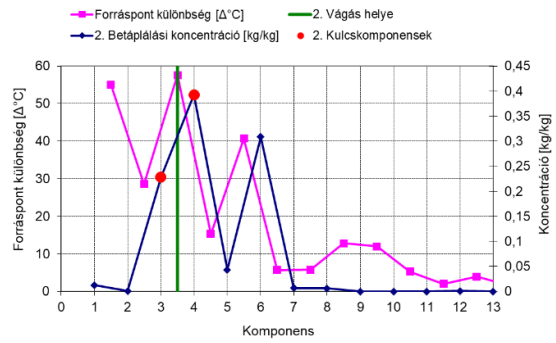
- A legnagyobb forráspont különbség ezen a termékhatáron van.
- Két termék közé esik a vágás.
- A kulcskomponensek a termékek határán vannak és a koncentrációjuk nagy.
- Gőz halmazállapotú betáplálás, és a fejtermék halmazállapota is gőz.

A kulcs komponensekre 99 %-os kihazatali specifikációt előírva, „shortcut” módszert alkalmazva elvégeztem az újabb szétválasztást. A további szétválasztásoknál törekedtem az 50/50 %-os ökölszabály betartására (ld. 38-43. ábrák). A vágás helyét csak akkor választottam kis hőmérsékletkülönbségű és kis koncentrációjú helyre, ha az a termék határokon volt (végtermék tisztaság miatt, pl.: 5-ös elválasztás). A kulcskomponensek kitermelése mindenesetben 99%-os volt. Az elválasztások betáplálási és termék koncentrációit a 11-13. mellékletek tartalmazzák.

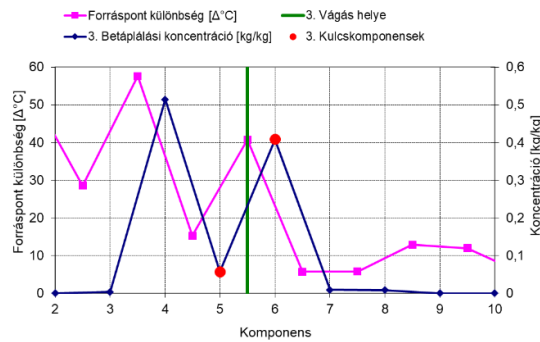
A pirogáz szétválasztására alkalmas szeparációs rendszer felépítését a 44. ábra szemlélteti, a „piaci végtermékek” minőségét pedig a 9. táblázat tartalmazza.



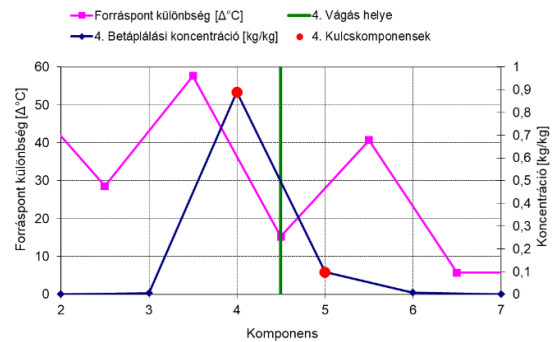
36. ábra: Ökölszabályokkal megalkotott szétválasztórendszer, 1. elválasztás



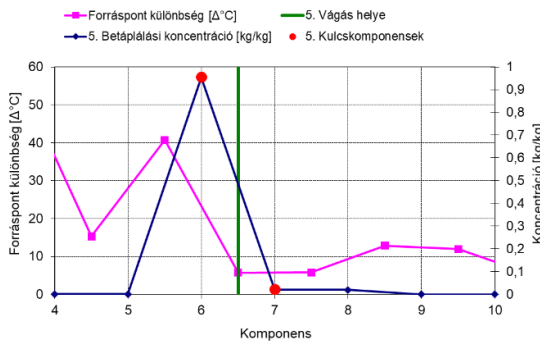
37. ábra: Ökölszabályokkal megalkotott szétválasztórendszer, 2. elválasztás



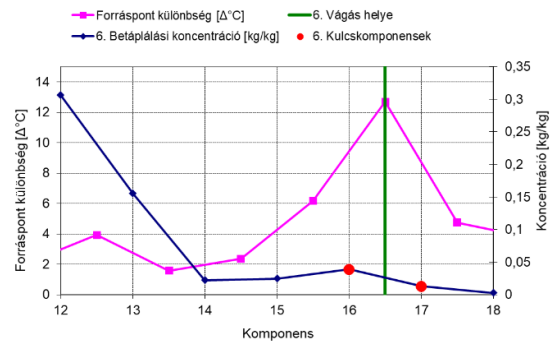
38. ábra: Ökölszabályokkal megalkotott szétválasztórendszer, 3. elválasztás



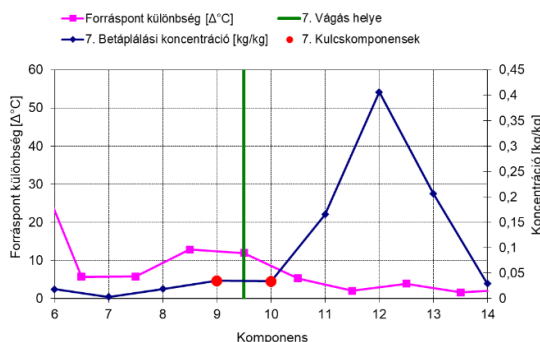
39. ábra: Ökölszabályokkal megalkotott szétválasztórendszer, 4. elválasztás



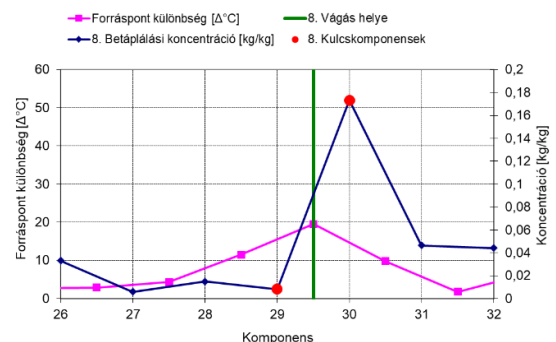
40. ábra: Ökölszabályokkal megalkotott szétválasztórendszer, 5. elválasztás



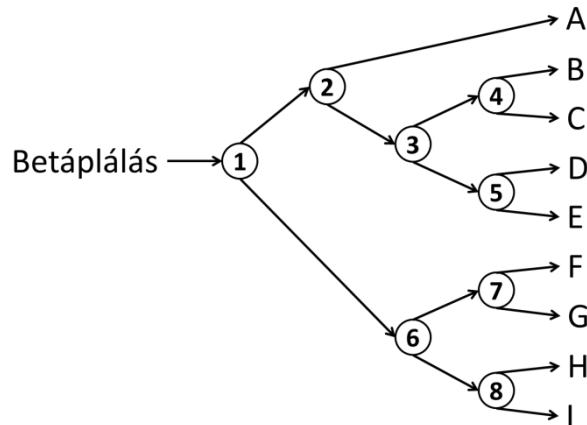
41. ábra: Ökölszabályokkal megalkotott szétválasztórendszer, 6. elválasztás



42. ábra: Ökölszabályokkal megalkotott szétválasztórendszer, 7. elválasztás



43. ábra: Ökölszabályokkal megalkotott szétválasztórendszer, 8. elválasztás



44. ábra: Ökölszabályokkal megalkotott szétválasztórendszer felépítése

9. táblázat: Termékek összetétele

Komponensek	Termékek összetétele [m/m]								
	A	B	C	D	E	F	G	H	I
1-3	0,98	0,01	0	0	0	0	0	0	0
4	0,02	0,99	0,08	0	0	0	0	0	0
5	0	0	0,86	0	0	0	0	0	0
6	0	0	0,06	1,00	0,18	0,24	0	0	0
7	0	0	0	0	0,44	0,04	0	0	0
8	0	0	0	0	0,38	0,25	0	0	0
9	0	0	0	0	0	0,46	0	0	0
10-16	0	0	0	0	0	0,01	1,00	0	0
17-29	0	0	0	0	0	0	0	1,00	0
30-36	0	0	0	0	0	0	0	0	1,00

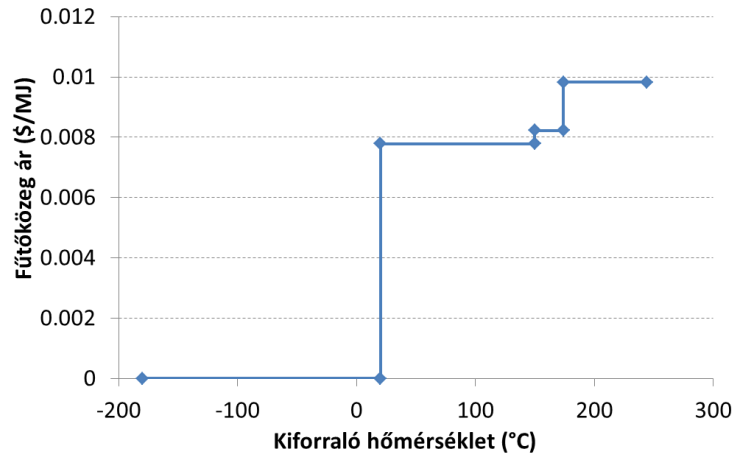
Szétválasztási sorrend meghatározása algoritmikus módszerrel

A vizsgált szétválasztási feladatra algoritmikus módszerrel is meghatároztam az optimális szétválasztó rendszert. Ennek a vizsgálatnak a célja, hogy gazdasági értékelés után meg tudjam határozni az optimális szétválasztó rendszert, így az irodalmi összefoglalóban bemutatott összefüggéseket (8-10) alkalmaztam a számításoknál. A három leghidegebb mélyhűtési energia költségét Carnot körfolyamat alapján számítottam ki, feltételeztem, hogy a kompresszorok elektromotorral vannak hajtva. A fennmaradó tartományban hűtővizet alkalmaztam. A legkisebb hőmérsékletű hidegenergia költsége kimagaslóan nagy, amely erős hatással lehet a megoldásokra. Ezért a hidegenergia áránál két esetet különböztettem meg annak érdekében, hogy érzékeltessem a hatását a megoldásra.

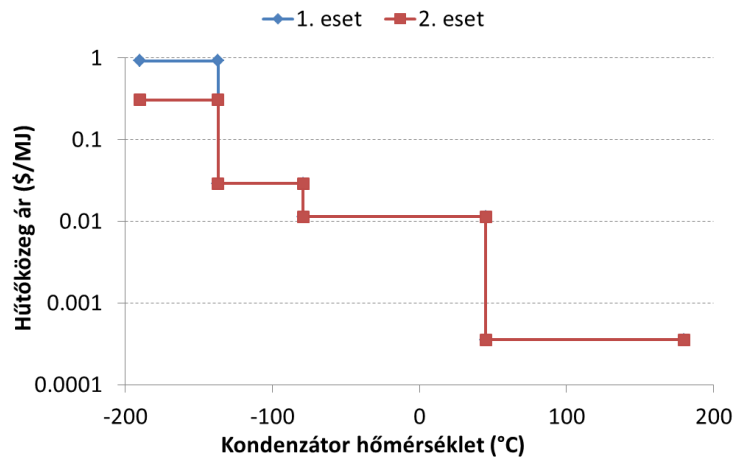
A három legdrágább melegenergia nagy-, közép- és kisnyomású gőz, a fennmaradó tartományban levegőt alkalmazok (ld. 45. ábra). A hidegenergia árának változását a kondenzátor

hőmérsékletének függvényében a 46. ábra szemlélteti. Az árakat a villamos energia és a földgáz árából származtattam.

A megadott függvényekkel az egyes szétválasztó rendszerekhez időegységre vonatkozó költséget tudtam rendelni, ami által a konfigurációk összehasonlíthatók és meghatározható az optimális elválasztó rendszer szerkezete.



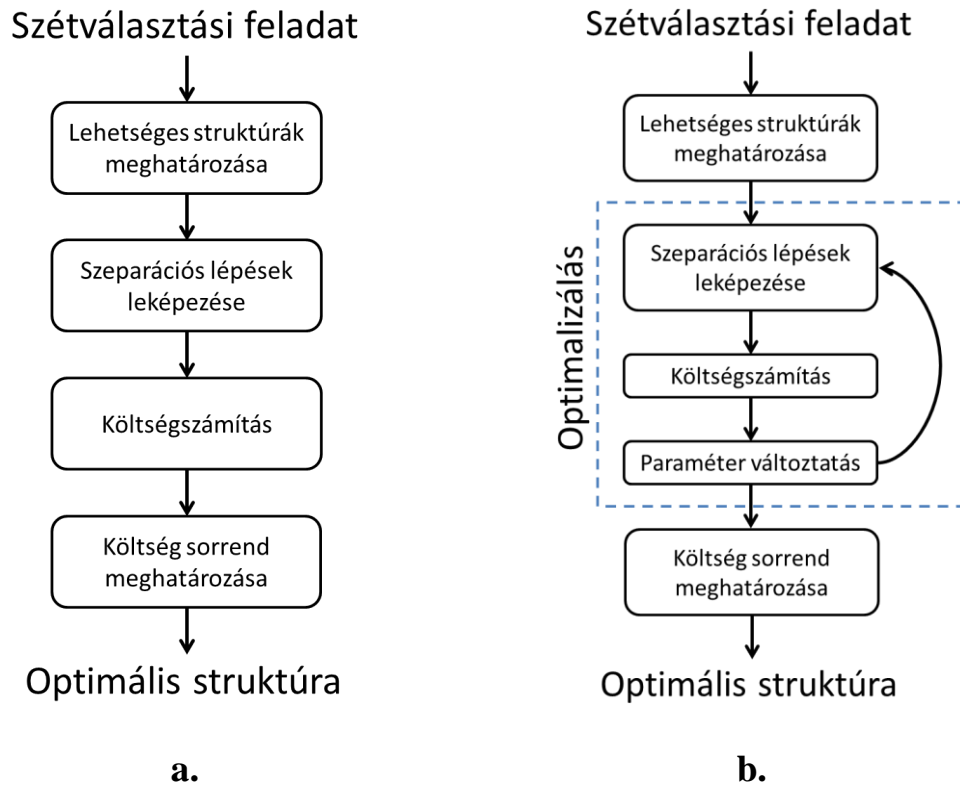
45. ábra: Melegenergia ára a hőmérséklet függvényében (ld. 14. Melléklet)



46. ábra: Hidegenergia ára a hőmérséklet függvényében (ld. 15. Melléklet)

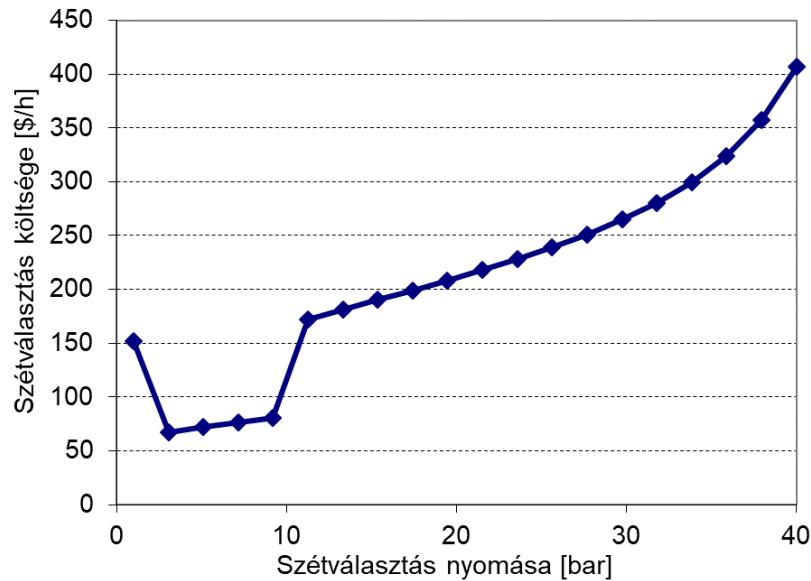
A szétválasztási feladat meghatározása során ismertettem, hogy az egyes termékek komponensei nem képeznek egymással azeotróp elegyet, így a szétválasztásnak termodinamikai korlátja nincs. Műveleti jelzőszámok alkalmazása során az előző fejezetekben ismertetett kritériumot alkalmaztam ($N_{min} < 200$). A munkám során kétféle algoritmussal határoztam meg az optimális szétválasztási struktúrát. Az algoritmusokat a 47. ábra szemlélteti. Az „a” algoritmus alkalmazása során leképeztem Aspen Plus™ stationer szimulációs szoftver segítségével a szétválasztási feladat megoldására alkalmas szétválasztó rendszereket rögzített nyomáson, és meghatároztam a szeparációk költségét. Az utolsó lépésben költségrendet állítottam fel. A „b” algoritmus az elsőhöz képest abban tér el, hogy meghatározza az egyes szeparációs lépések optimális nyomását

(ld. 48. ábra) és úgy állít költségsorrendet. A betáplálási áram komponens összetétele miatt a Peng-Robinson [69] tulajdonságbecslő módszert alkalmaztam a számításokhoz.



47. ábra: Algoritmusok az optimális szétválasztó rendszer meghatározására

Illusztrációként a szeparációs lépések minimális költségének meghatározását egy a későbbiekben bemutatott vizsgálaton keresztül mutatom be, amely a 48. ábrán látható. Az optimális költség 3 bar nyomáson található. A költség diagramban az ugrások azokban a pontokban vannak, amikor a kiforráló, ill. a kondenzátor hőmérsékletéből adódóan segédenergiát kell váltani.

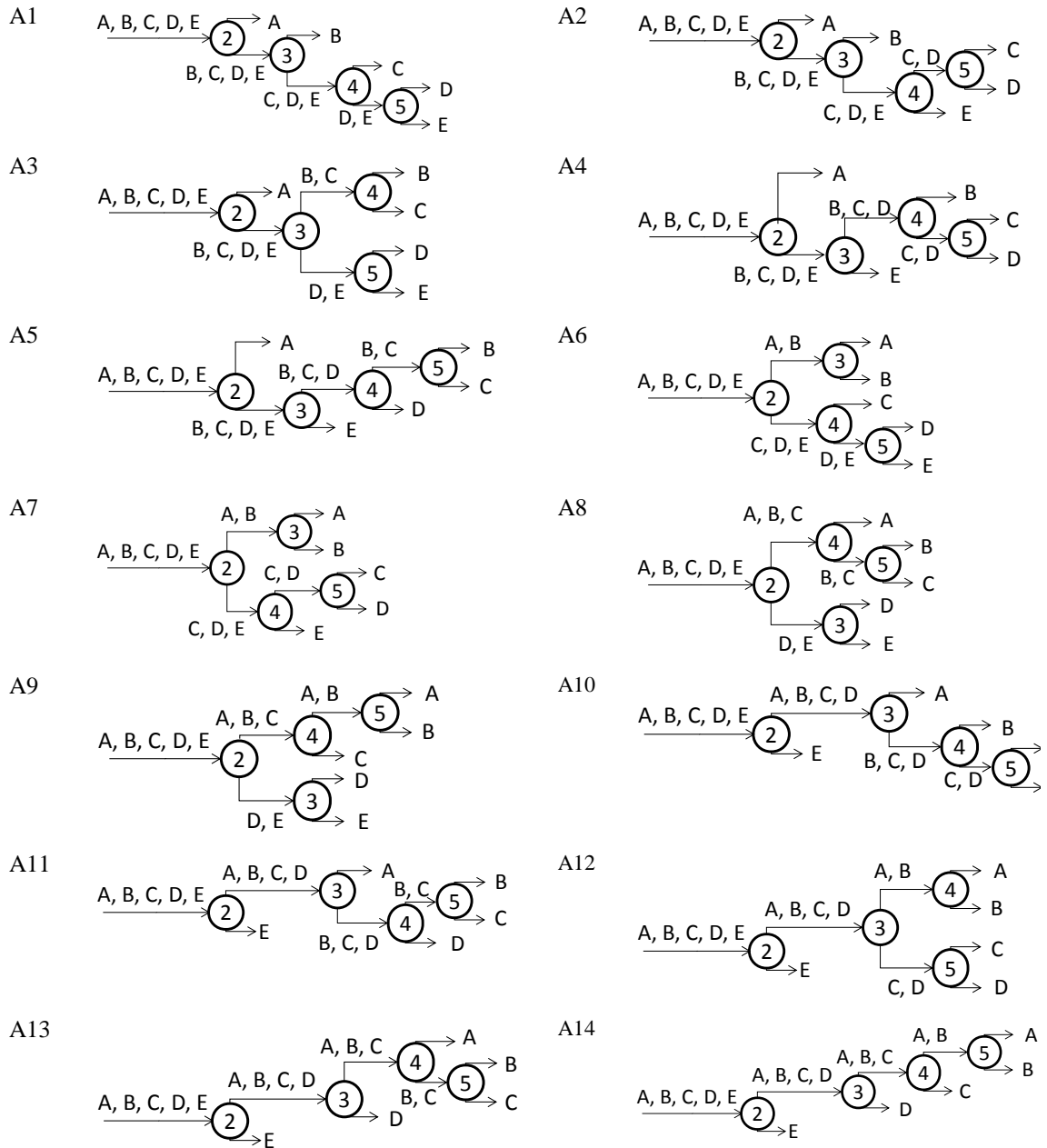


48. ábra: Optimális nyomás meghatározása (ld. 16. Melléklet)

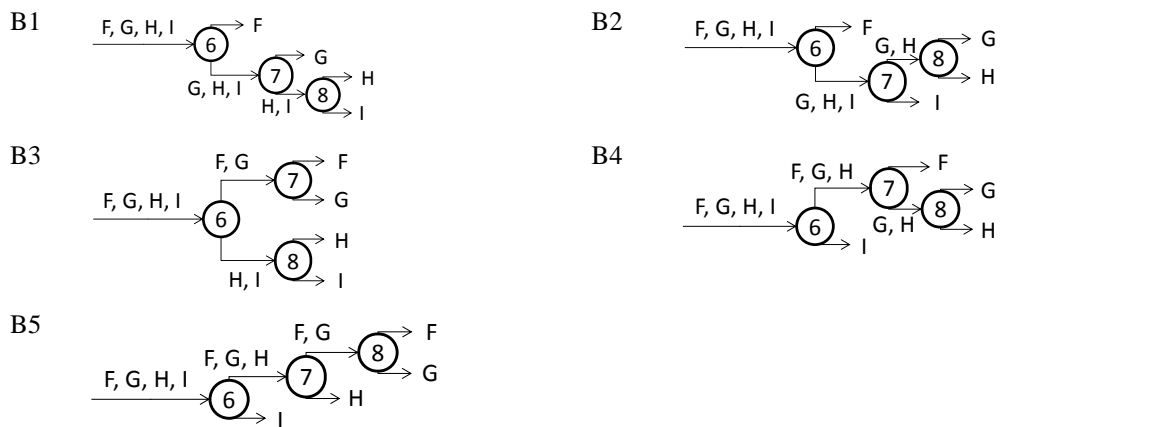
Eredmények értékelése

A heurisztikus szabályokat alkalmazó esettanulmányban a szétválasztási feladat 9 terméket ír elő, így a lehetséges elválasztó rendszerek száma 1430 (ld. 3. táblázat). Az ilyen nagyszámú szimuláció implementálása időigényes, ezért leszűkítettem a lehetséges kapcsolások számát. Az esettanulmányban létrehozott elválasztó rendszer első kolonnájában a kulcskomponensek nem szomszédosok, a többi elválasztásban a kulcskomponensek szomszédosok, így ezek a szeparációk nagytisztaságúak. Ennél fogva az első szétválasztást kiemeltem és azt minden létrehozott elválasztó rendszer első lépésének vettem. Így az első oszlop termékeinek feldolgozását külön elválasztási feladatnak tekintettem. A fejtermékének feldolgozása során egy öttermékes elválasztó rendszer lehetséges variációit vizsgáltam meg (könnyűtermékek: A, B, C, D, E), míg a fenéktermék esetén a termékek száma négy (nehéztermékek: F, G, H, I). A 49. ábra és 50. ábra foglalja össze a lehetséges eseteket.

A vizsgálatokhoz „shortcut” modellt alkalmaztam, a kulcskomponensekre 99 %-os kitermelést előírva. Létrehoztam egy Microsoft Excel alkalmazást, mely a szétválasztandó elegy és a termékek definiálása után az összes lehetséges szétválasztó rendszert leképezi az Aspen Simulation Workbook segítségével. Ezt az eszközt használva készítettem a vizsgálatokat.



49. ábra: Öttermékes elválasztó rendszerek kapcsolási lehetőségei



50. ábra: Négytermékes elválasztó rendszerek kapcsolási lehetőségei

Az eredményeket az alábbiak szerint értékeltem:

A vizsgálatokban a különböző kolonna konfigurációkat számmal jelöltem, az „A” betűvel jelölt konfigurációk a könnyűtermékek elválasztására vonatkoznak, a „B”-vel jelölt struktúrák pedig a nehéztermék szétválasztását szemléltetik.

A vizsgálatok során három különböző esetet különböztettem meg. Az első esetet tekintettem alapesetnek és ehhez hasonlítottam a többit. A második esetben a leghidegebb segédenergia árát változtattam, a többi segédenergia árát változatlanul hagytam. A két eset összehasonlításával vizsgáltam, hogy az optimális szétválasztó rendszer szerkezete mennyire függ a legdrágább segédenergia (nitrogénes hűtés) áráról. Az alkalmazott algoritmus a 47. a. ábrán látható.

A harmadik esetben az egyes szétválasztási lépésekben meghatároztam azt a nyomást 1 - 40 bar tartományban, amely alkalmazásával minimális költség érhető el, majd az optimális nyomásokon számolt célfüggvény értékek összege adta a szétválasztó rendszerek költségét. Így vizsgáltam, hogy milyen hatással van a nyomásszintek változtatása az optimális szétválasztó rendszer szerkezetére. A segédenergiák ára megegyezik az alapesetével.

- 1. eset,** (alapeset) nitrogénes hűtés költség: 9,15 \$/MJ
- 2. eset,** nitrogénes hűtés költség: 3,05 \$/MJ
- 3. eset,** optimális nyomású szétválasztások.

Az eredmények azt mutatják az első két eset összehasonlítása során, hogy a nehéztermékek szétválasztása során a heurisztikus szabályok által létrehozott struktúra (B3) az optimális (11. táblázat). A könnyűtermék szétválasztása során viszont a heurisztikus szabályokkal meghatározott rendszer (A3) költsége nagyobb az optimálisnál, és a költségrendben 12. helyet foglalja el (10. táblázat) mindkét esetben. Az optimális felépítés a fejtermék elválasztásánál az első esetben az „A14”, a második esetben az „A7” jelű elválasztó rendszer. A költségrend az „A14” és az „A7” jelű szétválasztó rendszer felcserélődésétől eltekintve megegyeznek. Az említett struktúrák mindkét esetben az első két helyet foglalják el, és költségük között kicsi a különbség.

Megfigyelhető, hogy a költségrend első öt helyén olyan szétválasztórendszerek vannak, melyek az A és B termékeket az utolsó lépésben választják szét. Látható, hogy minél előbb helyezkedik el ez a lépés a szétválasztási sorrendben, annál költségesebb a szétválasztórendszer. Ez azzal magyarázható, hogy ezek a termékek tartalmazzák a lekisebb forrásponitú komponenseket, így ezek szétválasztására a lehidegebb segédenergiát kell alkalmazni, ami egyben a legköltségesebb is. A desztilláló oszlop energiafelhasználása erősen függ a betáplálás mennyiségétől. Ezért egyértelmű, hogy az olyan struktúrák az előnyösek, ahol van olyan szeparációs lépés, amiben a betáplálás csak az A és a B komponenseket tartalmazza. A nehéz

szétválasztás esetén analóg jelenséget figyelhetünk meg a legnagyobb forráspontú termékénél. (ld.11. táblázat, 13. táblázat)

10. táblázat: Fejterméket feldolgozó szétválasztórendszerek költségsorrendje - 1. eset

Struktúra szám	Költség [\$/h]
A14	33959
A7	33976
A12	34001
A9	34666
A6	34748
A13	35584
A8	36298
A10	50481
A11	50723
A2	65675
A1	66447
A3	66647
A4	67097
A5	67340

11. táblázat: Fenékterméket feldolgozó szétválasztórendszerek költségsorrendje - 1. eset

Struktúra szám	Költség [\$/h]
B3	1370
B1	1373
B2	1554
B4	1557
B5	1570

12. táblázat: Fejterméket feldolgozó szétválasztórendszerek költségsorrendje - 2. eset

Struktúra szám	Költség [\$/h]
A7	14334
A14	14350
A12	14359
A9	15056
A6	15107
A13	15135
A8	15843
A10	20195
A11	20438
A2	25237
A1	26009
A3	26209
A4	26659
A5	26901

13. táblázat: Fenékterméket feldolgozó szétválasztórendszerek költségsorrendje - 2. eset

Struktúra szám	Költség [\$/h]
B3	1370
B1	1373
B2	1554
B4	1557
B5	1570

A harmadik esetet összehasonlítva az alapesettel megállapítható, hogy a szétválasztó rendszerek költsége jelentősen alacsonyabb a harmadik esetben. A 14. táblázat és a 15. táblázat foglalja össze az eredményeket. A szétválasztások költségsorrendje a könnyűtermékek szétválasztása során jelentősen eltér az első két esethez képest, azonban az optimális rendszer az „A14” maradt.

Az optimális struktúra a nehéztermékek szétválasztása során a harmadik esetben a „B1”, az alapesetben a „B3” jelű elválasztó rendszer. Az említett szeparációs rendszerek mind a két esetben az első két helyet foglalják el és költségük között kicsi a különbség. A költségsorrendek a „B1” és a „B3” jelű struktúra felcserélődésétől eltekintve megegyeznek.

A könnyűtermék szétválasztását tekintve a harmadik esetben az ökölszabályok alkalmazásával létrehozott szétválasztó rendszer szerkezete a legköltségesebb. A nehéztermékek szétválasztása során meghatározott sorrendben a heurisztikus szabályokkal megalkotott struktúra a második, de ahogy említettem az első és a második szétválasztó rendszer költsége között kicsi a különbség.

Az előző vizsgálatban megfigyelt jelenség a lekisebb és legnagyobb forrástartományú terméknel is megfigyelhető, igaz a könnyű termékek esetén nem egyértelmű az eredmény, mivel az A – B szétválasztásokat az utolsó lépésben tartalmazó szétválasztórendszerek csak a költségrend elején helyezkednek el de nem a legelején. Ez azzal magyarázható, hogy a minimális és a maximális költségek között kisebb a különbség, mint az első vizsgálatban, és így a költség sorrendben egymás mellett helyét foglaló szétválasztórendszerek között is kisebb a költség különbség.

14. táblázat: Fejterméket feldolgozó szétválasztórendszerek költségrendje - 3. eset

Struktúra szám	Költség [\$/h]	Elválasztások nyomása [bar]			
		2. elv.	3. elv.	4. elv.	5. elv.
A14	1534	1	1	5	13
A13	1770	1	1	17	5
A12	1862	1	1	13	3
A10	1898	1	28	5	3
A11	1960	1	28	5	5
A9	2097	1	1	5	13
A2	2214	24	5	1	3
A7	2249	1	13	1	3
A4	2325	24	3	5	3
A8	2333	1	1	17	5
A5	2387	24	3	5	5
A1	2401	24	5	5	1
A6	2432	1	13	3	1
A3	2453	24	5	5	1

15. táblázat: Fenékterméket feldolgozó szétválasztórendszerek költségrendje - 3. eset

Struktúra szám	Költség [\$/h]	Elválasztások nyomása [bar]		
		6. elv.	7. elv.	8. elv.
B1	282	13	5	3
B3	290	7	1	3
B2	299	1	1	5
B4	303	1	1	5
B5	320	1	7	1

Következtetés

Az ökol szabályok alkalmazása során az alábbiakat állapítottam meg:

- A szétválasztás nehézségét mérő különböző mutatók alkalmazása mellett célszerű a szétválasztandó elegy komponenseinek forráspont szerinti rendezése, az összetétel és forráspont különbség diagram elkészítése (minden szétválasztást megelőzően).
- A diagram segítségével, a piaci szempontokat is figyelembe véve meg tudtam határozni az n termék osztályt.

- A diagram segítségével meg tudtam határozni a vágások helyét, definiálni tudtam a kulcs komponenseket, és a termék specifikációkat figyelembe véve el tudtam végezni az (n-1) szétválasztást.
- A definiált kulcskomponensek alkalmazhatók az üzemeltetés során a termékáramok specifikációinak meghatározására.
- A vágás helye célszerűen a termékek határán van, ahol nagy a forráspont különbség értéke, a szomszédos komponensek koncentrációja kicsi.
- A kulcs komponensek a vágás helyéhez közeli komponensek és viszonylag nagy mennyiségben vannak jelen.

Mivel gyakoriak lehetnek az egymásnak ellentmondó követelmények, a tervezés során kompromisszumra kell törekedni. Minél kevesebb a kompromisszum, annál jobb a tervezés eredménye.

Az algoritmusokkal elvégzett vizsgálatok eredményét az alábbiakban foglalom össze:

- A heurisztikus módszer és a gazdasági információkat explicite magában foglaló módszer egyaránt szolgált egymással megegyező („nehéztermék szétválasztása”) és egymástól lényegesen különböző („könnyű termékek szétválasztása”) megoldásokat.
- A legdrágább segédenergia árának „bizonytalansága” a konfigurációk költségrendjét alapvetően nem változtatja meg.
- Ha a legmelegebb, ill. a lehidegebb segédenergiák árai lényegesen nagyobbak, akkor az elválasztó rendszert úgy kell kialakítani, hogy a legnagyobb, ill. legkisebb forráspontú terméket az utolsó lépésben válasszuk el.
- A szeparációs lépések nyomásváltoztatása jelentősen befolyásolja a költségrendet.
- A gazdasági információkat explicite magában foglaló „kereső” módszer lényegesen több számítási munkát igényel, ugyanakkor megbízhatóbb megoldáshoz jutunk.

2.3 Desztillációs oszlopok irányítása

A desztillációs oszlopok irányítását egy két és egy három termékes ipari kolonna irányítási rendszerének kialakítása során vizsgáltam. A számításokkal próbáltam feltárni hogyan változhat a szabályozórendszer szerkezete a szabályozott paramétereiktől illetve a szabályozott objektum karakterisztikáitól, amit a termodinamika határoz meg.

A vizsgálatok célja, hogy a desztillációs oszlopok szabályozási problémáját megoldva olyan általánosítható következtetéseket vonjak le, amik segítik a desztillációs oszlopok szabályozórendszerének tervezését. A vizsgálatok során energetikai és gazdasági szempontokat nem vettem figyelembe, mivel ha a szabályozórendszer alkalmas a berendezés megfelelő

munkatartományban tartására, akkor az üzemeltetés során megfelelően meghatározott célok (alapjelek) megadásával lehet elérni a minimális energia felhasználást.

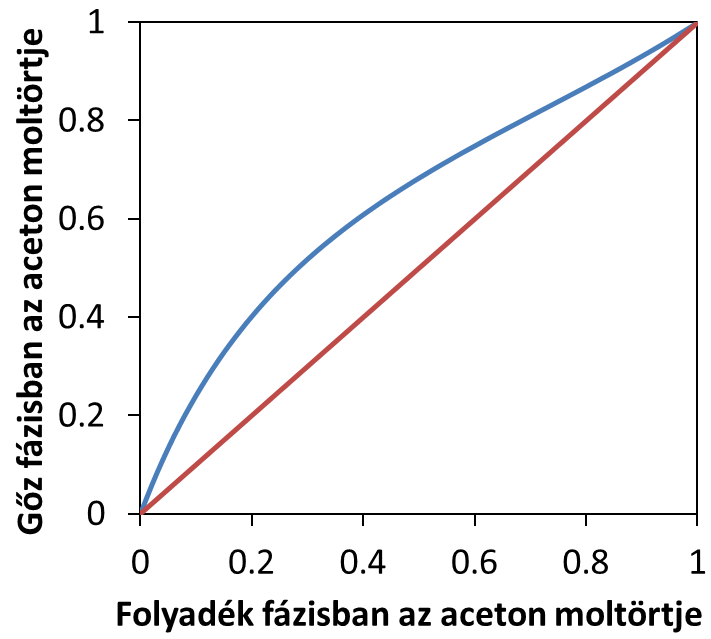
Kéttermékes desztillálóoszlop irányítása

Ebben az alfejezetben egy elterjedt struktúrával jellemezhető desztilláló oszlop szabályozását mutatom be. Az üzemeltetés során kézből kell tartani mind a két termék minőségét. A szabályozórendszer kialakításának első lépése a szabályozott és beavatkozó változók kiválasztása. Ezt a szétválasztó rendszer felépítéséből, valamint a szabályozott objektumok stacioner és dinamikus karakterisztikáiból lehet meghatározni. A szabályozott változókat úgy kell kiválasztani, hogy a technológia biztonságosan működjön és a termékminőségek az üzemeltetés során biztosítva legyenek. Az összetettség miatt hierarchikus irányítási rendszer kialakítása előnyös.

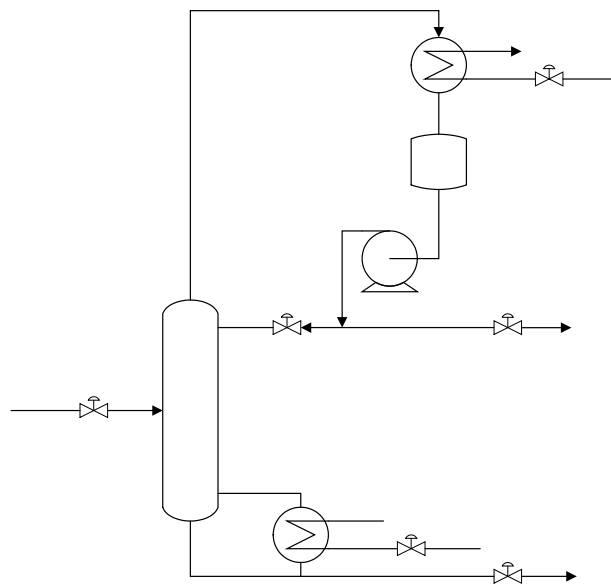
A rektifikáló oszlopok, mint szabályozott objektumok sokváltozós rendszerek, melyek szabályozása összetett feladat. A szabályozórendszer megalkotása során minden hierarchia szinten vizsgáltam az egyes beavatkozók hatását a szabályozandó paraméterekre, valamint a szabályozott rendszer viselkedését a munkapont megváltozásával. Ezen tapasztalatok alapján határoztam meg az egyes szabályozási szintek struktúráját.

Szétválasztási feladat

Az irányítási rendszer kialakításának folyamatát az alábbiakban definiált szétválasztási feladat példáján mutatom be. A kolonnába betáplált binerelegy acetont és benzolt tartalmaz, mindegyik koncentrációja 50 (n/n)%. Az elegy egyensúlyi összefüggését az 51. ábra szemlélteti. Látható, hogy az elegy szétválasztása a „Könnyű szétválasztás” csoportjába tartozik (ld. 4. ábra). A betáplált elegy tömegárama 800 kg/h. Mindkét termék előírt tisztasága 99 (n/n)%. A termékek és a betáplálási áram forrásponthi folyadékok. Az első lépésként *shortcut* módszerrel meghatároztam az elválasztás végrehajtására alkalmas desztillációs oszlop főbb paramétereit. Ezt Aspen PlusTM vegyészmérnöki szimulációs szoftver segítségével végeztem. A közelítő számítás után, megalkottam a berendezés részletes szimulátorát, melyet Aspen Plus DynamicsTM szoftverbe importáltam. A későbbi dinamikus vizsgálatokat ezzel az eszközzel végeztem el, a részletes szimuláció beállítása során meghatároztam, hogy a hidraulikai törvényeket is vegye figyelembe a program. Így az áramlási viszonyokat a nyomáskülönbségek határozzák meg. A kolonna 27 darab szitatányért tartalmaz, nyomás szintje 4.5 bar. A szimulátor folyamatábrája a 52. ábrán látható. A betáplálás a 22. tányérra történik. A betáplálási áram komponens összetétele miatt a NRTL tulajdonságbecslő módszert alkalmaztam a számításokhoz.



51. ábra: Aceton - benzol elegy egyensúlyi összefüggés



52. ábra: Aceton - benzol elegyet szétválasztó kolonna dinamikus szimulátorának felépítése

Szabályozott paraméterek kiválasztása

Kétkomponensű elegy szétválasztása esetén a rektifikáló oszlopot 17 db változóval lehet leírni, ezek között 8 db összefüggés írható fel, ezért a szabadsági fokok száma 9 [71]. A tányérszámot és a betáplálás összetételét, mennyiségét és entalpiáját ebben az esetben tervezési változónak tekintem, így a szabadon változtatható paraméterek száma 5, ennek megfelelően a beavatkozó jellemzők legyenek az alábbiak [59]:

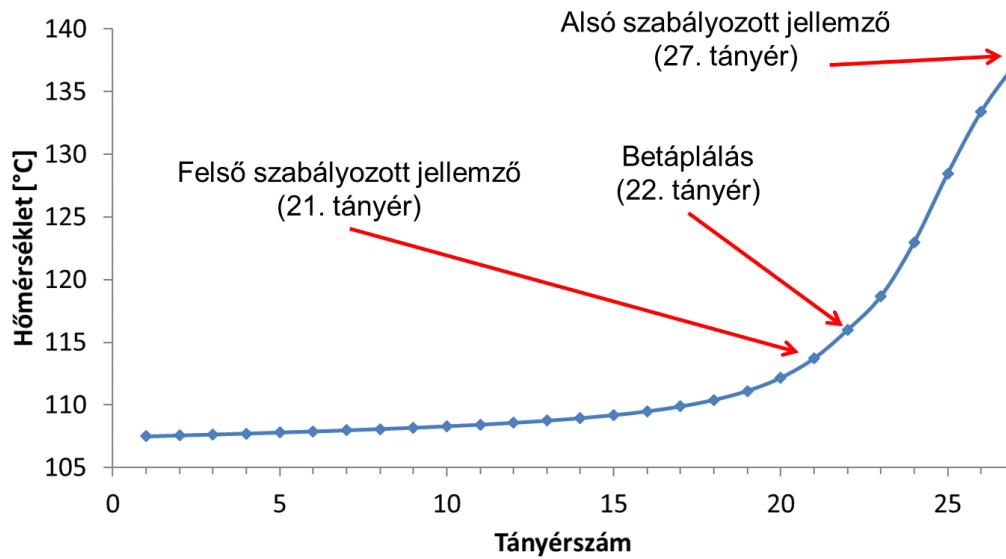
- Hűtéssel elvont hő
- Fűtéssel befektetett hő (ami arányos a kiforrálóba vezetett gőz áramával)
- Desztillátum árama
- Fenéktermék árama
- Reflux árama.

Ezeknek a változóknak a meghatározásával lehet a desztilláló oszlop üzemmenetét biztosítani.

Mivel a termékminőségek mérése költséges, ezért általában hőmérséklet szabályozást alkalmaznak a desztilláló oszlopokon és abból következtetnek az összetételre. Kétkomponensű szétválasztás esetén a forrásban lévő folyadék hőmérséklete és nyomása egyértelműen meghatározza a fázisok összetételét. A példában bemutatott szétválasztásnál nagytisztaságú termékáramok kinyerése a cél, ezért a termékáramok hőmérsékletei kismértékben változnak a beavatkozó jelek változásával. Ezekben az esetekben két tányérhőmérséklet a szabályozott jellemző, ezek közül az egyik a kiforráló, a másik a rektifikáló szakaszban van.

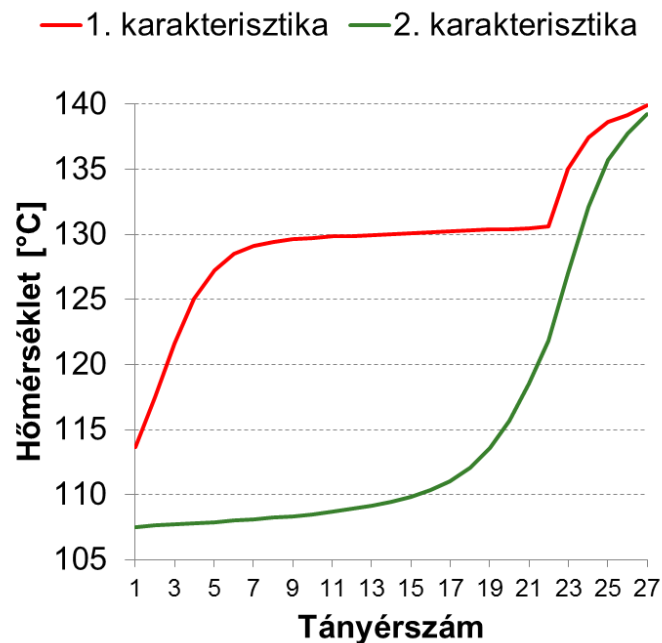
A hőmérsékletmérési pontok kiválasztását leggyakrabban heurisztikus szabály alapján végzik: „azon a tányéron kell mérni a szabályozott hőmérsékletet, ahol kellően nagy a hőmérsékletváltozás tányérról tányérra” (ld. 53. ábra). A bemutatott stacioner karakterisztikát azon a munkaponton készítettem, ahol a termékek tisztasága megfelelő.

A felső rész szabályozott hőmérsékletét a 15-21. tányérok hőmérsékleteiből választhattam ki, hiszen az ehhez képest felsőbb tányérok hőmérséklete már alig változtatható. Ennek megfelelően a felső rész szabályozott jellemzője legyen a 21-es tányérhőmérséklete, az alsó részé pedig a 27-es tányér hőmérséklete (ld. 53. ábra). A 21. tányér hőmérséklete technikai szempontból nem praktikus, mivel a betáplálás változása nagy hatással van rá, azonban elvi szempontból ezt a tányérhőmérsékletet határoztam meg szabályozott jellemzőnek.

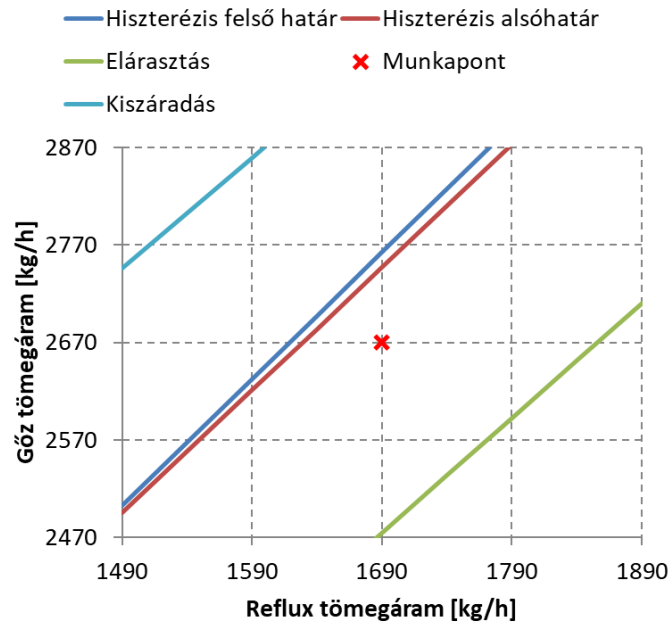


53. ábra: Szabályozott jellemzők kiválasztása (ld. 17. Melléklet)

Az oszlop irányítását bonyolítja - és ez az irányítási rendszer tervezése során vált ismertté-, hogy az 53. ábrán bemutatott stacioner, oszlop karakterisztika a munkapont változtatásával minőségében is megváltozhat (ld. 54. ábra). Ez azt jelenti, hogy más tányérok hőmérsékleteit kell szabályozott jellemzőnek kiválasztani a különböző munka tartományokban. Ezért a stacioner tervezés során fel kell tárnai a minőségében különböző karakterisztikájú tartományokat, mert ezeknél különböző irányítási struktúra szükséges. A két különböző struktúra értelmezési tartománya látható az 55. ábrán. A két tartomány határán a hiszterézis jelensége is fellép, ami azt jelenti, hogy a határtartományban a stacioner értékek attól függenek, hogy melyik tartományból lépjük át a hiszterézis határát.

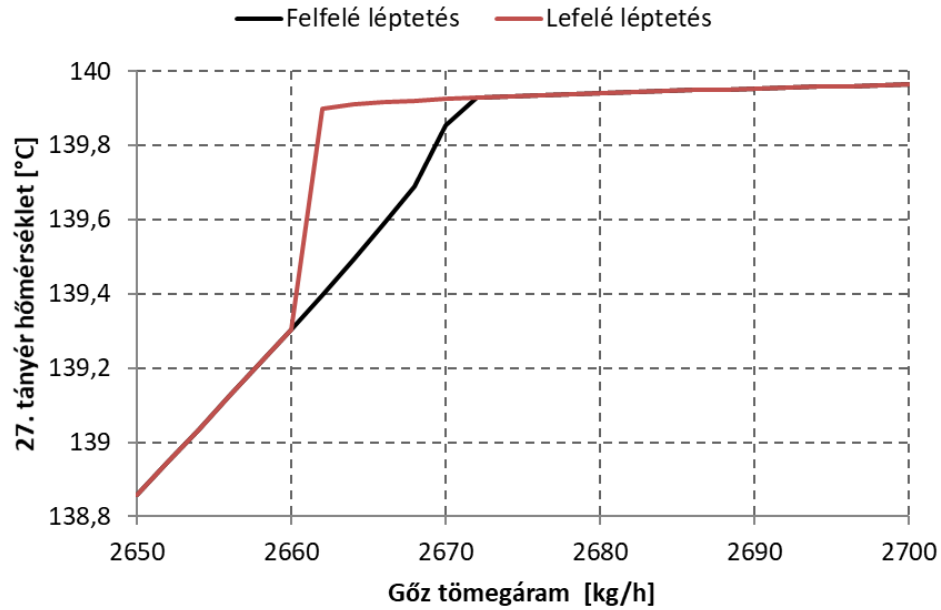


54. ábra: Különböző üzemelési tartományok hőmérséklet profiljai (ld. 18. Melléklet)



55. ábra: Beavatkozó jellemzők üzemeltetési tartományai

Az oszlop viselkedését 2470-2870 kg/h gőz tömegáram és 1490-1890 kg/h reflux tömegáram tartományban vizsgáltam lépcsőzetesen változtatva az áramokat. Ebben a tartományban öt különböző zónát azonosítottam. A tartomány bal felső és jobb alsó részében az oszlop nem képes üzemelni, ugyanis ezekben a munkapontokban az oszlop tányérjai kiszáradnak ill. elárasztódnak. A fennmaradó tartományt két fő részre tudtam bontani aszerint, hogy a desztilláló oszlop hőmérsékletprofilja milyen típusú (ld. 54. ábra). A két fő rész között egy átmeneti tartományt figyeltem meg ahol a paraméterek gyorsan változnak és a rendszernek több munkapontja is lehet. Ebben a tartományban hiszterézis (ld. 56. ábra) van a tányérhőmérsékletek stacioner értékében attól függően, hogy lefelé lépcsőzéssel haladtam a zónában vagy felfelé lépcsőzéssel. A 55. ábrán jelöltem a hiszterézis határait, a köztük lévő tartomány a veszélyes zóna, ebben a tartományban a szabályozás ezzel a szabályozóstruktúrával instabil. Ezen probléma szabályozó rendszerre való hatásának részletes vizsgálata egy másik dolgozat témája lehet.

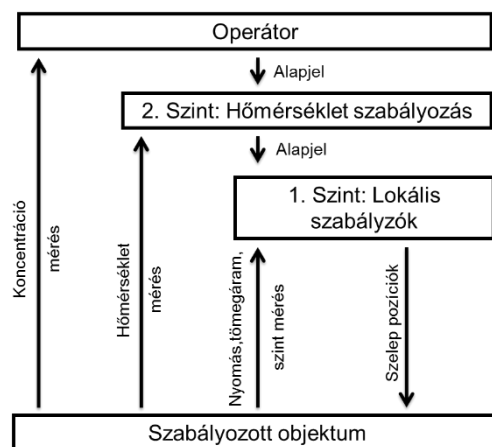


56. ábra: Hiszterézis jelenség bemutatása a 27. tányérhőmérsékleten (ld. 19. Melléklet)

A vizsgált desztillációs oszlop a szétválasztási feladatot 2670 kg/h gőz tömegárammal és 1690 kg/h reflux tömegárammal tudja megoldani, így a 2. karakterisztika tartományában végeztem el a további vizsgálatokat. Azt azonban ki kell hangsúlyozni, hogy ha nem teljesül a tartományon belüli üzemeltetés, akkor mindkét irányítási struktúrát ki kell alakítani, és megfelelő algoritmussal biztosítani az átállást.

Szabályozó rendszer

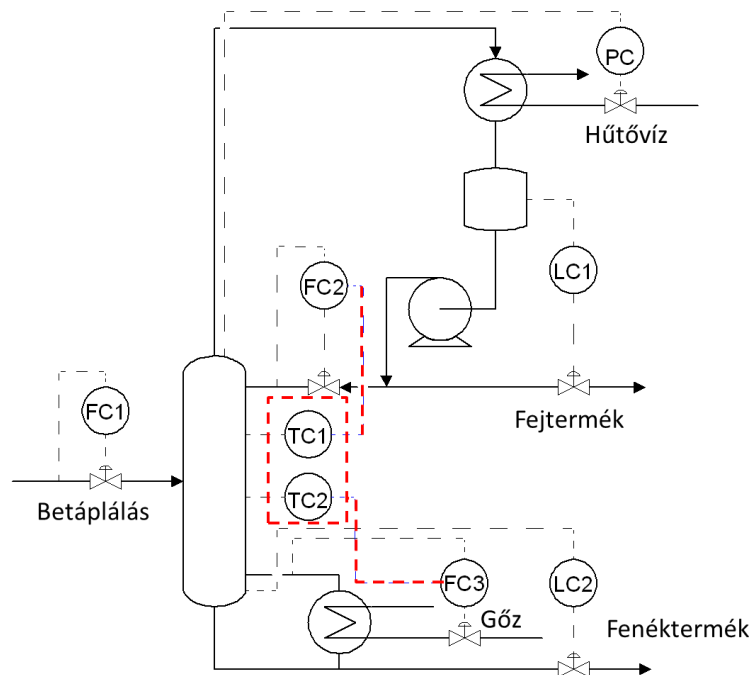
A szabályzórendszer tervezése során két különböző funkciójú irányítási szintet határoztam meg, amit az 57. ábra szemléltet [72].



57. ábra Aceton - benzol elegyet szétválasztó kolonna irányítási rendszerének szintjei

Az alsó szinten a lokális szabályzó körök vannak. Ezen a szinten a működés szükséges feltételeit biztosító köröket értelmeztem. A szabályozott jellemzők a folyadékszintek, a tömegáramok és a nyomás, a beavatkozó változók a szabályzószelepek szeleppozíciói. A lokális szabályzó körök az

58. ábrán láthatók. Ez a szint biztosítja az üzemszerű működést (nem ürülnek le a tartályok, nincs elárasztódás, stb.) és kompenzálja a desztilláló oszlopot ért direkt, külső zavarások egy részét. Az FC1 szabályzó kör kompenzálja a kolonnába érkező anyag tömegáram ingadozását, ezzel biztosítva, hogy az oszlopba betáplált anyag tömegárama állandó legyen. Az FC3 a fűtőközeg tömegáram ingadozását kompenzálja, a PC pedig a kolonna felső nyomás ingadozását, ami sok paraméter változásának a következménye lehet. A megfelelő fejnemű szabályozása elengedhetetlen az oszlop egyenletes üzemmenetéhez, mivel ez a paraméter befolyásolja az egész oszlop nyomásviszonyát, így az összes szabályozott paramétert befolyásolja. Az LC1 és LC2 szabályzó körök szabályozzák a reflux tartályban és a kolonna fenékén a folyadékszint magasságát, ezzel biztosítva az oszlop működőképességét. Ezen kívül fontos, hogy az oszlopot olyan tartományban üzemeltessük, hogy elkerüljük az oszlop elárasztódását, ezt a beavatkozó jelek korlátozásával lehet elérni. Ezeknek a szabályzó köröknek a beavatkozó jelük a fejtermék és fenéktermék áramokon lévő szabályozószelepek (indirekt anyagszám szabályozás [60]). Az FC2 szabályzó kör a reflux tömegáramát szabályozza. A szabályozott objektumok kis holtidejű elsőrendű objektumként jól leírhatók. Az ilyen típusú rendszerek szabályozására jól használhatók a PI szabályzók, ezért a PI szabályzó algoritmust alkalmaztam.



58. ábra: Aceton - benzol elegyet szétválasztó kolonna szabályzórendszere

A rektifikálással való komponens szétválasztás alapja a fej és fenék hőmérsékletek különbségének a fenntartása. Ezért a második irányítási szinten a szabályozott jellemzők az előbb definiált hőmérsékletek, amely a felső (rektifikáló) és az alsó (kiforráló) kolonna részeket jellemzik és értékük a megfelelő beavatkozókcal változtatható. A felső rész hőmérséklete az FC2

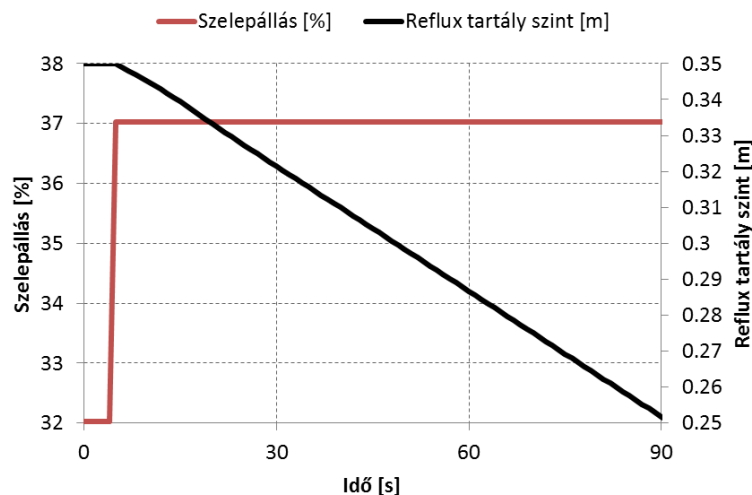
szabályzó kör alapjelével (TC1), míg az alsó rész hőmérséklete (TC2) az FC3 szabályzó kör alapjelének változtatásával tartható kézben (ld. 58. ábra).

A szétválasztás minőségét a fej és fenék termékek koncentrációja méri. Ezért az operátor a rendszeres laboratóriumi mérések eredményeinek ismeretében úgy állítja be a hőmérséklet szabályzó kör alapjeleit, hogy azok a megfelelő termékminőséget eredményezzék. Ezt a beavatkozást tekinthetjük a szabályzó rendszer harmadik szintjének.

Lokális szabályzó körök vizsgálata

A szabályzó körök autonóm vizsgálatát és hangolását a körök kölcsönhatása nehezíti. Ezért lényeges a megfelelő sorrend kialakítása, és ha szükséges, az iteratív megközelítés (újra hangolás) alkalmazása. A nyitott kör vizsgálatok során lépésfüggvénnyel avatkoztam be az irányítandó objektum bemenetein, és a szabályzott jellemző viselkedéséből határoztam meg a szabályzó paramétereit.

Első lépés: A lokális szabályzó körök vizsgálata során a szint szabályzó kör (LC1, LC2) nyitott kör vizsgálatát és hangolását végeztem el (ld. 59. ábra). A folyadék pufferek biztosítják, hogy desztilláló oszlopok belső áramai folytonosak legyenek. Ha ezeknek a térfogatáramoknak a mennyisége lecsökken egy minimális határérték alá, akkor a kolonnában az elválasztás megszűnik, üzemzavar lép fel. Ezért emeltem ki ezeket a szabályzó köröket az első lépésben, és kritikusságuk folytán a többi szabályzó kör hangolása során ezek a szabályzó körök bekapcsolt állapotban vannak.



59. ábra: Reflux tartály szintszabályozás – nyitott kör vizsgálat

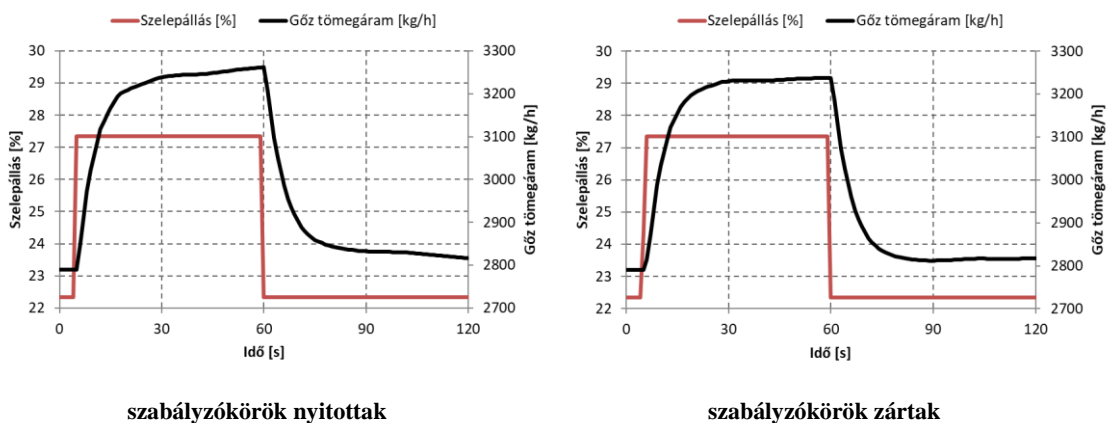
A vizsgálatokból látszik, hogy az objektumok, az elvárásnak megfelelően integráló típusúak. A szabályzó kör hangolása az integráló objektumokra alkalmas Ziegler–Nichols reakció görbe módszerrel történt [73].

Ezután a második és harmadik lépésben a nyomás és tömegáram szabályozókörök nyitott köri vizsgálatát és hangolását végeztem el. A kétlépéses hangolásra azért volt szükség, hogy megvizsgáljam milyen mértékben hatnak egymásra a szabályozókörök, ezért a lépések a következők:

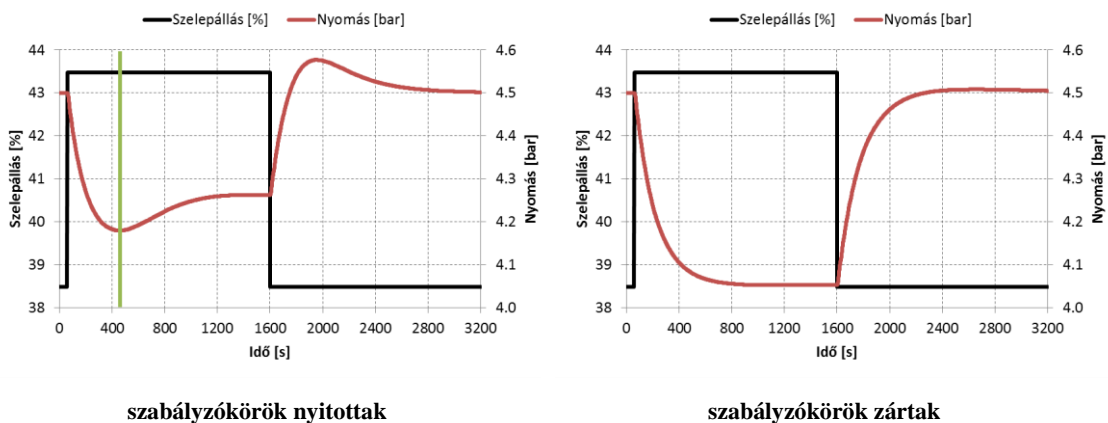
Második lépés: az egyes szabályozókörök vizsgálata, melynek során a szintszabályozókon kívül, a többi szabályzó ki volt kapcsolva.

Harmadik lépés: a vizsgált szabályzó körön kívül a többi szabályzó kör be volt kapcsolva. (ld. 60–61. ábra)

A nyitott köri vizsgálatokban a szabályozott jellemző viselkedése minden esetben jól leírható elsőrendű holtidő nélküli objektumként. A számítások során az illesztéshez a legkisebb négyzetek módszerét alkalmaztam. A PI szabályozók paramétereit közvetlen szintézis módszerrel határoztam meg a szabályozott objektumok modellparamétereiből [74].



60. ábra: Gőz tömegáram szabályozás (FC3) – nyitott köri vizsgálat



61. ábra: Nyomás szabályozás (PC) – nyitott köri vizsgálat

A tömegáram és nyomás szabályzó körök paramétereit a 16. táblázat foglalja össze. Az FC1 és FC2 szabályzó körök esetén az első és a második vizsgálat során meghatározott paraméterek

elhanyagolható mértékben térnek el egymástól. Ezeket a szabályzóköroket a többi kör nem zavarja jelentősen.

Az FC3 és PC szabályzókörok esetén a két vizsgálat között a szabályozott jellemző viselkedése eltér. Mind a két körnél másodlagos hatás is fellép. A szabályzóhangolásokat (nyitott körű vizsgálat és paraméter meghatározást) az elsődleges hatásokra végeztem el. Ezeknél a szabályzóköroknél a második vizsgálatban meghatározott paramétereket alkalmaztam a továbbiakban.

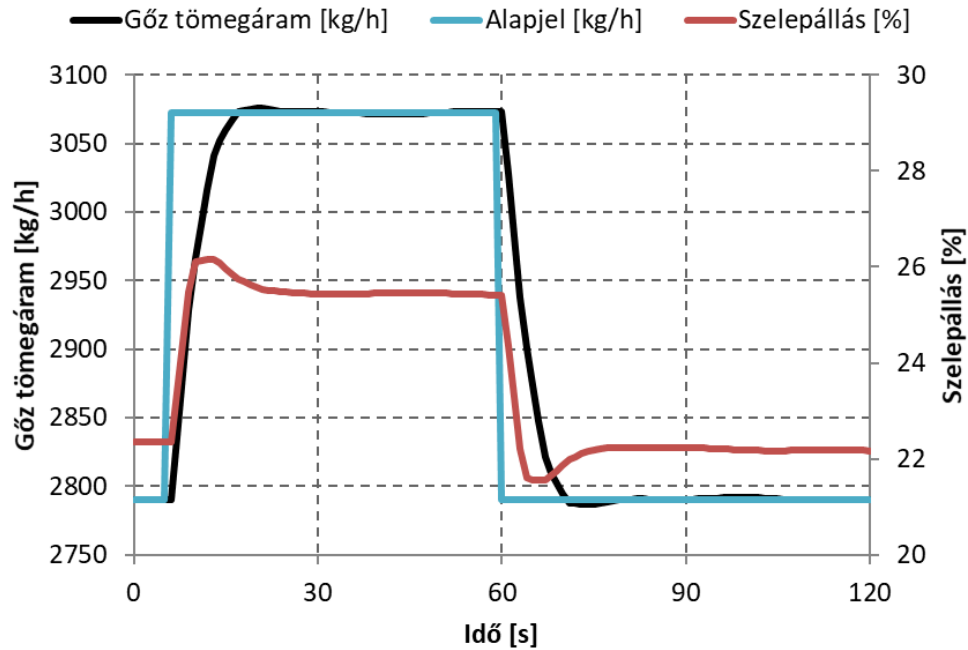
16. táblázat: Nyitott körű vizsgálatok eredményei

	1. vizsgálat	2. vizsgálat	Eltérés [%]
FC1 erősítési tényező	1.40	1.40	0.23
FC1 időállandó	5.31	5.40	1.66
FC2 erősítési tényező	1.16	1.16	0.09
FC2 időállandó	5.79	5.61	3.03
FC3 erősítési tényező	1.64	1.48	10.11
FC3 időállandó	5.30	5.63	6.23
PC erősítési tényező	-1.04	-1.30	25.2
PC időállandó	153	174	13.5

Megállapítottam, hogy két típusú szabályzó kört különböztethetünk meg:

1. A többi kör kis mértékben hat rá, így egy lépésben hangolhatók.
2. A többi kör jelentős hatást fejt ki rá, így több lépésben iterálva érdemes hangolni.

A lokális szabályzóknál esetén a köroeknek nincs olyan jelentős kölcsönhatásuk, hogy azt kompenzálni kellene. Ezt megerősíti, hogy a kiválasztott beavatkozó jel - szabályozott jellemző párok esetén az eltérések százalékos értéke alacsony (16. táblázat). A szabályozási feladatot meg lehet oldani egy bemenetű egy kimenetű szabályzóknál alkalmazásával. A lokális szabályzóknál viselkedését a gőz tömegáram szabályzóköroknél mutatom be (62. ábra). Látható, hogy a szabályzó túllendülés nélkül állítja alapjelre a szabályozott jellemzőt. A többi lokális szabályzó viselkedése hasonló a bemutatott szabályzó viselkedésével.



62. ábra: A gőz tömegáram szabályozás bemutatása

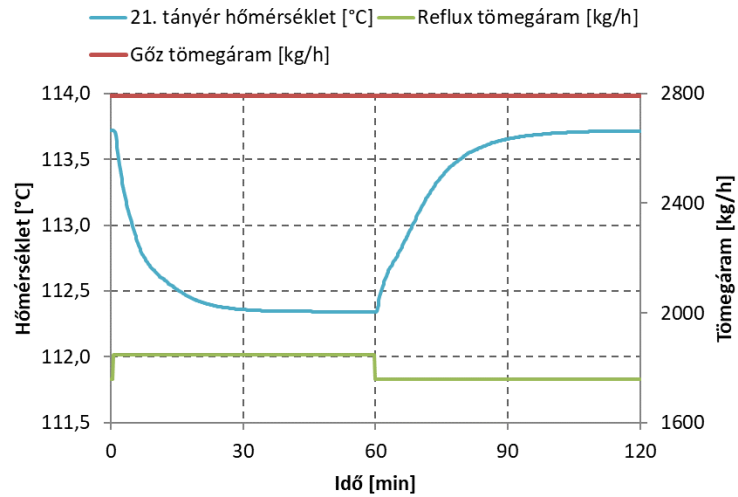
Hőmérsékletszabályozás

Az irányítás következő hierarchia szintjén a hőmérsékletszabályozók állnak. A két hőmérsékletszabályozó vizsgálata során az első esetben úgy végeztem nyitott körű vizsgálatot, hogy a másik kört kikapcsoltam. A második esetben a vizsgálat során a másik szabályozókör be volt kapcsolva (ld. 63-66. ábra).

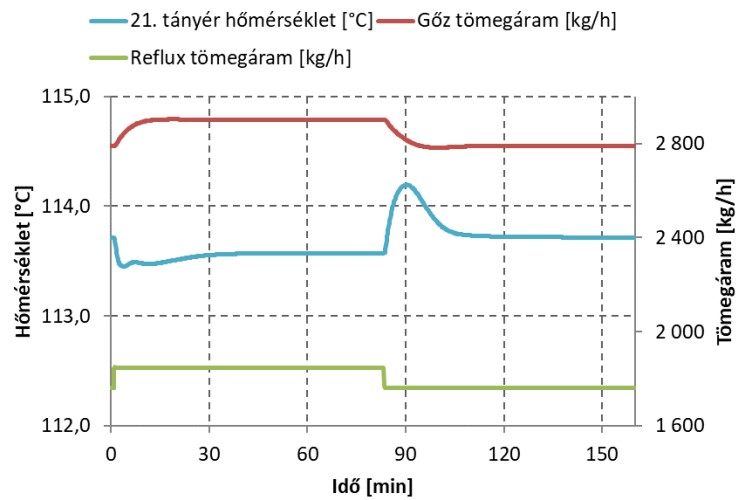
Jól látható, hogy a második esetben a tranziensek alakjai radikálisan megváltoznak. A változás olyan mértékű, hogy a szabályozott jellemzőket nem lehet jól közelíteni elsőrendű holtidős rendszerekkel. A változás oka, hogy mind a kettő szabályozókör beavatkozó jele nagy hatást gyakorol mind a két szabályozókör szabályozott jellemzőjére (ld. 67. ábra). A körök kölcsönös összefüggése a szakirodalomban használt Bristol mátrix számolásával detektálható [75] (ld. 17. táblázat).

17. táblázat: Aceton - benzol elegyet szétválasztó kolonna Bristol mátrixa

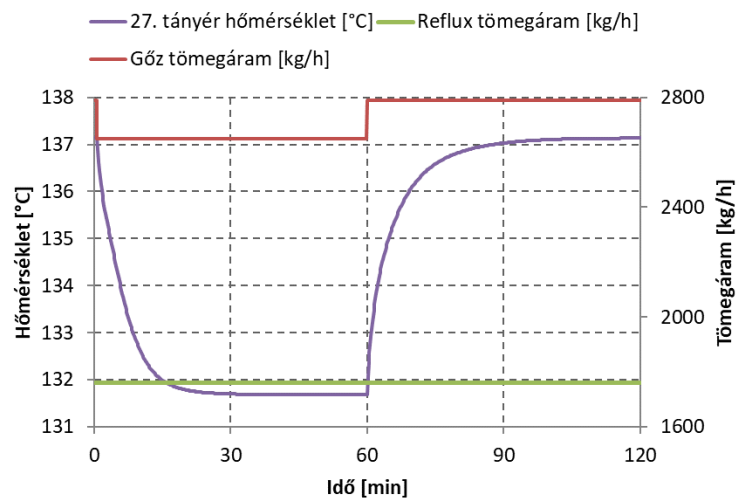
	Reflux tömegáram	Gőz tömegáram
21 tányér hőmérséklete	14.23	-13.23
27 tányér hőmérséklete	-13.23	14.23



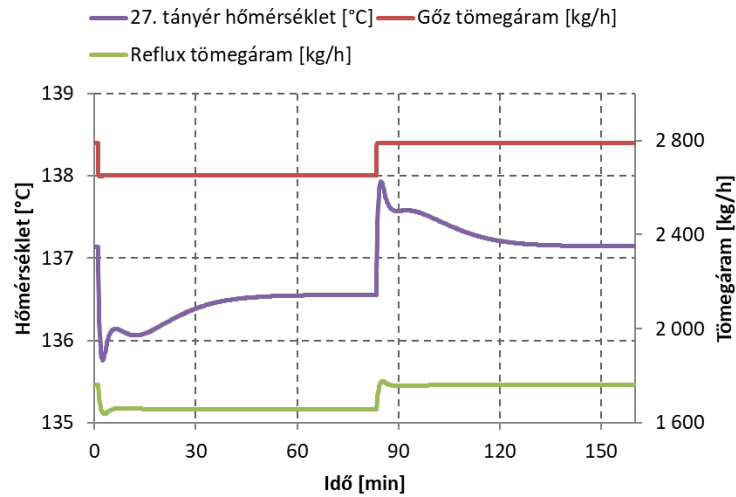
63. ábra: TC1 szabályozó nyitottköri vizsgálata (TC2 nyitott)



64. ábra: TC1 szabályozó nyitottköri vizsgálata (TC2 zárt)

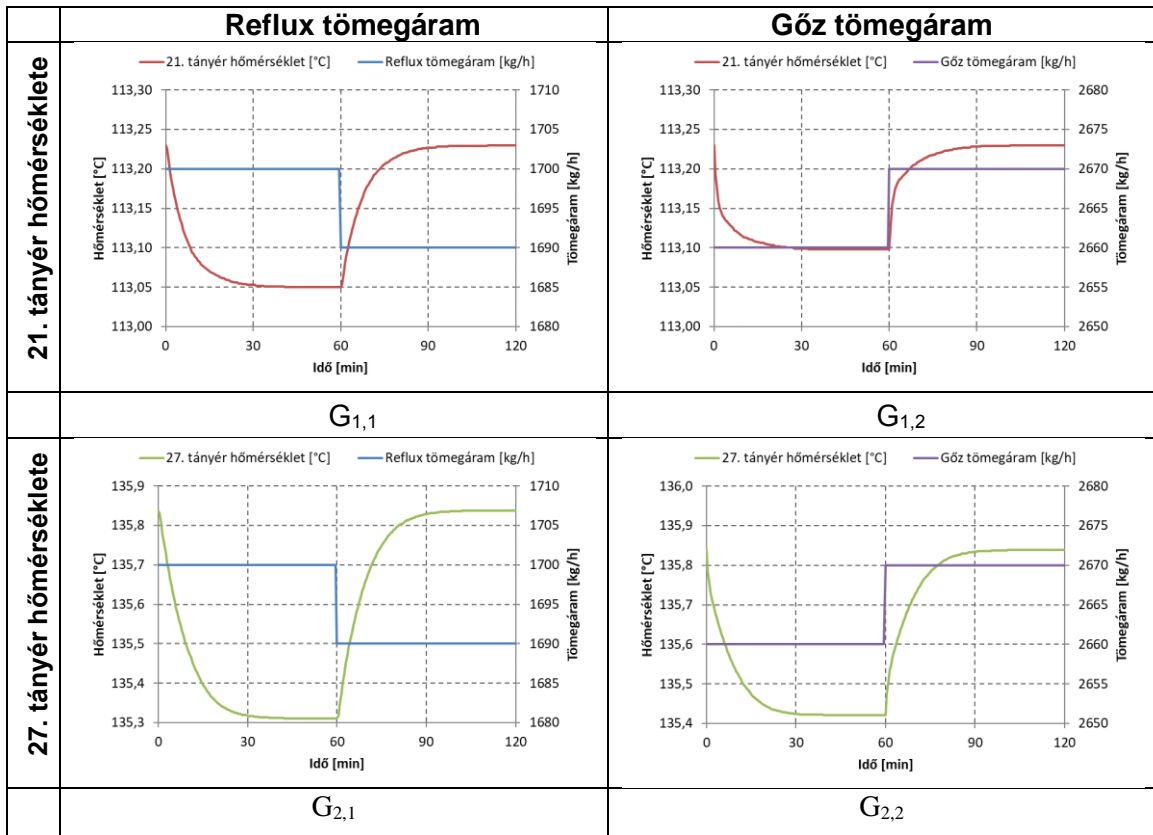


65. ábra: TC2 szabályozó nyitottköri vizsgálata (TC1 nyitott)



66. ábra: TC2 szabályozó nyitottköri vizsgálata (TC1 zárt)

A 67. ábrán látható a keresztthatás. A vizsgálat során 10 kg/h-val változtattam az egyes szabályzók kimenetét, míg a másik beavatkozó értéke konstans volt. Ezután ábrázoltam a szabályozott jellemzőket az idő függvényében. A rendszereket elsőrendű holtidő nélküli átviteli függvényekkel közelítettem, a következő lépésben ezeket használtam fel a szabályzórendszer paramétereinek kiszámításához.



67. ábra: Aceton - benzol elegyet szétválasztó kolonna hőmérséklet szabályozás nyitott köri átmeneti függvényei

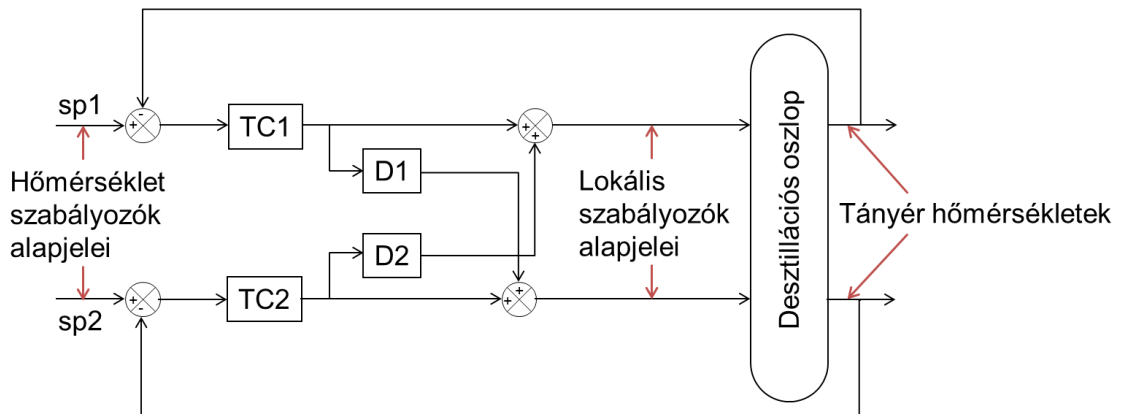
A kereszthatás miatt az első esetben meghatározott szabályzó paramétereit alkalmazva a szabályzási idő nagy lesz, ha mind a két szabályzó kör be van kapcsolva. A körök közötti kölcsönhatás kiküszöbölésére dinamikus és stacioner szétcsatolást alkalmaztam. A szabályzó struktúráját a 68. ábra szemlélteti.

A D1 és D2 blokk jelképezi a szétcsatolást, ezek „lead-leg” elemek, melyek paramétereit az előző vizsgálat során meghatározott elsőrendű holtidős rendszerek paramétereiből számoltam ki:

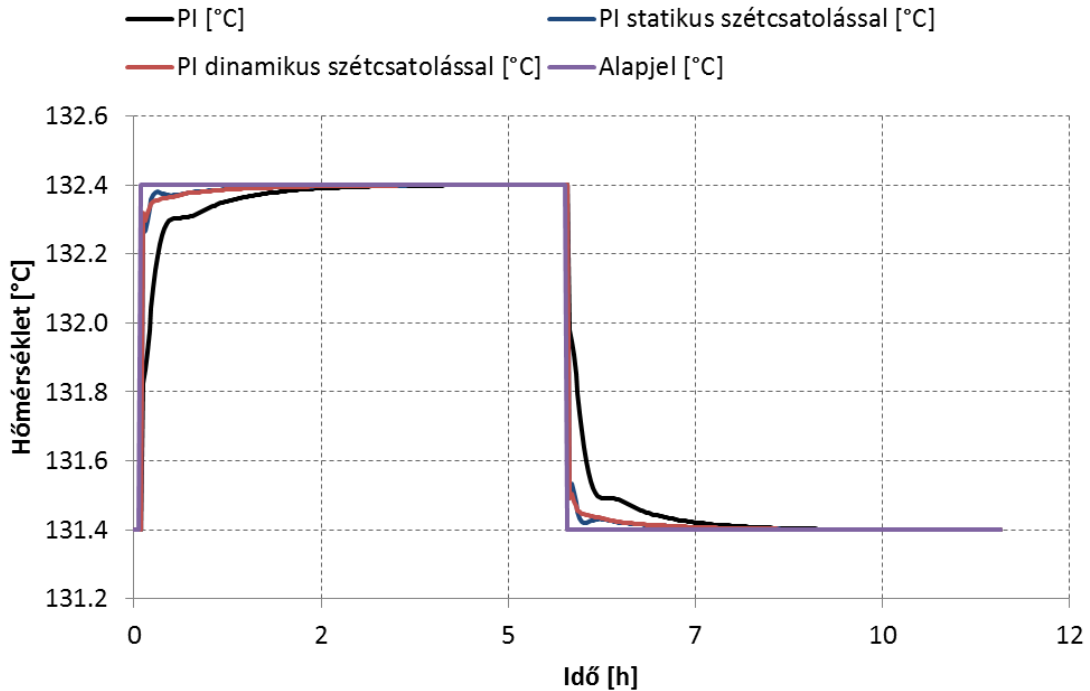
$$D1 = -\frac{G_{1,2}}{G_{1,1}} \quad (27)$$

$$D2 = -\frac{G_{2,1}}{G_{2,2}} \quad (28)$$

A különböző szabályozási megoldások működését a 69. ábra szemlélteti, a TC2 szabályzó kör alapjel váltása esetén.



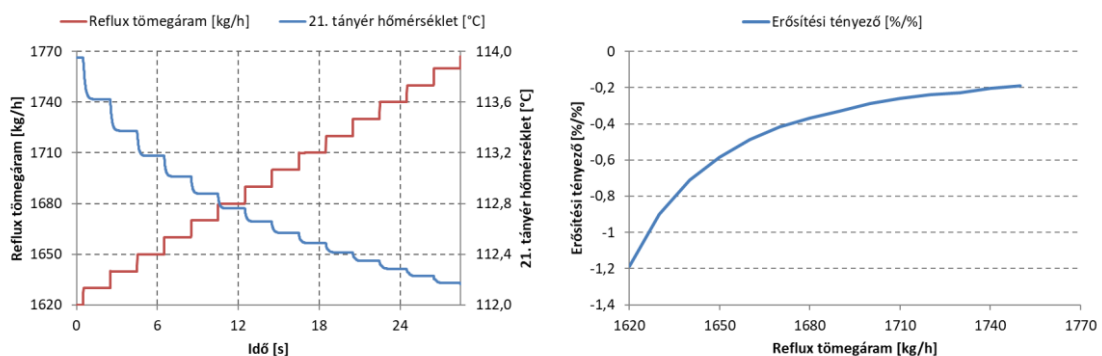
68. ábra: Aceton - benzol elegyet szétválasztó kolonna szétcsatoló szabályozása



69. ábra: TC2 szabályozókör működése alapjel váltás esetén

Az eredményekből látható, hogy a szabályzórendszer, melyen szétcsatolást alkalmaztunk gyorsabban éri el az alapjelet, mint a PI szabályozó szétcsatolás nélkül. A dinamikus és a stacioner szétcsatoló szabályozás működése között nincs jelentős különbség.

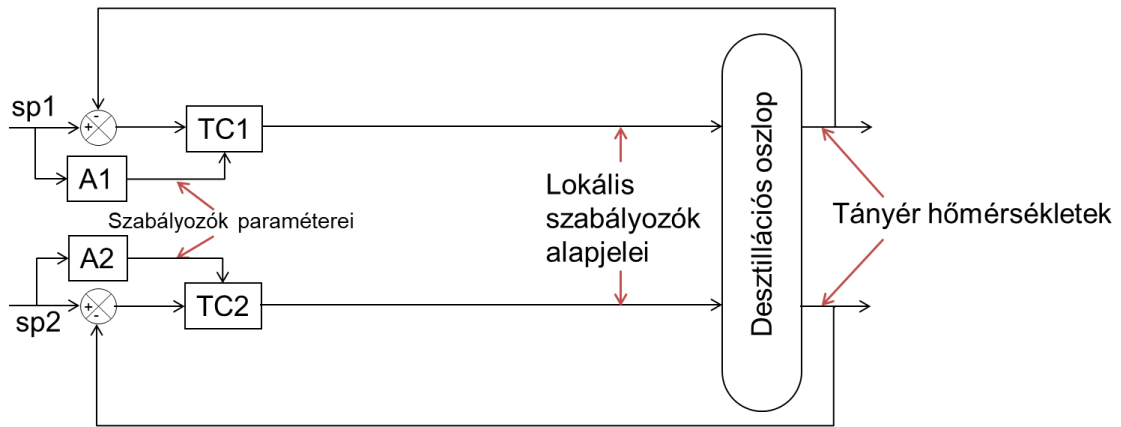
A kereszt hatás mellett a szabályozott rendszer viselkedése köztudottan nem lineáris. Ezt a jelenséget a 70. ábrával illusztrálom, a felső hőmérséklet szabályozás példáján. A bemutatott vizsgálatnál a reflux mennyiségét lépcsőzetesen növelem 1620 kg/h-tól 1770 kg/h-ig 10 kg/h-ként, és ábrázoltam a 21. tányér hőmérsékletét. Látható, hogy a szabályozott rendszer erősítési tényezője változik a refluxáram mennyiségével.



70. ábra: Nem lineáris rendszer viselkedés (ld. 20. Melléklet)

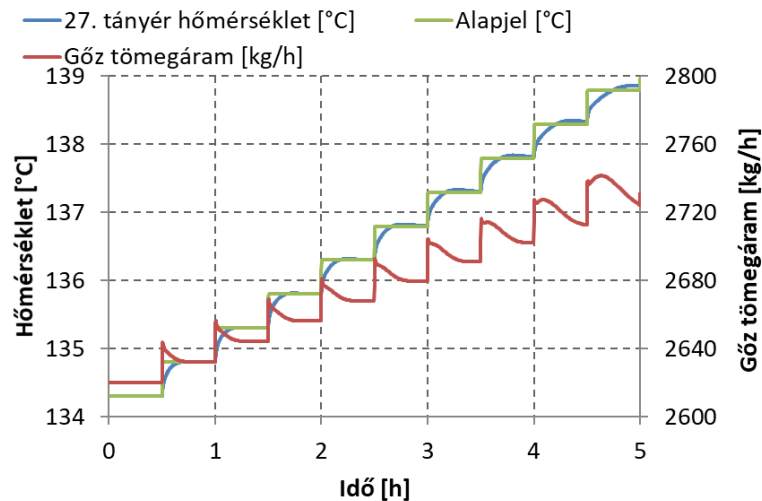
A jelenség hatását úgy kompenzáltam, hogy a szabályzó paramétereit a munkapont függvényében határoztam meg, a programozott adaptív szabályozás elvét alkalmazva [67],

kisegítő változó az alapjel. A szabályozó paramétereit stacioner karakterisztikák segítségével határoztam meg az egyes munkapontokban. A szabályozórendszer struktúráját a 71. ábra szemlélteti.



71. ábra: Aceton - benzol elegyet szétválasztó kolonna programozott adaptív szabályozási sémája

Az adaptív szabályozást alkalmazva a szabályzás minősége a munkaponttal nem változik (ld. 72. ábra). A vizsgálat során csak az egyik hőmérséklet szabályzókör volt bekapcsolva.

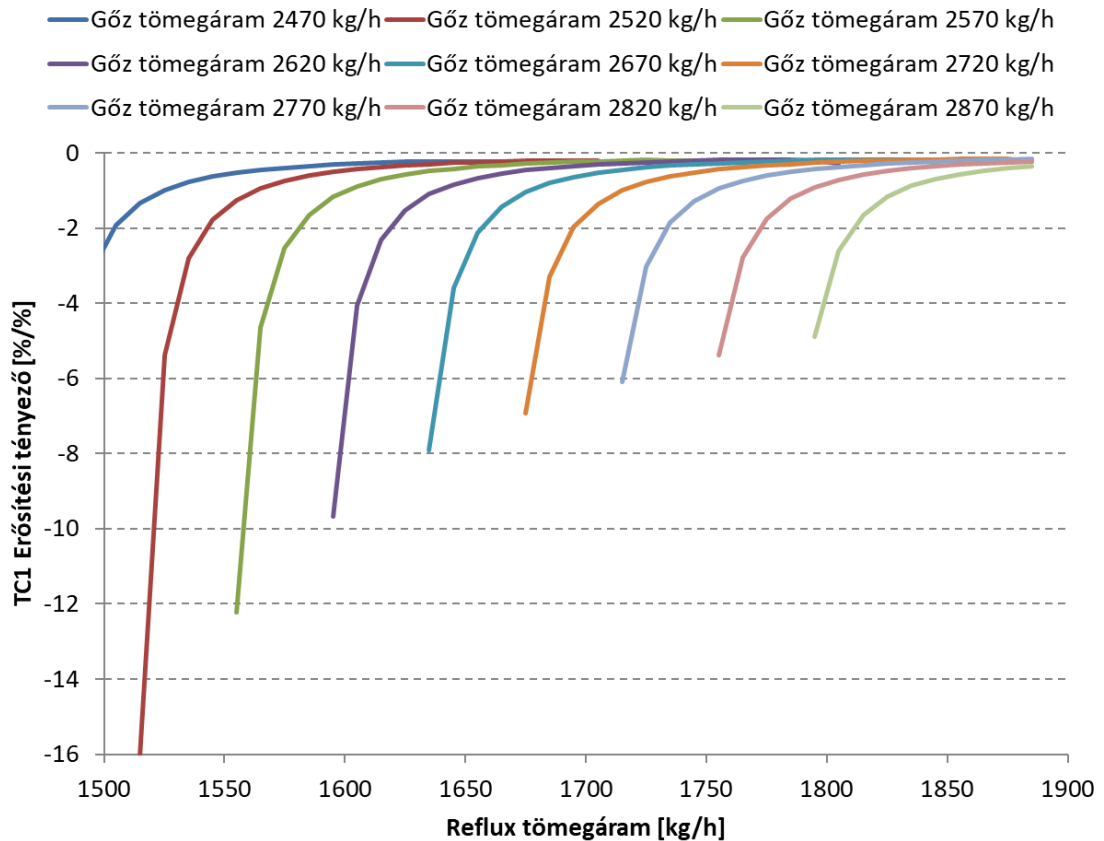


72. ábra: TC2 szabályzó kör működése alapjel váltás esetén programozott adaptív hangolással

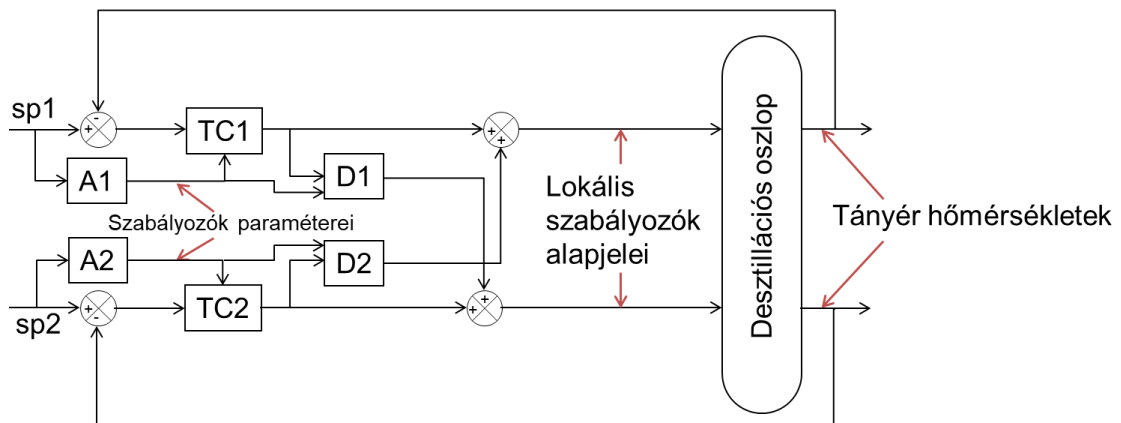
A hőmérséklet szabályzó a hierarchikus szabályzási rendszer második szintjén helyezkednek el, ezért az alapjeleit az operátor határozza meg. Így a hőmérséklet szabályzóknak egy meghatározott tartományon belül úgy kell működniük, hogy az előzőekben vizsgált effektusokat kompenzálják. Ezért az előzőleg bemutatott szabályzási megoldásokat kombináltam, így a szétcsatoló szabályozórendszer paramétereit is a munkapont függvényében számítottam ki.

A hőmérséklet szabályzórendszer paramétereit nyitott körű vizsgálatok során határoztam meg, azaz a munkapontot (Reflux tömegáram: 1590 kg/h; Gőz tömegáram: 2670 kg/h) tartalmazó tartományban lépcsőzetes alapjel váltásokkal határoztam meg a szabályzott rendszer erősítéstényezőjét és időállandóját. A 70. ábra egy ilyen vizsgálatot szemléltet, állandó gőz

tömegáram mellett változtattam a reflux mennyiségét, a megfigyelt változók a két szabályozott hőmérséklet. Az egyes 'lépcsőkre' elsőrendű holtidő nélküli átviteli függvényt illesztettem. A paraméterek változását a vizsgált tartományban a 73. ábrán, a TC1 erősítési tényező példáján mutatom be. A hierarchia szinten kialakított összetett szabályzórendszer sémáját a 74. ábra szemlélteti.



73. ábra: Erősítési tényező a reflux tömegáram és a gőz tömegáram függvényében (ld. 21. Melléklet)

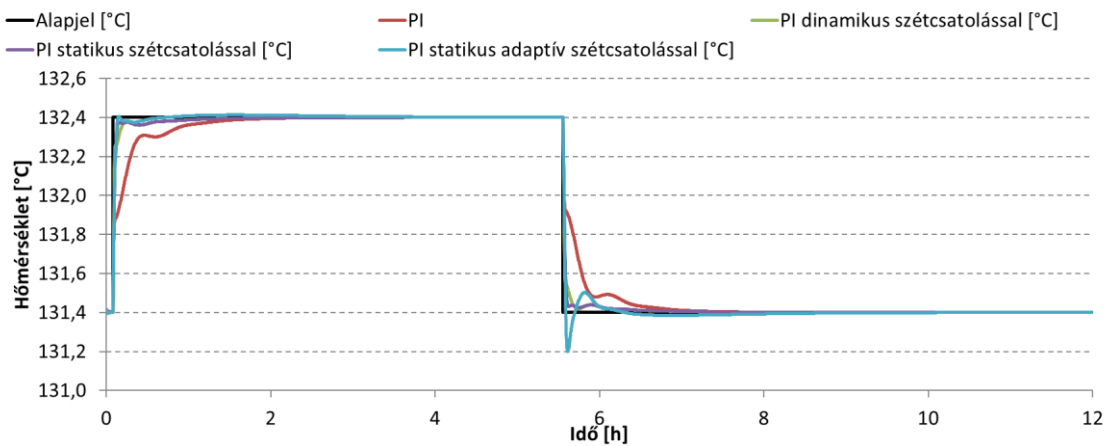


74. ábra: Aceton - benzol elegyet szétválasztó kolonna középső irányítási szintje

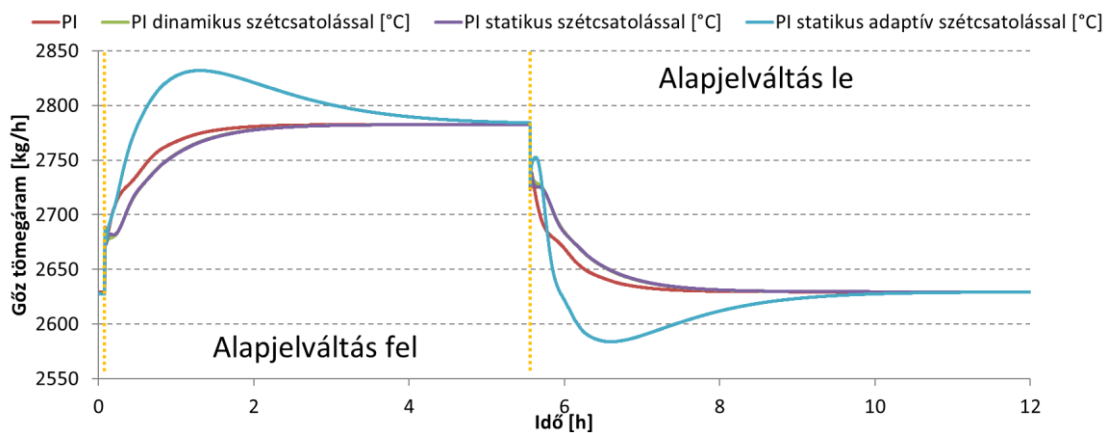
A paramétereket (erősítési tényezőt és időállandót) tehát a nyitott körű vizsgálatok során a reflux tömegáram és a gőz tömegáram függvényében határoztam meg. A visszacsatolt körben a beavatkozó jel, szabályozott jellemző és alapjel viszonylatában az utóbbi a dinamikus kevésbé

változó jel. A szabályzórendszer stabilitása érdekében ezért célszerű a hőmérséklet alapjelek függvényében meghatározni a paramétereket.

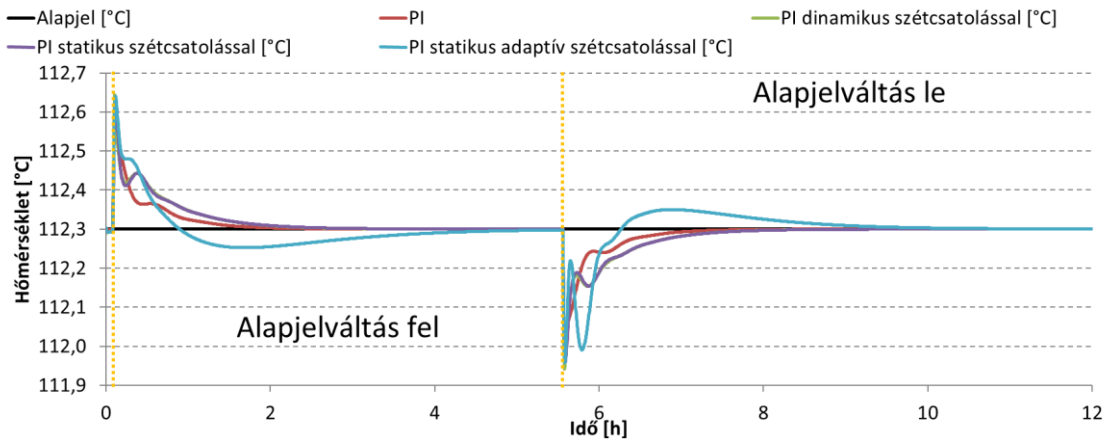
A TC1 és TC2 szabályozókörök működését a 75. – 78. ábrák szemléltetik. A vizsgálat során az első lépésben 1 °C-al növeltem a TC2 szabályzó kör alapjelét. Miután az oszlop elérte a stacioner állapotot az alapjelet visszaállítottam az eredeti értékre. Látható, hogy a kombinált szabályzórendszer (adaptív és szétcsatolt rendszer) és az egyszerűbb szétcsatoló szabályozások gyorsabban állítják az alapjelre a szabályozott változót, mint a normál PI szabályzó. A kombinált rendszer esetén a szabályzó agresszívbabban reagálnak a változásra, ez látható az alapjelekből, hiszen az alapjel váltás hatására túllendülnek a stacioner értéken. A TC1 esetén ez minimális túllendülést is eredményez. Mivel a szabályzórendszer paramétereit a megadott munkatartományban a szabályozott rendszert leíró karakterisztikákból számoltam, ezért a szabályozás minősége lényegesen nem változik a munkaponttól. A másik három szabályzó viselkedése akár nagymértékben is megváltozhat, ha másik munkaponton végezzük a bemutatott kísérletet.



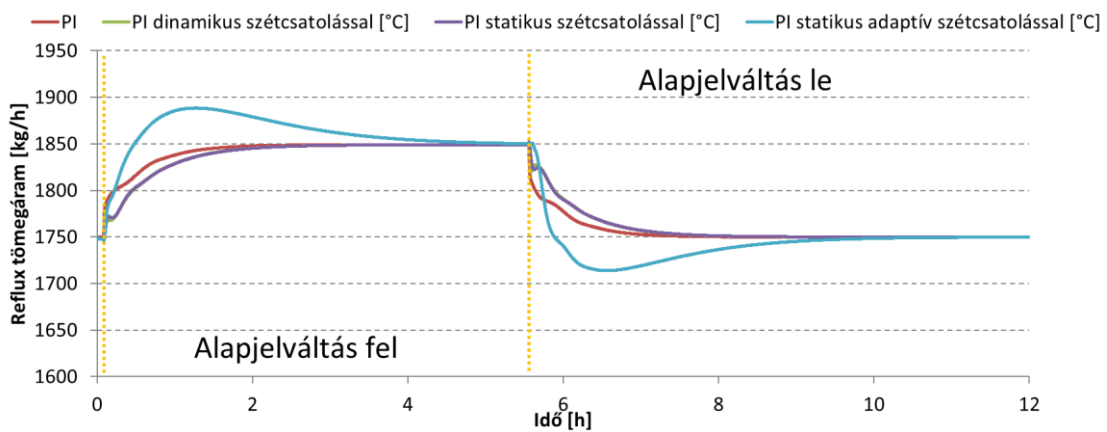
75. ábra: TC2 szabályzó kör működése alapjel váltás esetén



76. ábra: Gőz tömegárama TC2 szabályzó kör alapjel váltás esetén



77. ábra: TC1 szabályozókör működése TC2 szabályozókör alapjel váltás esetén



78. ábra: Reflux tömegárama TC2 szabályozókör alapjel váltás esetén

Kéttermékes desztillálóoszlopon végzett számítások tapasztalatai

A rektifikáló oszlop két kijelölt tányérhőmérséklete kézben tartható a bemutatott kétszintű irányítási rendszerrel. A két szint funkciója különbözik. Az alsó szinten a működési feltételeket biztosító lokális körök vannak. A tervezés szempontjából ezek a körök két csoportba sorolhatók. Az első csoportba tartoznak azok a szabályozók, melyek egymástól függetlenül hangolhatók (FC1 FC2), ezek között a kölcsönhatás csekély. A második csoportban a hangolási sorrend is fontos (FC3 PC), mivel ezeknek az egymásra hatása láthatóan befolyásolja a viselkedésüket. A második hierarchia szinten két kölcsönösen erősen összefüggő hőmérsékletszabályozó kör van. Ezeknek a köröknek a szabályozott jellemzőit stacioner karakterisztikák alapján lehet kiválasztani, ezek a karakterisztikák minőségükben is eltérhetnek különböző munkapontokon. Így a különböző üzemelési tartományokban különböző hőmérsékletmérési pontokat érdemes szabályozni. Emellett a szabályozott rendszer összetett viselkedése miatt szétcsatolást és nemlinearitás kompenzációt (adaptáció) kell alkalmazni. Az így kialakított szabályozórendszer munkaponton tartja a desztilláló berendezést kompenzálva a zavarások hatását, de a végtermékek minőségét az

operátornak kell beállítania a hőmérsékletszabályozók alapjeleinek megadásával. A termékminőségeket laboratóriumi méréssel vagy analizátorral lehet megmérni. Az ilyen jellegű üzemelést monitoring rendszerekkel lehet segíteni. Az ilyen szabályozórendszer kialakítása olcsó és üzemelése robusztus.

Az oszlop működését illetően, minőségében két különböző stacioner karakterisztikával jellemezhető munkapont tartományra bontható, ezek a karakterisztikák a termodinamikai tulajdonságoktól függenek. A két tartomány határán a hiszterézis jelensége mutatható ki. A vizsgált karakterisztikák befolyásolják az oszlop irányítási struktúráját, így tartományonként különböző irányítási struktúrát kell alkalmazni. Ennek a jelenségnek a feltárásával bemutattam egy a termodinamikai tulajdonságok és az oszlop irányítási rendszer közötti összefüggést.

Háromtermékes benzinfrafracionáló desztillálóoszlop irányítása

Ebben a fejezetben az előző munka során szerzett tapasztalatok alapján alakítom ki egy létező ipari desztillációs oszlop szabályozórendszerét. A vizsgálatokat a desztillálóberendezés egy dinamikus szimulátorán végeztem el, melyet a Pannon Egyetem Folyamatmérnöki Intézeti Tanszék munkatársai készítettek el a Mol Nyrt. stacioner szimulátora alapján. Az alap szabályozórendszer paramétereinek és szerkezetének meghatározása során törekedtem arra, hogy a rendszer minél jobban megfeleljen a valóságnak. A becsült összetétel adatok alapján egy közvetett mérésen alapuló szabályozás alakítható ki.

A felső irányítási szinten a cél, hogy a szabályozórendszer közvetlenül a termékek minőségét tartsa kézben. A valós rendszeren nincs on-line minőségmérés, laboratóriumi mintákkal biztosítják a termékek minőségellenőrzését. Ezért a vizsgálatok során létre kellett hozni azokat az algoritmusokat, amelyekkel a specifikált termékminőségeket becsülni lehet.

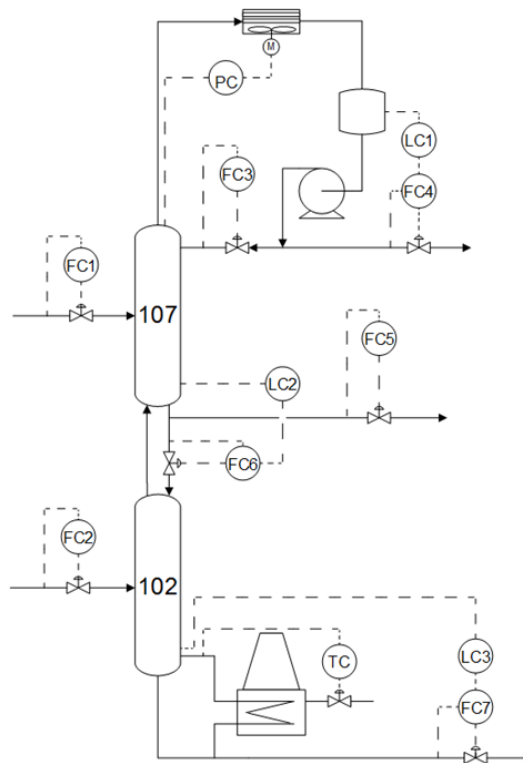
Szétválasztási feladat

A desztillálóberendezés feladata két benzin alapanyag (nehéz és könnyű) szétválasztása három benzinfrafrációra (gáz-, könnyű- és nehézbenzin). (ld. 79. ábra) Mivel a betáplálások olyan sokkomponensű elegyek melyeknek a komponens összetételét nehéz mérni, ezért az üzemeltetés során desztillációs görbékkel jellemzik azt, azonban a szimuláció elkészítéséhez a betáplálások összetételét laboratóriumi méréssel meghatározták (ld. 22. Melléklet).

A berendezést méretei miatt két kolonnarészre bontották, a felső részbe (107-es oszlop) vezetik a könnyű alapanyagot melynek a forrásponttartománya a szimulátorban 12°C és 150°C között van. Az alsórészbe (102-es oszlop) vezetik a nehéz alapanyagot, melynek a kezdő forráspontja 57 °C, a végforráspontja 197°C. A két betáplálás közül a nehéz alapanyag a nagyobb mennyiségű. A termékek leírására szintén desztillációs görbét alkalmaznak, így a specifikációkat a görbék egyes kiválasztott pontjaira adják meg. A termékekre a következő előírások az érvényesek:

- Gázbenzin végforrpont: 58-65°C
- Könnyűbenzin végforrpont: 87-147°C
- Nehézbenzin kezdőforrpont: 99-103°C

A szimulációs vizsgálatokat Aspen HYSYS™ szoftverben végeztem el. A betáplálási áram komponens összetétele miatt a Peng-Robinson [69] tulajdonságbecslő módszert alkalmaztam a számításokhoz.



79. ábra: Benzinfrakcionáló oszlop folyamatábrája

Lokális szabályozókörök

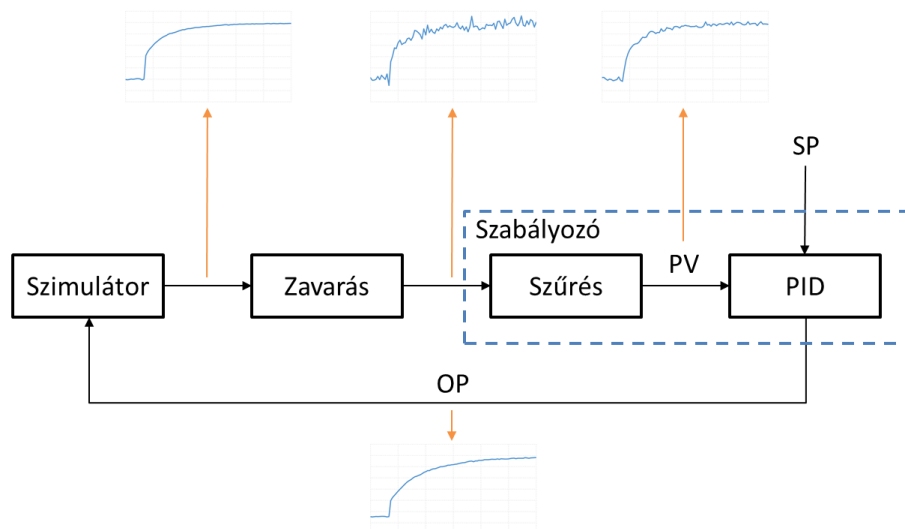
A vizsgálat során olyan szimulátor elkészítése volt a cél, amely a valós rendszer viselkedését a lehető legpontosabban leírja, ezért a lokális szabályozórendszer struktúráját az üzemi technológia alapján készítettem el. A szabályozókörök kialakítását a 79. ábra szemlélteti. Látható, hogy a reflux tartály szintjét a fejtermék mennyiségével, a 107-es oszlop alján a folyadékszintet a 102-es oszlopba lefolyó anyagmennyiséggel szabályozzák. A 102-es oszlop fenékszintjét az elvett fenéktermék mennyiségével tartják kézben. Ezért a minőség szabályozók beavatkozási pontjai a

reflux tömegáramszabályozó, az oldaltermék tömegáramszabályozó és a kemence kilépő hőmérséklet-szabályozó alapjelei lehetnek. A nyomást a légkondenzátorok frekvenciaváltóinak alapjelével szabályozzák.

A valóságos viselkedés minél pontosabb szimulálása érdekében a szimulátorból érkező jeleket zavarásokkal terheltem, és ezeket tekintetem mért szabályozott jellemzőként. Így képeztem le a mérőberendezések zavarásokkal terhelt jeleit. A zavarások mértékét üzemi tapasztalatok alapján határoztam meg (ld. 18. táblázat). Az így számolt szabályozott jellemzőt szűrtem a szabályozó blokkon belüli szűrővel és ez a jel a PID algoritmus bemenete (PV). Ez a funkció a DCS-en (Distributed Control System) is létezik és a gyakorlatban is így alkalmazzák. A 80. ábra szemléltet egy szabályozókört és bemutatja az egyes számítási lépések között a jelek típusait. Látható, hogy a szimulátorból érkező jel zavarásmentes, erre szuperponálódik a zaj, valamint a jelet holtidővel is késleltettem. A hőmérséklet mérések esetén elsőrendű átviteli függvénnyel (ez a mérőberendezés modellje) is módosítottam a szimulátorból érkező jelet, a zaj és a holtidő alkalmazása előtt.

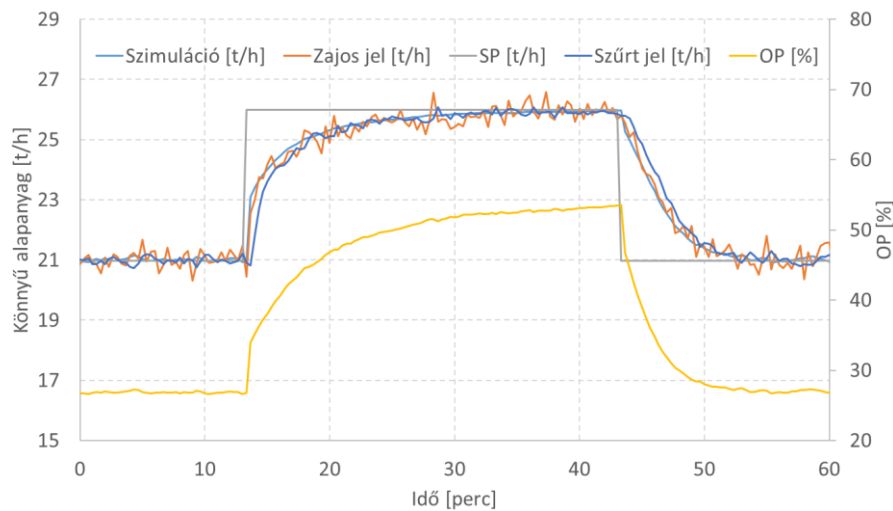
18. táblázat: Ipari desztilláló oszlop zavarásai

Jellemzők	Zaj	Holtidő	Időállandó
Tömegáram	1 %	15 s	
Nyomás	0.2 %	0 s	
Hőmérséklet	0.3 %	30 s	60 s
Szint	1 %	60 s	



80. ábra: Ipari desztilláló oszlop szabályozóköre felépítése a szimulációsórán

Az üzemben Honeywell márkájú DCS-ekkel irányítják a technológiát, ezért a szimulátorban az említett cég Equation B PID algoritmusát alkalmaztam, amelyet leképeztek a HYSYS szoftverben is [66, 67]. A szabályozó paramétereinek meghatározására a szoftver automatikus hangoloeszközét alkalmaztam, az így kiszámolt paramétereket kézi hangolással finomítottam. Az alapszabályozók viselkedését a 81. ábra szemlélteti. Látható, hogy a szabályozókör túllendülés nélkül állítja alapjelre a szabályozott jellemzőt, az így kialakított szabályozókörök robusztus viselkedésűek. Szintén látható, hogy a szimulátorból érkező jel éri el az alap jelet elsőként, míg a „szűrt jel” - ami az algoritmus bemenete - éri el utoljára. Ez a viselkedés egybevág az előzetes feltételezésemmel. Azonban az is megfigyelhető, hogy nagymértékű dinamikai változás nincs a szimulációból érkező jel és a „szűrt jel” között. Ez azért van így, mert a szűrés mértékét úgy határoztam meg, hogy a szabályozott rendszer időállandójánál lényegesen kisebb legyen, de a zaj nagyrészt kiszűrje.

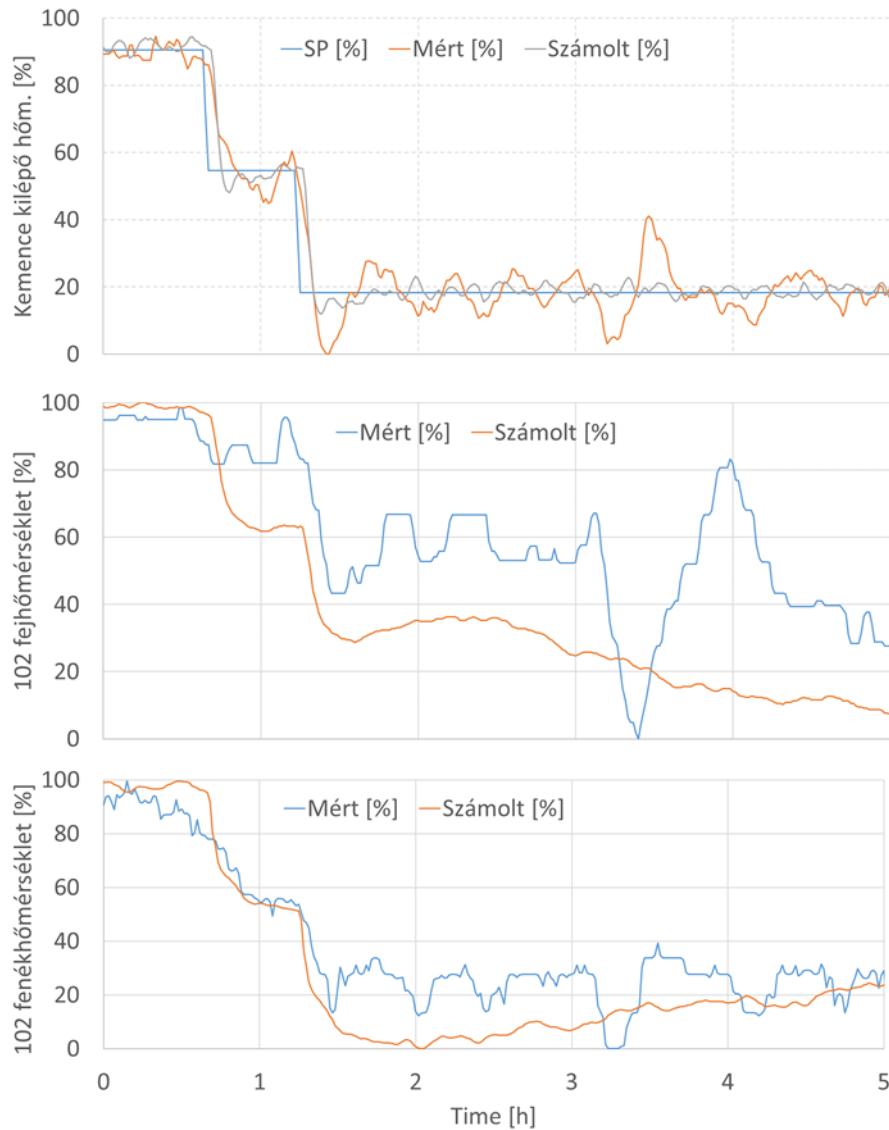


81. ábra: Ipari desztilláló oszlop alapszabályozók viselkedése a szimulációsorán

Az így kialakított alapszabályozók viselkedése hasonlít a valós rendszer szabályozóköreinek viselkedéséhez. Azonban a vizsgálatok szempontjából az egész desztillálóoszlop dinamikus viselkedése a fontos, amelynek csak egy részét befolyásolják az alap szabályozókörök, a nagyobb részét a berendezések méretei határozzák meg. A szimulátor implementálása során a valós geometriai méreteket állították be az egyes eszközöket reprezentáló szimulációs blokkokban, így feltételezhetjük, hogy a szimulátor dinamikája hasonlít a valós rendszeréhez. Azért, hogy ezt megerősítem a valós rendszer archivált adatait összehasonlítottam a szimulátor által számolt adatokkal.

A vizsgálat során a kemence kilépő hőmérsékletének alapjelét módosítottam két lépésben az archivált adatoknak megfelelően. Mivel a valósrendszer és a szimulátor munkapontja eltért, ezért a szimulációban megegyező mértékben és irányban változtattam az alapjelet. A vizsgálat alatt a 107-es oszlop fejhőmérséklet szabályozója be volt kapcsolva. Azért, hogy a dinamikus

viselkedéseket szemléletesebben össze lehessen hasonlítani a megfigyelt időszakban, normáltam az adatokat (ld. 82. ábra). Az eredményekből látható, hogy a változások azonos irányúak és hasonló dinamikájúak, így a szabályozási vizsgálatokra a szimulátor megfelelő.



82. ábra: Valós rendszer és a szimulátor eredményeinek összehasonlítása

Minőségbecslés

Az ipari desztilláló berendezésen nincs on-line analízátor, ezért a vizsgálatok során összetétel becslésre alkalmas modellt hoztam létre. Kétkomponensű elegyek esetén az egyensúlyi nyomás és hőmérséklet pontosan meghatározza a folyadék- és gőzfázisok koncentrációit. Azonban a szétválasztandó elegyek és a termékek sokkomponensűek, így a specifikált minőségek a desztillációs görbe meghatározott pontjai, amelyeket a mért hőmérséklet és nyomás nem határoz meg egyértelműen. A vizsgálatok során a minőségértéket lineáris egyenletekkel becsültem, ezek az összefüggések a rendszer dinamikáját nem írják le, így direkt kapcsolat van a bemenetek és a minőségek között (a minőségek közvetlenül kiszámíthatók a bemenetekből). Az

előnye ezeknek a függvényeknek, hogy robusztusok. Az alkalmazott matematikai modelleket a valós berendezés archivált értékein alapulnak.

Az adatgyűjtés során egy egy éves időszakban vettem figyelembe az üzemi laboratóriumi mérések és a mérőberendezések értékeit. A szenzorok jelét átlagoltam a laboratóriumi mintavétel időpontja előtti egy órás időszakban, ezzel megkaptam a mért koncentrációkhoz tartozó szenzor jel értékeket. Az összetartozó adatokat egy kvázistacioner ponthoz tartozó értéknek tekintettem, mivel ha kolonna tranziens állapotban (pl.: üzemindulás, leállítás, alapanyagváltás stb.) van, akkor nem vesznek mintát. A hőmérsékletértékekre a következő nyomáskompenzációt alkalmaztam:

$$T_C = \frac{1}{R/20361.8} \cdot \ln \frac{P}{101.325} + \frac{1}{T}, \quad (29)$$

valamint kiszámoltam a mennyiség mérések arányát. Az így kapott változókból választottam ki az lineáris egyenletek bemeneti változóit, úgy hogy a legjobban korreláló adatsorokat jelöltem ki. Ezután a célváltozók és a kiválasztott adatsorok között regresszióval határoztam meg a lineáris egyenletek paramétereit. Ha a becsülni kívánt koncentrációt nem írta le megfelelően az egy bemeneti változós lineáris egyenlet, akkor két bemeneti változós összefüggést alkalmaztam. Az egyenletek bemeneti változóit a 19. táblázat foglalja össze. Mivel a termékek minősége erősen összefügg azok egyensúlyi hőmérsékletével, ezért mind a három minőségbecslés bemenete a termékek nyomáskompenzált hőmérséklete.

19. táblázat: Minőségbecslések változói

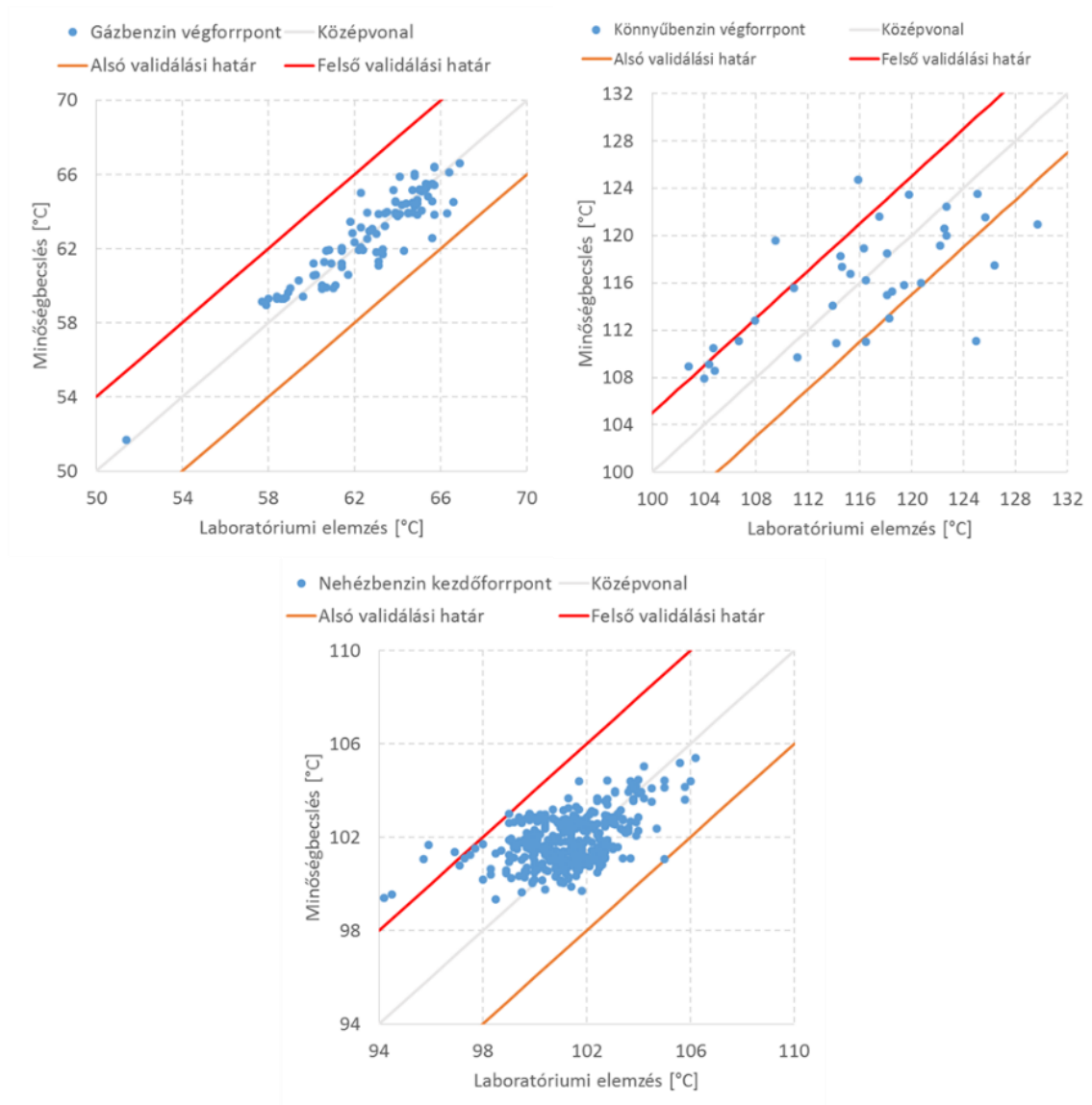
Minőség	1. bemenet	2. bemenet
Gázbenzin végforrpont	107 fejtermék PCT	
Könnyűbenzin végforrpont	107 fenéktermék PCT	$\frac{\text{Könnyűbenzin menny.}}{\text{Könnyű alapanyag menny.}}$
Nehézbenzin kezdőforrpont	102 fenéktermék PCT	

A koncentráció becslés minőségét a 83. ábra, a számítások szórásdiagramját a 84. ábra szemlélteti. Látható, hogy a becslések megfelelően követik a koncentrációváltozásokat. A minőségbecslések értékelését a laboratóriumi mérések reprodukálhatósága alapján végeztem és szórásdiagramot alkalmaztam. Azért ezt az értékelési módszert választottam, mert a statisztikai értékeléshez kevés az adat. Ahogy a szórásdiagramon látható a gázbenzin végforráspon t becslésénél az összes adatpont a reprodukálhatóság által kijelölt határon belül van. A könnyű benzin végforráspon t esetén az adatpontok egy jó része kívül esik a megfelelőségi tartományból, azonban az is látható az ábrán, hogy a vizsgált időszakban kevés laboratóriumi mintát vettek, így ezt a számítást az implementálás után monitorozni kell, és ha szükséges hangolni. Meg kell említenem, hogy a minőségbecsléseket az üzemeltetés során a laboratóriumi minták értékeivel folyamatosan

korrigálják, egy ilyen logikával ellátva ez a számítás is megfelelő stationer pontosságot érhet el. A nehézbenzin kezdőforráspont értékelésénél látható, hogy az adatok kevés hányada esik a megfelelő tartományon kívül. Szintén látható, hogy az adatpontok egy kis tartományra sűrűsödnek, így ennél a számolásnál is indokolt a monitorozás, hogy üzemeltetés során megfigyelhető legyen, ha az oszlop az illesztési tartományon kívül van.



83. ábra: A becslés minősége a mérési értékekre vonatkoztatva



84. ábra: Minőségbecslések értékelése

A bemutatott információk alapján a minőségbecslések által számított értékek alkalmazhatók szabályozott paraméterként. Ezeket a számításokat implementáltam az üzem folyamatinformációs rendszerébe, ezzel a becslések tesztidőszaka megkezdődött, így a későbbi minőség szabályozás kialakításánál már tesztelt számítások lesznek alkalmazva.

Kimondható, hogy ezeknek a becsléseknek a kimeneti értékeit kézben tartva, közvetve a bemeneti paraméterek értékét szabályozzuk, így az összefüggések bemeneti változóinak definiálása során lényegében a szabályozott paramétereket választjuk ki.

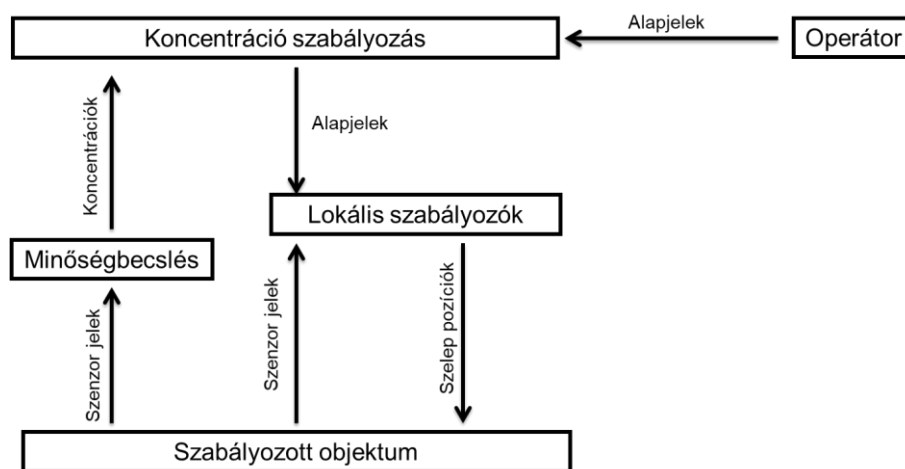
Minőség szabályozás

A minőség szabályozók szabályozott jellemzőjét a specifikált minőségi paraméterek kiválasztása során definiálják, ezeknek az on-line értéke az előbbieken leírtak alapján biztosítható. A felső szabályozási szinten a beavatkozók a lokális szabályozók alapjelei, mivel ennél a feladatnál az

alsó szabályozási szint kötött, ezért a beavatkozási változók is adottak. Így a szabályozott és beavatkozó jellemzők a következők:

- MV1: Reflux mennyiség alapjel
- MV2: Könnyűbenzin mennyiség alapjel
- MV3: Kemence kilépő hőmérséklet alapjel
- CV1: Gázbenzin végforrpont
- CV2: Könnyűbenzin végforrpont
- CV3: Nehézbenzin kezdőforrpont

A szabályozórendszer szerkezetét a 85. ábra szemlélteti.

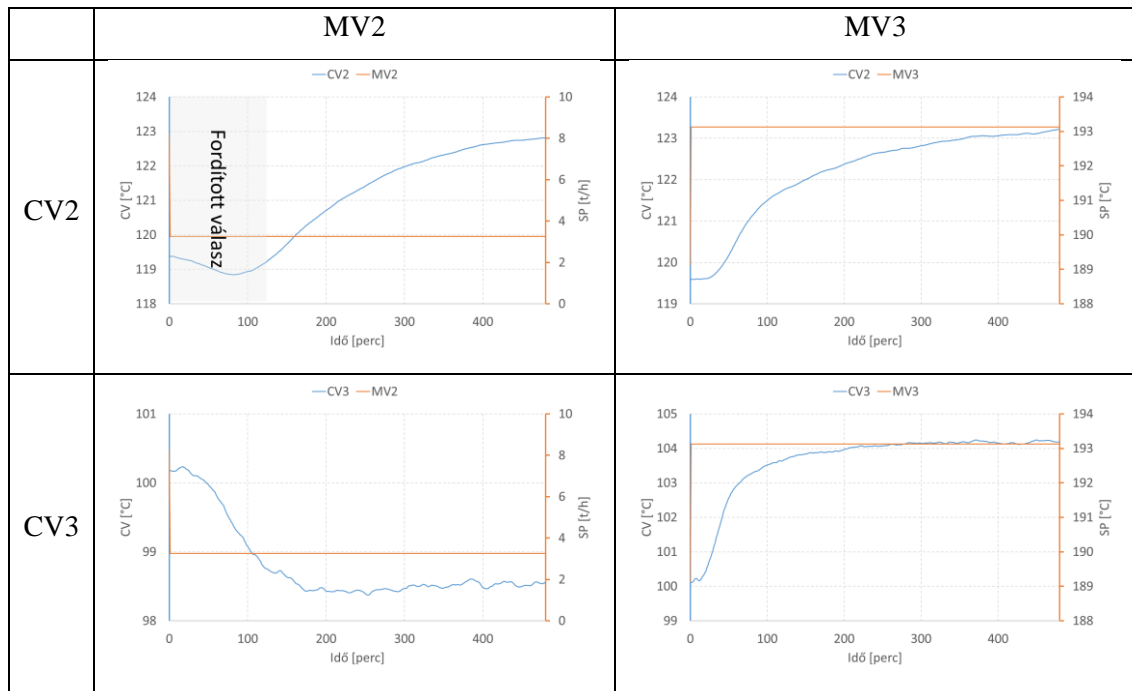


85. ábra: Ipari desztilláló oszlop szabályozási struktúrája

Ebben a vizsgálatban a minőségeket egy benetű – egy kimenetű szabályozókkal akarom szabályozni, ezért a cél a megfelelő MV – CV párok meghatározása. Ehhez segítséget nyújt a szabályozott rendszer Bristol mátrixa (ld. 20. táblázat). Ahogy láthatjuk a CV1-et csak az MV1-el lehet szabályozni. A többi változókat kétféleképpen lehet párosítani. A nyilvánvaló párosítás a CV2 – MV2 / CV3 – MV3 lenne, azonban a dinamikai vizsgálatok során kiderült, hogy a CV2 – MV2 pár esetén fordított válaszu rendszert kellene szabályozni. Ez instabilitást okozhat a szabályozórendszerben és/vagy hosszú beállási időt eredményez. A rendszer dinamikus viselkedését a 86. ábra szemlélteti. A látható dinamikus viselkedés miatt a CV1 – MV1 / CV2 – MV3 / CV3 – MV2 kapcsolatokat alakítottam ki.

20. táblázat: Ipari desztilláló oszlop Bristol mátrixa

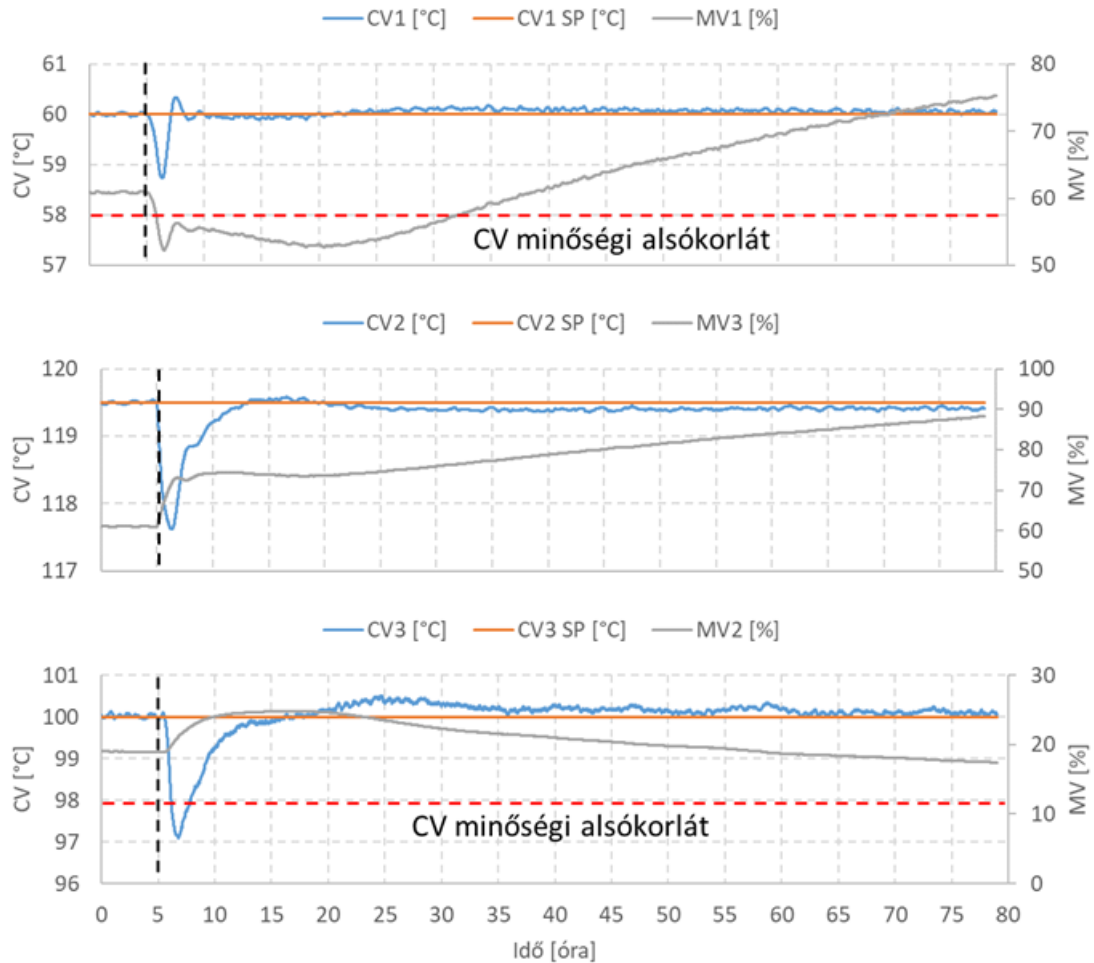
	MV1	MV2	MV3
CV1	7,7	-1,2	-5,5
CV2	-6,9	1,9	6,0
CV3	0,2	0,3	0,5



86. ábra: Ipari desztilláló oszlop szimulációjának dinamikus viselkedés lépés teszt során

Az előbb bemutatott vizsgálat alapján elkészíthetők a desztilláló oszlop MPC-hez szükséges átviteli függvényei, ezek a modellek a valós berendezés modell alapú szabályzásának kialakításánál alkalmazva lesznek, mint előzetes modellek.

A szabályzóköroket a lokális szabályzóköroknél említett módon hangoltam. A szabályzórendszer működését a könnyű alapanyagáram megnövelésével teszteltem. A szabályzó viselkedését 87. ábra szemlélteti, a zavarás az 5. órában történt. Amint látható a CV1 nem lépi át a zavarás hatására a minőségi határértéket és a szabályozott jellemző 2,5 óra után eléri az alapjelet. A három minőség jel közül ennek a legkisebb a kiugrása megközelítőleg 1,3 °C. A CV2-nek megközelítőleg 2°C-os a kitérése az alapjeltől, azonban ez a változó távol van a minőségi határértékektől így azt nem lépi át. A beállási idő megközelítőleg 7,5 óra. A CV3-nak a kitérése 3°C, ezzel átlépi a specifikációs határértéket, a változó 2,5 óra után visszatér a kívánt tartományba és kb.15 óra után eléri az alapjelet. Ahogy látható a CV-k alapjelre állása után az MV-k még nem érték el a stacioner állapotot, a hosszú beállási idő miatt nincs ábrázolva az egész időtartomány.



87. ábra: Ipari desztilláló oszlop minőség szabályozásának működése

Az így kialakított szabályozórendszerek robusztusok, azonban az MPC (model predictive control) megoldásokkal szemben úgy biztosítják az energia hatékony üzemelést, hogy a kezelő megfelelő alap jelet ad a szabályozóknak. A gazdaságos üzemeltetést így monitoring rendszer kialakításával lehet elősegíteni. Ezek a rendszerek akkor következetesek, ha egy átfogó KPI (Key Performance Indicator) rendszerre alapulnak, és olyan célokat adnak az operátoroknak, melyeket el tudnak érni. Az első lépés az ilyen KPI-ok megalkotása során a megfelelő megfigyelt paraméter kiválasztása. Ennél a szabályozórendszerrel például a minőség szabályozók alapjelei lehetnek ezek. Ezután ezekre a paraméterekre ki kell építeni egy figyelmeztető logikai algoritmust, ami jelzi az operátornak, ha a beállított alapjel nem gazdaságos. [78] Az így kialakított monitoring rendszer olyan nyitott körű szabályozásnak felel meg, ami a bemutatott kétszintes szabályozórendszer felett helyezkedik el a struktúra szempontjából.

Háromtermékes desztillálóoszlopon végzett számítások tapasztalatai

A kéttermékes desztillálóberendezés szabályozórendszerénél megfogalmazott alapelvek alkalmazhatók voltak a benzinfractionáló oszlop szabályozása esetén is. A minőség szabályozásra

az alkalmazott szabályozási struktúra alkalmas. A stacioner értékek alapján elkészített minőségszámítások robusztusan alkalmasak a berendezés munkaponton tartására. A minőségbecslés bemeneteinek meghatározása során áttételesen a kézben tartott paramétereket határozzuk meg. A változók kiválasztása során a minőségi paraméter és a lehetséges bemenet közötti korreláció alapján kell dönteni. Ha a kolonnát egybemenetű – egykimenetű szabályozó algoritmusokkal tarjuk kézben, a beavatkozókat és a szabályozott jellemzőket nagy körültekintéssel kell párosítani. Elsődlegesen az oszlop stacioner erősítéseit kell figyelembe venni, az ehhez alkalmazható egyik technika a Bristol mátrix elkészítése, ezzel feltérképezhetők azok a párok, melyek elkerülendők. Továbbá meg kell vizsgálni az oszlop dinamikai viselkedését az egyes beavatkozó és szabályozott jellemzőpárok között, és ezek alapján kell dönteni a végleges párokról. MPC alkalmazásával a kereszthatások az egyes változók között alapvetően figyelembe vannak véve, az ilyen szabályozókkal a változók párosításából adódó bizonytalanság megszűnik [79]. Azonban ezek a szabályozórendszerek lényegesen drágábbak, és összetettségük miatt speciális mérnöki tudást igényel a karbantartásuk.

Az elvégzett számításokkal előkészítettem egy modell prediktív szabályozó telepítését, hiszen a bemutatott minőségbecslések alkalmasak az oszlop kézbentartására és a minőség szabályozás előkészítéséhez végzett vizsgálatokkal elkészítettem az előzetes MPC modelleket.

3. Összefoglalás

A dolgozatom célja, hogy feltárjam az összefüggést a szétválasztandó elegy tulajdonságai és a szétválasztó rendszer szerkezete, valamint a szabályzórendszer felépítése között. Az összefüggéseket úgy vizsgáltam, hogy kiválasztottam négy a szétválasztási rendszerekkel kapcsolatos tervezési feladatot, és ezek megoldása során megpróbáltam kiemelni azokat általánosítható alapelveket, amelyek segítséget nyújtanak a szétválasztó rendszer felépítésének meghatározásában. Így az osztott terű kolonnák hatékonysági kérdéseivel, a sokkomponensű szétválasztó rendszerek tervezésének egy intuíción és egy feltételes szélsőérték megoldáson alapuló megoldásával és végül egy gyakori struktúrájú és egy ipari kolonna hierarchikus irányítási rendszerének kialakításával foglalkoztam.

Az osztott terű rektifikáló oszlop vizsgálatában felépítettem egy benzol – toluol - xilol elegyet szétválasztó kolonna stationer szimulációját. A szimuláció segítségével paraméter vizsgálatot végeztem, amelyben bemutattam a kolonnára jellemző paraméterek, a betáplálási áram összetétele és a kolonna energia felhasználás közötti összefüggéseket. Az irodalmi kutatásomban ilyen széleskörű paramétervizsgálatot nem találtam. Az eredmények segítenek az osztott terű kolonna tervezése során a paraméterek értékeinek meghatározásában. Az osztott terű kolonna paraméter vizsgálatánál a bemutatott tartományokban nem ütköztem gazdasági korlátba, azaz a hagyományos oszlophoz képest az üzemeltetési költsége mindig kisebb volt, mivel az energiaigénye kisebb minden esetben. Azonban a fal méretétől és pozíciójától nagymértékben függ a desztillálóberendezés energia megtakarítás mértéke. A vizsgálatokban meghatároztam az osztott terű kolonna optimális paraméterkombinációját azonban ez változhat a betáplálás összetételével, ezért javaslom a tervezés során érzékenységvizsgálatokat végezni az adott üzemeltetési tartományban. A vizsgálatok folytatásában érdemes lehet célul kitűzni egy olyan szélsőérték keresésen alapuló módszert, amely egy megadott szétválasztandó elegy koncentráció tartományban kiszámítja a minimális költségű konstrukciót.

A sokkomponensű szétválasztó rendszerek tervezésének bemutatásában egy olefingyári pirogáz szétválasztó rendszerét terveztem meg, heurisztikus szabályok segítségével és feltételes szélsőérték megoldáson alapuló módszerrel. A heurisztikus szabályok alkalmazása során a szétválasztandó elegy komponenseit forrásponti sorrendbe állítottam és az összetételét és a komponensek forráspontról való különbségét egy diagramon ábrázoltam, ezzel az ábrával segítettem az ökoliszabályok alkalmazását. Az eredmények igazolják, hogy a diagram segítségével, a piaci szempontokat is figyelembe véve, pontosabban meghatározható az n termék osztály. Igazoltam, hogy a diagram segítségével szintén meghatározhatók a vágás helyei, definiálhatók a kulcs komponensek, és a termék specifikációkat figyelembe véve elvégezhető az $(n-1)$ szétválasztás. A feltételes szélsőérték megoldáson alapuló módszer vizsgálatánál megalkottam egy olyan

alkalmazást mely leképezi a szétválasztási feladat megoldására alkalmas összes lehetséges szétválasztó rendszert. A program kiszámolja a szétválasztó rendszerek üzemeltetési és beruházási költségét, így a rendszerek rangsorolhatók a költségük alapján. Ezzel az eszközzel meghatároztam különböző segédenergia árak mellett a lehetséges szeparációs rendszerek költségsorrendjét úgy, hogy az egyes szétválasztási lépések azonos nyomáson történtek. Meghatároztam a költségsorrendet úgy is, hogy az egyes szeparációs lépésekben kiszámítottam az optimális nyomást. Bebizonyítottam, hogy ha a legmelegebb, ill. a leghidegebb segédenergiák árai lényegesen nagyobbak, akkor az elválasztó rendszert úgy kell kialakítani, hogy a legnagyobb, ill. legkisebb forráspontú terméket az utolsó lépésben válasszuk el. A vizsgálatok folytatása úgy hozhatna eredményt, ha az alkalmazott gazdasági és technológiai modellt pontosításával több olyan általánosítható szabályt alkotnának melyek segítségével egy szétválasztó rendszer megalkotása során csökkenteni lehetne a lehetséges szétválasztó rendszerek számát.

A hagyományos kéttermékes kolonna vizsgálatában megalkottam egy benzol – aceton elegyet szétválasztó rektifikáló berendezés dinamikus szimulációját. A szimuláció segítségével elvégezhettem azokat a vizsgálatokat, amelyek egy desztilláló oszlop irányítórendszerének tervezéséhez szükségesek. Az irányító rendszert két hierarchia szintre bontottam fel. Az alsó szinten vannak az üzemelést biztosító lokális szabályozókörök, a felső szinten vannak a berendezést megfelelő üzemeltetési tartományba tartó szabályozólogikák. A felső szabályozási szinten a szabályozott jellemzőket a szétválasztandó anyagok termodinamikai tulajdonságától függő stacioner karakterisztikák alapján lehet kiválasztani. Ezeket a karakterisztikákat megalkottam és az eredményekből azt láttam, hogy a stacioner karakterisztikák minőségükben is eltérhetnek különböző munkapontokon. Így a különböző üzemelési tartományokban különböző hőmérsékletmérési pontokat érdemes szabályozni. Ez a jelenség további tanulmány témájául is szolgálhat, hiszen nagymértékben befolyásolhatja az irányítórendszer felépítését.

Az ipari kolonna hierarchikus irányítási rendszerének kialakítása során egy ipari adatokra illesztett benzinfractionáló kolonna szimulációja segítségével kialakítottam a berendezés szabályozórendszerét, mellyel a termékek specifikált koncentrációit lehet kézben tartani. A minőség becslő regressziós modelleket a valós rendszer historikus adatai alapján készítettem el. Megállapítottam, hogy a stacioner értékek alapján elkészített minőségszámítások robusztusan alkalmasak a berendezés munkaponton tartására és a minőségbecslés bemeneteinek meghatározása során áttételesen a kézben tartott paramétereket határozzuk meg. A minőség szabályozás megalkotása során megalkottam egy olyan szabályozórendszert ami képes a minőségek kézbentartására. A vizsgálatokkal előkészítettem az oszlop modellalapú szabályozórendszerének az alapjait, ez a jövőben installálásra kerül és így a bemutatott vizsgálatok valós eredménnyel is bírnak.

4. Tézisek

- 1. Az elegyek termodinamikai tulajdonságai alapvetően meghatározzák a szétválasztó rendszerek szerkezetét. Ha a feladatban kitűzött szétválasztásnak nincs termodinamikai korlátja, akkor a cél a leggazdaságosabb szétválasztórendszer kiválasztása úgy, hogy figyelembe vesszük a teljes technológia gazdasági optimumát. Igazoltam, hogy a kettőnél több termékes szétválasztó rendszerek esetén, ha a szétválasztások közel azonos nyomáson gazdaságosak, az osztott terű desztilláló oszlop javíthatja a szétválasztás gazdaságosságát.**

(Kapcsolódó publikációk: 2, 3, 7, 11, 12, 13, 16)

Egy osztott terű kolonna paraméter meghatározása során bemutattam, hogy a vizsgált tartományokban az üzemeltetési költsége mindig kisebb a hagyományos oszlophoz képest. Így igazoltam, hogy a háromtermékes elválasztások esetén az osztott terű kolonna alkalmazása javasolt. Bemutattam, hogy az energia megtakarítás mértéke erősen függ a betáplálás összetételétől.

Bemutattam, hogy a fal méretétől és pozíciójától nagy mértékben függ a desztillálóberendezés energiaigénye. A falra vonatkozó optimális paraméter kombináció változhat a betáplálás összetételével, ezért az adott üzemeltetési tartományban javasolt érzékenységvizsgálatokat végezni.

Az eredményekből látható, hogy a bemutatott paramétervizsgálat algoritmizálható és optimális megoldást ad az adott szétválasztási feladatra, így meghatározható a gazdaságilag megfelelő oszlopkonstrukció.

- 2. Megállapítottam, hogy a többtermékes szétválasztási feladat esetén - amelyeknél a szétválasztást több kéttermékes oszlop sorba kapcsolásával gazdaságos megoldani, olyan ökol szabályok segítségével, amelyek gazdasági számításokkal alátámasztottak - érdemes a lehetséges szétválasztó rendszerek számát csökkenteni, majd algoritmikus tervező módszerrel meghatározni a gazdaságilag optimális kolonna sorrendet. Ezen módszerek alapjai a termodinamikai megfontolások illetve a termodinamikai modellek.**

(Kapcsolódó publikációk: 1, 4, 8, 9, 17)

Bemutattam, hogy a szakirodalomból ismert szétválasztási nehézséget mérő különböző mutatók alkalmazása mellett, célszerű a szétválasztandó elegy komponenseinek forráspont szerinti rendezése, az összetétel és forráspont különbség diagram elkészítése (minden szétválasztást megelőzően).

Az eredmények igazolják, hogy a diagram segítségével, a piaci szempontokat is figyelembe véve, pontosabban meghatározható az n termék osztály. Igazoltam, hogy a diagram segítségével szintén meghatározhatók a vágás helyei, definiálhatók a kulcs komponensek, és a termék specifikációkat figyelembe véve elvégezhető az $(n-1)$ szétválasztás.

Bebizonyítottam, hogy ha a legmelegebb ill. a leghidegebb segédenergiák árai lényegesen nagyobbak, úgy az elválasztó rendszer akkor gazdaságos, ha a legnagyobb ill. legkisebb forrásponitú terméket az utolsó lépésben választjuk el.

- 3. A desztillációs oszlop munkaponton tartására alkalmazható tányér hőmérsékletek a berendezés stacioner karakterisztikáitól függenek, ezeket a karakterisztikákat a termodinamika határozza meg. Bebizonyítottam, hogy a tervezés alapjául szolgáló karakterisztikák különböző üzemelési tartományokban jellegükben is eltérőek lehetnek. Ezért vizsgálni kell, hogy a jellegében más karakterisztikák milyen üzemelési tartományra érvényesek. Az üzemelés során biztosítani kell azt is, hogy a megadott szabályozási kapcsolattal az oszlop ne lépjen ki a tervezési tartományból, vagy az üzemelési tartománnyal változtatni kell szabályozórendszer szerkezetét is.**

(Kapcsolódó publikációk: 5, 6, 10, 14, 15)

A szabályozó rendszer koordináló szintjén kölcsönösen erősen összefüggő szabályozókörök vannak. Ezeknek a feladata, hogy a berendezést megfelelő munkaponton tartsák. Bemutattam, hogy a koordináló szinten a szabályozott paraméterek lehetnek a meghatározott tányér hőmérsékletek, illetve a tányérhőmérsékleten alapuló minőségbecslések. Az eredményekből látható, hogy a szabályozott paramétereket stacioner karakterisztikák alapján lehet kiválasztani, ezek a karakterisztikák minőségükben is eltérhetnek különböző munkapontokon. Így a különböző üzemelési tartományokban különböző hőmérsékletmérési pontokon érdemes szabályozni. Bemutattam, hogy a két tartomány határán a hiszterézis jelensége is megjelenik.

Megállapítottam, hogy a stacioner értékek alapján elkészített minőségbecslések robusztusan alkalmasak a berendezés munkaponton tartására. Bemutattam, hogy a minőségbecslés bemeneteinek meghatározása során áttételesen a kézben tartott paramétereket határozzuk meg. Az eredményekből látható, hogy a változók kiválasztása során a minőségi paraméter és a lehetséges bemenet közötti korreláció alapján kell dönteni.

Bebizonyítottam, hogy ha a kolonnát egybemenetű – egykimenetű szabályozó algoritmusokkal tarjuk kézben, a beavatkozópárok meghatározásánál a stacioner karakterisztikákból adódó korlátokat kell először figyelembe venni, ezt a szétválasztott elegy termodinamikai tulajdonságai határozzák meg. Ezután a dinamikus viselkedés alapján kell a párosításokat elvégezni.

5. Publikációk

Folyóiratcikk:

1. Szabó László, Németh Sándor, Szeifert Ferenc; Analysis of separation possibilities of multicomponent mixtures; Computer Aided Chemical Engineering; ISBN: 978-0-444-53711-9; pp. 341-345 (2011)
2. Szabó László, Balaton Miklós Gábor, Németh Sándor, Szeifert Ferenc; Analysing divided wall columns; Clean Technologies and Environmental Policy; DOI: 10.1007/s10098-011-0369-x (2011)
3. Szabó László, Balaton Miklós Gábor, Németh Sándor, Szeifert Ferenc; Modelling of divided wall column; Chemical Engineering Transactions; ISBN: 978-88-95608-05-1; pp. 67-72 (2010)
4. Szabó László, Németh Sándor, Szeifert Ferenc; Separation of multicomponent mixtures; Hungarian Journal of Industrial Chemistry, Vol. 36; HU ISSN: 0133-0276; pp 101-106 (2011)
5. Szabó László, Németh Sándor, Szeifert Ferenc; Three-Level Control of a Distillation Column; Engineering, Vol. 4 No. 10; DOI: 10.4236/eng.2012.410086; pp. 675-681 (2012)
6. Szabó László, Klára Kubovicsné Stocz, Laura Szabó, Németh Sándor, Szeifert Ferenc; Dynamic simulator-based APC design for a naphtha redistillation column; Hungarian Journal of Industry and Chemistry, Vol. 45; DOI: 10.1515/hjic-2017-0004; pp. 17-22 (2017)

Előadás teljes szöveg megjelenéssel

7. Szabó László, Németh Sándor, Szeifert Ferenc; Osztott terű rektifikáló kolonna modellezése; 37. Műszaki Kémiai Napok, Veszprém, 2009
8. Szabó László, Németh Sándor, Szeifert Ferenc; Sokkomponensű elegyek szétválasztása; Mobilitás és Környezet Konferencia; Veszprém; 2011
9. Szabó László, Németh Sándor, Rabi István, Szeifert Ferenc; Separation Possibilities of multicomponent mixtures; INTERFACES' 11, Sopron, 2011
10. Szabó László, Németh Sándor, Szeifert Ferenc; Hierarchical control of a distillation column; 5th International Interdisciplinary Technical Conference of Young Scientists; Poznań, 2012

Előadás csak kivonatos megjelenéssel:

11. Szabó László, Dobos László Németh Sándor, Szeifert Ferenc; Osztott terű rektifikáló kolonna modellezése és szabályozása; VIII. Alkalmazott Informatika Konferencia, Kaposvár, 2010
12. Szabó László, Németh Sándor, Szeifert Ferenc; Osztott terű rektifikáló kolonna modellezése és stacioner vizsgálata; Informatika korszerű Technikái; Dunaújváros; 2010
13. Szabó László, Németh Sándor, Szeifert Ferenc; Dynamic Modelling and Control of Divided Wall Column; 8th Meeting of Young Chemical Engineers; Zágráb; 2010
14. Szabó László, Németh Sándor, Szeifert Ferenc; Control of rectification columns; 9th Meeting of Young Chemical Engineers; Zágráb; 2012
15. Szabó László, Németh Sándor, Szeifert Ferenc; Multi-Level Control Of A Binary Distillation Column; CAPE Forum 2012; Veszprém 2012

Poszter:

16. Szabó László, Balaton Miklós Gábor, Németh Sándor, Szeifert Ferenc; Modeling of divided wall column; 13th Conference Process Integration, Modelling and Optimisation for Energy Saving and Pollution Reduction; Prága; 2010
17. Szabó László, Németh Sándor, Szeifert Ferenc; Analysis of separation possibilities of multicomponent mixtures; 21st European Symposium on Computer-Aided Process Engineering; Szaloniki; 2011

6. Változók jegyzéke

α_j^i	i komponens j-re vonatkoztatott relatív illékonysága
y_i, y_j	gőzfázisban i és j komponensek mol törtje
x_i, x_j	folyadékfázisban i és j komponensek mol törtje
K_i, K_j	i és j anyag illékonysága (egyensúlyi állandó)
N_{min}	A szétválasztási feladathoz szükséges minimális elméleti tányérszám
x_D	könnyű komponens mol törtje a fejtermékben (desztillációban)
x_B	könnyű komponens mol törtje a fenéktermékben (desztillációban)
α_{avg}	átlagos relatív illékonyság
R_{min}	minimális refluxarány
C_{DS}	szeparáció nehézsége „coefficient of difficulty of separation”
x_F	könnyű komponens mol törtje a betáplálásban
F_B	fenéktermék anyagárama (mol/s)
F_D	fejtermék anyagárama (mol/s)
x_{HK}	nehéz komponens moltörtje a fenéktermékben (mol/mol)
x_{LK}	könnyű komponens moltörtje a fejtermékben (mol/mol)
$\alpha_{LK/HK}$	könnyűkomponens nehézkomponensre vonatkoztatott relatív illékonyság a kulcskomponensek között
C_{ES}	elválasztás könnyűsége „coefficient of ease of separation”
r	termékáramok hányadosa F_D/F_B vagy F_B/F_D , attól függően, hogy melyik a kisebb (mol/mol)
Δi	szétválasztandó komponensek közti forráspont különbség, vagy $(\alpha_{LK/HK}-1) \cdot 100$
p_D	kolonna fejnyomása (MPa) $0.007 < p_D < 6,89$
T_{FB}	a betáplált elegy forráspontja ($^{\circ}\text{C}$) $-72^{\circ}\text{C} < T_{FB} < 699^{\circ}\text{C}$
COST	összes költség
i CAPEX	i-dik kolonna beruházási költsége
i OPEX	i-dik kolonna üzemeltetési költsége
τ	amortizációs idő
$C(T)_{\substack{\text{fűtés} \\ \text{hűtés}}}$	segédenergiák fajlagos költsége
M&S	Marshall and Swift index
f_{1-4}^i	i-dik kolonna beruházási faktora
N^i	i-dik kolonna tányérszáma

C_b^i	i-dik kolonna köpeny tömegére vonatkozó beruházási változó
C_{p1}^i	i-dik kolonna méretére vonatkozó beruházási változó
$\Delta H_{kiforráló}^i$	i-dik kolonna kiforráló hőigénye
$\Delta H_{kondenzátor}^i$	i-dik kolonna kondenzátor hőigénye
$V_{(gőz/foly),i}$	i-dik hőcserélőben áramló közeg mennyisége
Inc	Bevétel
C	Termékek száma
N_C	Lehetséges kapcsolatok száma
n	anyagmennyiség
U_{sys}	a rendszer belsőenergiája
t	idő
H	entalpia
u	sebesség
z	magasság
\dot{Q}_o :	környezet és az egységnyi térfogat közötti hő forgalom
$\sum_i \dot{Q}_i$:	a rendszerrel szándékosan közölt ill. elvont hő összege
$\sum_j \dot{W}_j$:	a rendszeren végzett munka
S_{sys}	a rendszer entrópiája
S_{fs}	ki és belépő áramok entrópiája
T_0	környezet hőmérséklete
T_i	hő közlő és elvonó berendezések hőmérsékletei
Φ	irreverzibilis folyamatok által okozott entrópia növekedés
G	szabadenergia
ExV	exergiaveszteség
η	termodinamikai hatásfok
y^* :	a vizsgált készülékrészben az alsó tányérra érkező gőz mol törtje
x^* :	a vizsgált készülékrészben az alsó tányérról távozó folyadék mol törtje
x_D :	fejtermék mol törtje
x_B :	fenéktermék mol törtje
z_F :	betáplálás mol törtje
G_{min}	a vizsgált készülékrészben az alsó tányérra érkező gőz minimális mol árama
V_{min}	a vizsgált készülékrészben az alsó tányérra belépő gőz minimális mol árama

L_{min}	a vizsgált készülékrészben az alsó tányérról távozó folyadék minimális mol árama
D :	fejtermék mol árama
B :	fenéktermék mol árama
F :	betáplálás mol árama
Q_C :	kondenzátor hőigénye
Q_R :	reboiler hőigénye
H_F :	betáplálás moláris entalpiája
H_D :	fejtermék moláris entalpiája
H_B :	fenéktermék moláris entalpiája
H_L	a vizsgált készülékrészben az alsó tányérról távozó folyadék moláris entalpiája
H_V	a vizsgált készülékrészben az alsó tányérra érkező gőz moláris entalpiája
H_{def}	nettó entalpia deficit
τ	Megtérülési idő
CAPEX	Beruházási költség
OPEX	üzemeltetési költség
Inc	Bevétel
T_C	Nyomáskompenzált hőmérséklet
P	Mért nyomás
T	Mért hőmérséklet
w(t)	Alapjel
u(t)	Szabályozó kimenete/Beavatkozó értéke
y(t)	Szabályozott paraméter

7. Irodalom jegyzék

- [1] M. Khalifa and M. Emtir, "Rigorous optimization of heat-integrated and Petlyuk column distillation configurations based on feed conditions," *Clean Technol. Environ. Policy*, vol. 11, no. 1, pp. 107–113, 2009.
- [2] C. a Floudas, "Nonlinear and Mixed-Integer Optimization," *Handb. Appl. Optim.*, p. 462, 1995.
- [3] Mansour Masoud Khalifa Emtir, "Economic and Controllability Analysis of Energy-Integrated Distillation Column," 2002.
- [4] W. D. Seider, J. D. Seader, and D. R. Lewin, *Product & Process Design Principles - Synthesis, Analysis & Evaluation*. 2003.
- [5] Z. Fonyó and G. Fábry, *Vegyipari művelettani alapismeretek*. Budapest: Nemzeti Tankönyvkiadó Rt, 2004.
- [6] M. R. Fenske, "Fractionation of Straight-Run Pennsylvania Gasoline," *Ind. Eng. Chem.*, vol. 24, no. 5, pp. 482–485, 1932.
- [7] A. J. V. Underwood, "The theory and practice of testing skills," *Trans Am Inst Chem Eng.*, vol. 10, pp. 112–152, 1932.
- [8] V. M. Nadgir and Y. A. Liu, "Studies in chemical process design and synthesis: Part V: A simple heuristic method for systematic synthesis of initial sequences for multicomponent separations," *AIChE J.*, vol. 29, no. 6, pp. 926–934, 1983.
- [9] R. Nath and R. L. Motard, "Evolutionary synthesis of separation processes," *AIChE J.*, vol. 27, no. 4, pp. 578–587, 1981.
- [10] A. K. Modi and A. W. Westerberg, "Distillation Column Sequencing Using Marginal Price," *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 31, no. 3, pp. 839–848, 1992.
- [11] G. Sobocan and P. Glavic, "Heuristic rules in the studies of thermally integrated distillation sequences," *Bull. Chem. Technol. Maced.*, vol. 18, pp. 117–226, 1999.
- [12] D. W. Tedder and D. F. Rudd, "Parametric studies in industrial distillation: Part II. Heuristic optimization," *AIChE J.*, vol. 24, no. 2, pp. 316–323, 1978.
- [13] S. M. Walas, "Chemical Process Equipment: Selection and Design," *Butterworths Ser. Chem. Eng.*, p. 774, 1990.
- [14] J. M. Douglas, *Conceptual design of chemical processes*. 1988.

- [15] A. A. Kiss, S. J. Flores Landaeta, and C. A. Infante Ferreira, "Mastering Heat Pumps Selection for Energy Efficient Distillation," *Chem. Eng. Trans.*, vol. 29, pp. 397–402, 2012.
- [16] J. A. Caballero and I. E. Grossmann, "Design of distillation sequences: From conventional to fully thermally coupled distillation systems," *Comput. Chem. Eng.*, vol. 28, no. 11, pp. 2307–2329, 2004.
- [17] A. A. Kiss, S. J. Flores Landaeta, and C. A. Infante Ferreira, "Towards energy efficient distillation technologies - Making the right choice," *Energy*, vol. 47, no. 1, pp. 531–542, 2012.
- [18] M. Nakaiwa, K. Huang, a. Endo, T. Ohmori, T. Akiya, and T. Takamatsu, "Internally Heat-Integrated Distillation Columns: A Review," *Chem. Eng. Res. Des.*, vol. 81, no. January, pp. 162–177, 2003.
- [19] A. K. Jana, "Heat integrated distillation operation," *Applied Energy*, vol. 87, no. 5. pp. 1477–1494, 2010.
- [20] A. A. Kiss and C. S. Bildea, "A control perspective on process intensification in dividing-wall columns," *Chem. Eng. Process. Process Intensif.*, vol. 50, no. 3, pp. 281–292, 2011.
- [21] E. A. Wolff and S. Skogestad, "Operation of Integrated Three-Product (Petlyuk) Distillation Columns," *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 34, no. 6, pp. 2094–2103, 1995.
- [22] N. Asprion and G. Kaibel, "Dividing wall columns: Fundamentals and recent advances," *Chem. Eng. Process. Process Intensif.*, vol. 49, no. 2, pp. 139–146, 2010.
- [23] R. O. Wright, "Fractionation apparatus," *Stand. Oil Dev Co*, vol. 7, no. 11, 1949.
- [24] G. P. Rangaiah, E. L. Ooi, and R. Premkumar, "A Simplified Procedure for Quick Design of Dividing-Wall Columns for Industrial Applications," *Chem. Prod. Process Model.*, vol. 4, no. 1, 2009.
- [25] G. Parkinson, "Dividing-Wall Columns Find Great Appeal," *Chem. Eng. Prog.*, vol. 103, no. 5, pp. 8–11, 2007.
- [26] Ž. Olujić, M. Jödecke, A. Shilkin, G. Schuch, and B. Kaibel, "Equipment improvement trends in distillation," *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, vol. 48, no. 6. pp. 1089–1104, 2009.
- [27] M. A. Schultz, D. E. O'Brien, R. K. Hoehn, C. P. Luebke, and D. G. Stewart, "Innovative

- flowschemes using dividing wall columns,” *Comput. Aided Chem. Eng.*, vol. 21, no. C, pp. 695–700, 2006.
- [28] D. A. MONRO, “Fractionating apparatus and method of fractionation,” 2134882, 1935.
- [29] B. Kaibel, H. Jansen, E. Zich, and Z. Olujić, “Unfixed dividing wall technology for packed and tray distillation columns,” *Distill. Absorpt. Symp.*, vol. 15, pp. 252–266, 2006.
- [30] J. Strandberg and S. Skogestad, “Stabilizing operation of a 4-product integrated Kaibel column,” *ICHEME Symp. Ser.*, vol. 152, pp. 638–647, 2006.
- [31] R. Agrawal, “Processes for multicomponent separation,” 6286335, 2001.
- [32] I. Dejanovića, I. J. Halvorsen, S. Skogestad, H. Jansen, and Ž. Olujić, “Cost-effective design of energy efficient four-product dividing wall columns,” *Chem. Eng. Trans.*, vol. 35, pp. 283–288, 2013.
- [33] M. K. Kattan and P. L. Douglas, “A new approach to thermal integration of distillation sequences,” *Can. J. Chem. Eng.*, vol. 64, no. 1, pp. 162–170, 1986.
- [34] S. Jain, R. Smith, and J. K. Kim, “Synthesis of heat-integrated distillation sequence systems,” *J. Taiwan Inst. Chem. Eng.*, vol. 43, no. 4, pp. 525–534, 2012.
- [35] N. Nishida, G. Stephanopoulos, and A. W. Westerberg, “A review of process synthesis,” *AIChE J.*, vol. 27, no. 3, pp. 321–351, 1981.
- [36] J. E. Hendry, D. F. Rudd, and J. D. Seader, “Synthesis in the design of chemical processes,” *AIChE J.*, vol. 19, no. 1, pp. 1–15, 1973.
- [37] Y. Demirel, “Thermodynamic Analysis of Separation Systems,” *Sep. Sci. Technol.*, vol. 39, no. 16, pp. 3897–3942, 2004.
- [38] R. L. Cornelissen, “Thermodynamics and sustainable development: The Use of Exergy Analysis and the Reduction of irreversibility,” 1997.
- [39] D. Major, “Komponens szétválasztó rendszerek energetikai elemzése,” 2013.
- [40] E. I. Santana and R. J. Zemp, “Thermodynamic analysis of a crude-oil fractionating process,” *2nd Mercosur Congr. Chem. Eng.*, pp. 523–528, 2001.
- [41] S. Bandyopadhyay, R. K. Malik, and U. V. Shenoy, “Temperature-enthalpy curve for energy targeting of distillation columns,” *Comput. Chem. Eng.*, vol. 22, no. 12, pp. 1733–1744, 1998.

- [42] V. R. Dhole and B. Linnhoff, "Distillation column targets," *Comput. Chem. Eng.*, vol. 17, no. 5–6, pp. 549–560, 1993.
- [43] W. Pejpichestakul and K. Siemanond, "Process heat integration between distillation columns for ethylene hydration process," *Chem. Eng. Trans.*, vol. 35, pp. 181–186, 2013.
- [44] D. Napredakul, K. Siemanond, T. Sornchamni, and S. Laorrattanasak, "Retrofit for a Gas Separation Plant by Pinch Technology," *Chem. Eng. Trans.*, vol. 12, pp. 49–54, 2007.
- [45] L. March, "Introduction to Pinch Technology," *New Des.*, p. 63, 1998.
- [46] J. A. Caballero and I. E. Grossmann, "Optimal synthesis of thermally coupled distillation sequences using a novel MILP approach," *Comput. Chem. Eng.*, vol. 61, pp. 118–135, 2014.
- [47] A. Stankiewicz, "Reactive separations for process intensification: An industrial perspective," *Chem. Eng. Process.*, vol. 42, no. 3, pp. 137–144, 2003.
- [48] C. P. Almeida-Rivera, P. L. J. Swinkels, and J. Grievink, "Designing reactive distillation processes: present and future," *Comput. Chem. Eng.*, vol. 28, no. 10, pp. 1997–2020, 2004.
- [49] G. J. Harmsen, "Reactive distillation: The front-runner of industrial process intensification A full review of commercial applications, research, scale-up, design and operation," *Chem. Eng. Process. Process Intensif.*, vol. 46, no. 9, pp. 774–780, 2007.
- [50] J. Riggs, "Distillation: Introduction to Control." [Online]. Available: <http://controlguru.com/distillation-introduction-to-control/>.
- [51] J. Riggs, "Distillation: Major Disturbances & First-Level Control." [Online]. Available: <http://controlguru.com/distillation-major-disturbances-first-level-control/>.
- [52] P. S. Buckley, *Techniques of Process Control*. London: Wiley, 1964.
- [53] N. Bakhtadze, E. Sakrutina, and V. Pyatetsky, "Predicting Oil Product Properties with Intelligent Soft Sensors," *IFAC-PapersOnLine*, vol. 50, no. 1, pp. 14632–14637, 2017.
- [54] E. S. Hori and S. Skogestad, "Selection of Control Structure and Temperature Location for Two-Product Distillation Columns," *Chem. Eng. Res. Des.*, vol. 85, no. 3, pp. 293–306, 2007.
- [55] W. L. Luyben, "Evaluation of criteria for selecting temperature control trays in distillation columns," *J. Process Control*, vol. 16, no. 2, pp. 155–134, 2006.

- [56] B. Bidar, M. M. Khalilipour, F. Shahraki, and J. Sadeghi, "A data-driven soft-sensor for monitoring ASTM-D86 of CDU side products using local instrumental variable (LIV) technique," *J. Taiwan Inst. Chem. Eng.*, vol. 84, pp. 49–59, 2018.
- [57] J. Riggs, "Distillation: Inferential Temperature Control & Single-Ended Control." [Online]. Available: <http://controlguru.com/distillation-inferential-temperature-control-single-ended-control/>.
- [58] H. Z. Kister, *Distillation Operation*. 1990.
- [59] S. Skogestad, P. Lundström, and E. W. Jacobsen, "Selecting the best distillation control configuration," *AIChE J.*, vol. 36, no. 5, pp. 753–764, 1990.
- [60] M. J. Willis, "Selecting a distillation column control strategy," 2000.
- [61] J. Riggs, *Distillation: Dual Composition Control & Constraint Control*. .
- [62] S. Skogestad and M. Morari, "The dominant time constant for distillation columns," *Comput. Chem. Eng.*, vol. 11, no. 6, pp. 607–617, 1987.
- [63] S. J. Benz and N. J. Scenna, "An Extensive Analysis on the Start-up of a Simple Distillation Column with Multiple Steady States," *Can. J. Chem. Eng.*, vol. 80, no. 5, pp. 865–881, 2008.
- [64] J. Garrido, F. Vázquez, and F. Morilla, "Multivariable PID control by inverted decoupling: Application to the Benchmark PID 2012," in *IFAC Proceedings Volumes (IFAC-PapersOnline)*, 2012, vol. 2, no. PART 1, pp. 352–357.
- [65] T. T. T. L. D. T. M. I. A. M. A. F. M. Abdallah, "Control of depropanizer in dynamic Hysys simulation using MPC in Matlab-Simulink," *Procedia Eng.*, vol. 148, pp. 1104–1111, 2016.
- [66] J. Drgoňa, M. Klaučo, F. Janeček, and M. Kvasnica, "Optimal control of a laboratory binary distillation column via regionless explicit MPC," *Comput. Chem. Eng.*, vol. 96, pp. 139–148, 2017.
- [67] E. G. Nabati and S. Engell, "Online Adaptive Robust Tuning of PID Parameters," *IFAC Proc. Vol.*, vol. 45, no. 3, pp. 625–630, 2012.
- [68] A. Raimondi, A. Favela-Contreras, F. Beltrán-Carbajal, A. Piñón-Rubio, and J. Luis de la Peña-Elizondo, "Design of an adaptive predictive control strategy for crude oil atmospheric distillation process," *Control Eng. Pract.*, vol. 34, pp. 39–48, 2015.

- [69] S. Ramdharee, E. Muzenda, and M. Belaid, "A review of the equations of state and their applicability in phase equilibrium modeling," in *International Conference on Chemical and Environmental Engineering (ICCEE 2013)*, 2013, pp. 84–87.
- [70] T. Gál, "Pirólizáló kemence matematikai modellezése és számítógépes szimulációja," University of Pannonia, 2006.
- [71] B. Lipták, *Distillation Control & Optimization*. .
- [72] S. Skogestad, "Plantwide control: The search for the self-optimizing control structure," *J. Process Control*, vol. 10, no. 5, pp. 487–507, 2000.
- [73] J. G. Ziegler and N. B. Nichols, "Optimum settings for automatic controllers," *InTech*, vol. 42, no. 6, pp. 94–100, 1995.
- [74] A. Seshagiri Rao, V. S. R. Rao, and M. Chidambaram, "Direct synthesis-based controller design for integrating processes with time delay," *J. Franklin Inst.*, vol. 346, no. 1, pp. 38–56, 2009.
- [75] S. Skogestad, "Dynamics and Control of Distillation Columns: A tutorial introduction," *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 75, no. 6, pp. 539–562, 1997.
- [76] Honeywell, *Application Module Algorithm Engineering Data*. .
- [77] AspenTech, *Aspen HYSYS Unit Operations Reference Guide*. .
- [78] É. Hornyák, G. Mucsina, L. Szabó, and T. Komróczki, "Improving process safety and operation efficiency of MOL DS Production via effective use of PI and Opralog systems," *MOL Gr. Prof. J.*, pp. 82–93, 2016.
- [79] Willam Luyben, "Process Modeling, Simulation and Control for Chemical Engineers," *Pet. Refin. Eng.*, vol. 2, no. 1, pp. 289–290, 1996.
- [80] "Utilities," 2010. [Online]. Available: <http://www4.ncsu.edu/~ojrojas/WPS416/Utilities.pdf> .

8. Mellékletek

1. Melléklet: Osztott terű kolonna folyadék fázis benzol koncentrációprofil (ld. 23. ábra)

Tányér	Rektifikáló, kiforráló, oldalelvét zóna [m/m]	Betáplálási zóna [m/m]
1	0,99	
2	0,975113	
3	0,943147	
4	0,878695	
5	0,763855	
6	0,598238	
7	0,419307	
8	0,275671	0,275671
9	0,130723	0,241988
10	0,060024	0,219955
11	0,028792	0,204747
12	0,015544	0,190951
13	0,009995	0,162778
14	0,007633	0,105711
15	0,006755	0,063705
16	0,006276	0,03515
17	0,005835	0,016699
18	0,005347	0,005347
19	0,001938	
20	0,000609	
21	0,000167	
22	4,17E-05	
23	9,80E-06	
24	2,23E-06	
25	4,92E-07	

2. Melléklet: Osztott terű kolonna folyadék fázis toluol koncentrációprofil (ld.24. ábra)

Tányér	Rektifikáló, kiforráló, oldalelvét zóna [m/m]	Betáplálási zóna [m/m]
1	0,01	
2	0,024887	
3	0,056853	
4	0,121304	
5	0,236139	
6	0,401733	
7	0,580567	
8	0,723877	0,723877
9	0,8685	0,755843
10	0,93841	0,772365
11	0,967726	0,770507
12	0,976344	0,734907
13	0,970846	0,652029
14	0,947573	0,705013
15	0,904328	0,739866
16	0,835225	0,751028
17	0,73937	0,723973
18	0,627343	0,627343
19	0,475072	
20	0,310086	
21	0,177335	
22	0,092401	
23	0,045464	
24	0,021557	
25	0,009877	

3. Melléklet: Osztott terű kolonna folyadék fázis xilol koncentrációprofil (ld. 25. ábra)

Tányér	Rektifikáló, kiforráló, oldalelvét zóna [m/m]	Betáplálási zóna [m/m]
1	2,05E-09	
2	1,71E-08	
3	1,26E-07	
4	8,68E-07	
5	5,43E-06	
6	2,89E-05	
7	0,000126	
8	0,000452	0,000452
9	0,000777	0,002169
10	0,001566	0,00768
11	0,003483	0,024746
12	0,008112	0,074142
13	0,019159	0,185194
14	0,044794	0,189276
15	0,088917	0,196429
16	0,158499	0,213822
17	0,254794	0,259328
18	0,367311	0,367311
19	0,522991	
20	0,689305	
21	0,822497	
22	0,907557	
23	0,954527	
24	0,978441	
25	0,990123	

4. Melléklet: Osztott terű kolonna hőmérséklet profil (ld. 26. ábra)

Tányér	Rektifikáló, kiforráló, oldalelvét zóna [°C]	Betáplálási zóna [°C]
1	82,98868	
2	83,48514	
3	84,28629	
4	85,71018	
5	88,25211	
6	92,33526	
7	97,63211	
8	102,8375	102,8375
9	109,1364	104,4126
10	112,7903	105,6237
11	114,6692	106,7471
12	115,6993	108,3306
13	116,4547	111,7161
14	117,3361	114,9394
15	118,5347	117,6119
16	120,3102	119,864
17	122,8261	122,2666
18	125,9982	125,9982
19	131,0894	
20	137,34	
21	143,3047	
22	147,7656	
23	150,5698	
24	152,1903	
25	153,1264	

5. Melléklet: Osztófal hőátadásának hatása a kiforráló energiaszükségletére (ld. 27. ábra)

Fal hőátadás [W/K]	Kiforráló hőszükséglet [Watt]
0	36096,5
100	36098,59
200	36225,41
250	36252,17
300	36113,51
400	36115,12
500	36107,7

6. Melléklet: Osztófal méretének és az összetétel hatása (ld. 28. ábra, 29. ábra)

Tányérszám	Kiforráló hőszükséglet [kW]			
	A elegy	B elegy	C elegy	D elegy
5	79	95	84,5	53,5
7	40	44	39,7	29
9	37	42	37	27
11	42	53	41,5	28,5
13	52	60	52	34,5

7. Melléklet: Osztófal pozíció és az összetétel hatása (ld. 30. ábra, 31. ábra)

Pozíció	Kiforráló hőszükséglet [kW]			
	A elegy	B elegy	C elegy	D elegy
3	58	62	62	47
2	42	45	43	32,8
1	37	40	37	27,8
0	37	42	37	27
-1	44	50	43	32
-2	67,5	66	56,9	38
-3	92	102	87	55

8. Melléklet: A keresztmetszetarány és az összetétel hatása (ld. 32. ábra, 33. ábra)

Elvételi rész/Teljes keresztmetszet [%]	Kiforráló hőszükséglet [kW]			
	A elegy	B elegy	C elegy	D elegy
10	84,5	115	85	63
20	54,8	70	55	41
30	45	55	45	34
40	40	48	40	29
50	37	42	37	27
60	37,5	40	35,5	27,5
70	40,5	40	36,5	30
80	48,5	44	41	34
90	64,5	54,5	50,9	43

9. Melléklet: Oldalelvételes és osztott terű kolonna kiforrálóinak energiaszükséglete (ld. 34. ábra)

Betáplálás [kg/h]	Kiforráló hőszükséglet [kW]	
	Osztott terű kolonna	Oldalelvételes kolonna
50	18	50,58628
70	23,5	70,82228
90	30	91,04405
110	37	111,3304
130	44	131,5635
150	51	151,7412
200	67	202,4771
300	101	303,5091

10. Melléklet: A pirogáz összetétel és forráspont különbség diagramja (ld. 35. ábra)

Komponens sorszám	Komponens név (Aspen adatbázis)	Formula	Betáplálási koncentráció [kg/kg]	Forráspont különbség [Δ°C]
1	HYDROGEN	H2	0,010325	55,0
2	CARBON-MONOXIDE	CO	0,000675	28,5
3	METHANE	CH4	0,1861	57,6
4	ETHYLENE	C2H4	0,320303	15,3
5	ETHANE	C2H6	0,035175	40,7
6	PROPYLENE	C3H6-2	0,254381	5,7
7	PROPANE	C3H8	0,006042	5,8
8	PROPADIENE	C3H4-1	0,007813	12,9
9	METHYL-ACETYLENE	C3H4-2	0,00486	11,9
10	ISOBUTANE	C4H10-2	0,004724	5,3
11	1-BUTENE	C4H8-1	0,022962	2,0
12	1,3-BUTADIENE	C4H6-4	0,056986	3,9
13	N-BUTANE	C4H10-1	0,028618	1,6
14	TRANS-2-BUTENE	C4H8-3	0,004088	2,4
15	CIS-2-BUTENE	C4H8-2	0,004543	6,2
16	1,2-BUTADIENE	C4H6-3	0,00714	12,7
17	1,4-PENTADIENE	C5H8-4	0,002321	4,7
18	2-METHYL-BUTANE	C5H12-2	0,000495	3,8
19	2-METHYL-1-BUTENE	C5H10-5	0,001762	1,8
20	2-METHYL-1,3-BUTADIENE	C5H8-6	0,005465	3,6
21	N-PENTANE	C5H12-1	0,002453	0,1
22	TRANS-2-PENTENE	C5H10-4	0,000418	0,4
23	CIS-2-PENTENE	C5H10-3	0,0002	2,0
24	2-METHYL-2-BUTENE	C5H10-6	0,00233	0,2
25	1-TRANS-3-PENTADIENE	C5H8-3	0,001722	2,8
26	CIS-1,3-PENTADIENE	C5H8	0,001494	2,9
27	CYCLOPENTENE	C5H8-1	0,000268	4,3
28	CYCLOPENTANE	C5H10-1	0,000672	11,5
29	2-METHYL-PENTANE	C6H14-2	0,000372	19,5
30	BENZENE	C6H6	0,007849	9,8
31	2-METHYLHEXANE	C7H16-2	0,0021	1,8
32	3-METHYLHEXANE	C7H16-3	0,002	6,7
33	N-HEPTANE	C7H16-1	0,00325	13,7
34	TOLUENE	C7H8	0,0065	6,9
35	3-METHYLHEPTANE	C8H18-3	0,001694	6,9
36	N-OCTANE	C8H18-1	0,0019	

11. Melléklet: Ökol szabályokkal megalkotott szétválasztórendszer betáplálási koncentrációi

Komponens	Betáplálási koncentráció [kg/kg]							
	1.	2.	3.	4.	5.	6.	7.	8.
1	0,010325	0,012656	1,51E-09	2,61E-09	4,56E-24	1,18E-18	0	0
2	0,000675	0,000827	1,71E-07	2,97E-07	4,11E-18	1,78E-16	0	0
3	0,1861	0,228123	0,003015	0,005226	4,39E-11	3,42E-11	4,54E-11	3,06E-21
4	0,320303	0,392629	0,513648	0,889847	0,000807	1,09E-06	1,44E-06	9,72E-17
5	0,035175	0,043117	0,056977	0,097785	0,001346	2,13E-06	2,83E-06	1,02E-38
6	0,254381	0,308704	0,407934	0,007072	0,954398	0,013809	0,018314	9,91E-23
7	0,006042	0,00686	0,009065	5,49E-05	0,021348	0,00242	0,00321	3,18E-22
8	0,007813	0,006385	0,008438	1,55E-05	0,019919	0,014135	0,018747	7,84E-19
9	0,00486	0	0	0	0	0,026383	0,03499	8,96E-16
10	0,004724	0	0	0	0	0,025645	0,034011	3,37E-11
11	0,022962	0	0	0	0	0,124651	0,165317	1,37E-08
12	0,056986	0,000699	0,000923	0	0,002181	0,30626	0,406173	1,17E-07
13	0,028618	0	0	0	0	0,155355	0,206038	5,43E-07
14	0,004088	0	0	0	0	0,022192	0,029432	9,73E-07
15	0,004543	0	0	0	0	0,024662	0,032705	7,62E-06
16	0,00714	0	0	0	0	0,03876	0,050891	0,001576
17	0,002321	0	0	0	0	0,0126	0,000167	0,050709
18	0,000495	0	0	0	0	0,002687	5,5E-07	0,010922
19	0,001762	0	0	0	0	0,009565	1,09E-08	0,038885
20	0,005465	0	0	0	0	0,029667	0	0,120604
21	0,002453	0	0	0	0	0,013316	0	0,054134
22	0,000418	0	0	0	0	0,002269	0	0,009225
23	0,0002	0	0	0	0	0,001086	0	0,004414
24	0,00233	0	0	0	0	0,012649	0	0,05142
25	0,001722	0	0	0	0	0,009348	0	0,038002
26	0,001494	0	0	0	0	0,00811	0	0,03297
27	0,000268	0	0	0	0	0,001455	0	0,005914
28	0,000672	0	0	0	0	0,003648	0	0,01483
29	0,000372	0	0	0	0	0,002019	0	0,008209
30	0,007849	0	0	0	0	0,042609	0	0,173215
31	0,0021	0	0	0	0	0,0114	0	0,046344
32	0,002	0	0	0	0	0,010857	0	0,044137
33	0,00325	0	0	0	0	0,017643	0	0,071723
34	0,0065	0	0	0	0	0,035286	0	0,143445
35	0,001694	0	0	0	0	0,009196	0	0,037384
36	0,0019	0	0	0	0	0,010314	0	0,04193

12. Melléklet: Ökölszabályokkal megalkotott szétválasztórendszer fejtermék koncentrációi

Komponens	Fejtermék koncentráció [kg/kg]							
	1.	2.	3.	4.	5.	6.	7.	8.
1	0,012656	0,05203	2,61E-09	2,94E-09	0	0	0	0
2	0,000827	0,003401	2,97E-07	3,35E-07	0	0	0	0
3	0,228123	0,928428	0,005226	0,005891	4,63E-11	4,54E-11	6,03E-10	0
4	0,392629	0,016141	0,889847	0,993007	0,000852	1,44E-06	1,92E-05	0
5	0,043117	0	0,097785	0,001102	0,001422	2,83E-06	3,75E-05	0
6	0,308704	0	0,007072	0	0,997501	0,018314	0,243168	0
7	0,00686	0	5,49E-05	0	0,000225	0,00321	0,042614	0
8	0,006385	0	1,55E-05	0	0	0,018747	0,248908	0
9	0	0	0	0	0	0,03499	0,459932	0
10	0	0	0	0	0	0,034011	0,004516	7,61E-11
11	0	0	0	0	0	0,165317	0,00046	3,08E-08
12	0,000699	0	0	0	0	0,406173	0,000319	2,64E-07
13	0	0	0	0	0	0,206038	2,43E-05	1,22E-06
14	0	0	0	0	0	0,029432	0	2,2E-06
15	0	0	0	0	0	0,032705	0	1,72E-05
16	0	0	0	0	0	0,050891	0	0,003553
17	0	0	0	0	0	0,000167	0	0,114345
18	0	0	0	0	0	5,5E-07	0	0,024629
19	0	0	0	0	0	1,09E-08	0	0,087682
20	0	0	0	0	0	0	0	0,271954
21	0	0	0	0	0	0	0	0,122068
22	0	0	0	0	0	0	0	0,020801
23	0	0	0	0	0	0	0	0,009953
24	0	0	0	0	0	0	0	0,115947
25	0	0	0	0	0	0	0	0,085692
26	0	0	0	0	0	0	0	0,074346
27	0	0	0	0	0	0	0	0,013336
28	0	0	0	0	0	0	0	0,03344
29	0	0	0	0	0	0	0	0,018327
30	0	0	0	0	0	0	0	0,003906
31	0	0	0	0	0	0	0	8,22E-07
32	0	0	0	0	0	0	0	3,11E-07
33	0	0	0	0	0	0	0	2,19E-07
34	0	0	0	0	0	0	0	4,28E-07
35	0	0	0	0	0	0	0	1,12E-07
36	0	0	0	0	0	0	0	2,51E-07

13. Melléklet: Ökölszabályokkal megalkotott szétválasztórendszer fenéktermék koncentrációi

Komponens	Fenéktermék koncentráció [kg/kg]							
	1.	2.	3.	4.	5.	6.	7.	8.
1	1,18E-18	1,51E-09	4,56E-24	2,7E-19	0	0	0	0
2	1,78E-16	1,71E-07	4,11E-18	1,43E-31	0	0	0	0
3	3,42E-11	0,003015	4,39E-11	5,55E-19	4,59E-21	3,06E-21	4,42E-20	0
4	1,09E-06	0,513648	0,000807	0,078854	8,44E-14	9,72E-17	9,06E-30	0
5	2,13E-06	0,056977	0,001346	0,857856	1,41E-13	1,02E-38	4,35E-25	0
6	0,013809	0,407934	0,954398	0,062666	0,180829	9,91E-23	7,66E-11	0
7	0,00242	0,009065	0,021348	0,000486	0,400427	3,18E-22	5,4E-11	0
8	0,014135	0,008438	0,019919	0,000138	0,377412	7,84E-19	3,49E-07	0
9	0,026383	0	0	0	0	8,96E-16	0,000378	0
10	0,025645	0	0	0	0	3,37E-11	0,036413	6,77E-29
11	0,124651	0	0	0	0	1,37E-08	0,178745	5E-25
12	0,30626	0,000923	0,002181	0	0,041332	1,17E-07	0,43923	1,11E-23
13	0,155355	0	0	0	0	5,43E-07	0,222818	2,44E-22
14	0,022192	0	0	0	0	9,73E-07	0,031829	9,96E-22
15	0,024662	0	0	0	0	7,62E-06	0,035369	3,54E-20
16	0,03876	0	0	0	0	0,001576	0,055036	3,09E-16
17	0,0126	0	0	0	0	0,050709	0,000181	1,94E-11
18	0,002687	0	0	0	0	0,010922	5,94E-07	5,63E-12
19	0,009565	0	0	0	0	0,038885	1,18E-08	1,42E-10
20	0,029667	0	0	0	0	0,120604	0	3,43E-09
21	0,013316	0	0	0	0	0,054134	0	1,32E-09
22	0,002269	0	0	0	0	0,009225	0	7,22E-10
23	0,001086	0	0	0	0	0,004414	0	4,41E-10
24	0,012649	0	0	0	0	0,05142	0	9,21E-09
25	0,009348	0	0	0	0	0,038002	0	4,14E-08
26	0,00811	0	0	0	0	0,03297	0	1,14E-07
27	0,001455	0	0	0	0	0,005914	0	1,91E-08
28	0,003648	0	0	0	0	0,01483	0	8,76E-07
29	0,002019	0	0	0	0	0,008209	0	0,000148
30	0,042609	0	0	0	0	0,173215	0	0,308131
31	0,0114	0	0	0	0	0,046344	0	0,083272
32	0,010857	0	0	0	0	0,044137	0	0,079308
33	0,017643	0	0	0	0	0,071723	0	0,128875
34	0,035286	0	0	0	0	0,143445	0	0,25775
35	0,009196	0	0	0	0	0,037384	0	0,067174
36	0,010314	0	0	0	0	0,04193	0	0,075342

14. Melléklet: Melegenergia ára a hőmérséklet függvényében [80] (ld. 45. ábra)

Hőmérséklet (°C)	Meleg energia költség (\$/MJ)
-180	1,66667E-06
20	1,66667E-06
20	0,00778
150	0,00778
150	0,00822
174	0,00822
174	0,00983
244	0,00983

15. Melléklet: Hidegenergia ára a hőmérséklet függvényében [80] (ld. 46. ábra)

Hőmérséklet (°C)	Hideg energia költség (\$/MJ)	
	1. eset	2. eset
-190	0,915407862	0,305136
-137	0,915407862	0,305136
-137	0,028952828	0,028953
-79	0,028952828	0,028953
-79	0,011370241	0,01137
45	0,011370241	0,01137
45	0,000354	0,000354
180	0,000354	0,000354

16. Melléklet: Optimális nyomás meghatározása az A12 struktúra 5. szeparációja esetén (ld. 48. ábra)

Szétválasztás nyomása [bar]	Szétválasztás költsége [\$/h]
1	151,7546
3,052632	67,37376
5,105263	71,91121
7,157895	76,08302
9,210526	80,14079
11,26316	171,9613
13,31579	181,1334
15,36842	190,1553
17,42105	199,1981
19,47368	208,4302
21,52632	218,0186
23,57895	228,1556
25,63158	239,0724
27,68421	251,0756
29,73684	264,6934
31,78947	280,5895
33,84211	299,7803
35,89474	324,1023
37,94737	357,1043
40	406,575

17. Melléklet: Szabályozott jellemzők kiválasztása (53. ábra)

Tányérszám	Hőmérséklet [°C]
1	107,494
2	107,572
3	107,646
4	107,723
5	107,804
6	107,89
7	107,981
8	108,08
9	108,186
10	108,303
11	108,433
12	108,58
13	108,75
14	108,95
15	109,192
16	109,495
17	109,885
18	110,405
19	111,128
20	112,171
21	113,717
22	115,98
23	118,666
24	122,99
25	128,451
26	133,379
27	137,137

18. Melléklet: Különböző üzemi tartományok hőmérséklet profiljai (ld. 54. ábra)

Tányérszám	1. karakterisztika	2. karakterisztika
1	113,6636	107,527
2	117,4438	107,613
3	121,6013	107,697
4	125,0385	107,787
5	127,2543	107,882
6	128,4771	107,984
7	129,1091	108,094
8	129,4383	108,215
9	129,623	108,35
10	129,7407	108,502
11	129,8279	108,677
12	129,9013	108,883
13	129,9679	109,129
14	130,0321	109,434
15	130,0961	109,825
16	130,1607	110,343
17	130,226	111,055
18	130,2918	112,07
19	130,3578	113,549
20	130,4238	115,682
21	130,4897	118,536
22	130,6527	121,841
23	135,0182	127,037
24	137,4619	132,13
25	138,6333	135,745
26	139,1731	137,776
27	139,9563	139,273

19. Melléklet: Hiszterézis jelensége (ld. 56. ábra)

Gőz tömegáram [kg/h]	27. tányér hőmérséklet [°C]	
	Felfelé léptetés	Lefelé léptetés
1620	1620,0	
2650	138,9	138,9
2652	138,9	138,9
2654	139,0	139,0
2656	139,1	139,1
2658	139,2	139,2
2660	139,3	139,3
2662	139,4	139,9
2664	139,5	139,9
2666	139,6	139,9
2668	139,7	139,9
2670	139,9	139,9
2672	139,9	139,9
2674	139,9	139,9
2676	139,9	139,9
2678	139,9	139,9
2680	139,9	139,9
2682	139,9	139,9
2684	139,9	139,9
2686	139,9	139,9
2688	140,0	140,0
2690	140,0	140,0
2692	140,0	140,0
2694	140,0	140,0
2696	140,0	140,0
2698	140,0	140,0
2700	140,0	140,0

20. Melléklet: Nem lineáris rendszer viselkedés (ld. 70. ábra)

Reflux [kg/h]	Erősítési tényező [%/%]
1620	-1,185947882
1630	-0,898411848
1640	-0,709235448
1650	-0,584816656
1660	-0,487571399
1670	-0,418841853
1680	-0,367657584
1690	-0,329936838
1700	-0,287960267
1710	-0,259860813
1720	-0,239033763
1730	-0,229999546
1740	-0,202190942
1750	-0,189366747

21. Melléklet: Erősítési tényező a reflux és a gőz tömegáram függvényében (ld. 73. ábra)

TC1 Erősítési tényező [%/%]									
Reflux [kg/h]	Gőz tömegáram								
	2470	2520	2570	2620	2670	2720	2770	2820	2870
	kg/h	kg/h	kg/h	kg/h	kg/h	kg/h	kg/h	kg/h	kg/h
1495	-3,137								
1505	-1,934								
1515	-1,339	-16,057							
1525	-0,997	-5,373							
1535	-0,781	-2,817							
1545	-0,635	-1,782							
1555	-0,531	-1,252	-12,230						
1565	-0,453	-0,942	-4,642						
1575	-0,395	-0,743	-2,545						
1585	-0,350	-0,607	-1,648						
1595	-0,314	-0,509	-1,174	-9,669					
1605	-0,280	-0,437	-0,892	-4,054					
1615	-0,257	-0,381	-0,708	-2,311					
1625	-0,241	-0,337	-0,581	-1,528					
1635	-0,229	-0,297	-0,489	-1,103	-7,920				
1645	-0,225	-0,270	-0,421	-0,845	-3,589				
1655	-0,226	-0,248	-0,364	-0,677	-2,115				
1665	-0,231	-0,231	-0,321	-0,555	-1,424				
1675		-0,219	-0,288	-0,466	-1,041	-6,928			
1685		-0,213	-0,262	-0,402	-0,804	-3,294			
1695		-0,214	-0,240	-0,352	-0,646	-1,984			
1705		-0,219	-0,223	-0,313	-0,534	-1,355			
1715			-0,209	-0,281	-0,453	-0,997	-6,086		
1725			-0,196	-0,255	-0,392	-0,774	-3,026		
1735			-0,198	-0,233	-0,343	-0,624	-1,862		
1745			-0,215	-0,216	-0,305	-0,518	-1,286		
1755			-0,219	-0,196	-0,274	-0,441	-0,955	-5,376	
1765			-0,281	-0,187	-0,248	-0,381	-0,746	-2,785	
1775				-0,183	-0,228	-0,335	-0,605	-1,749	
1785				-0,191	-0,204	-0,298	-0,503	-1,222	
1795				-0,219	-0,191	-0,268	-0,429	-0,915	-4,896
1805				-0,288	-0,180	-0,244	-0,372	-0,719	-2,611
1815					-0,174	-0,216	-0,327	-0,584	-1,664
1825					-0,176	-0,200	-0,291	-0,490	-1,173
1835					-0,190	-0,186	-0,260	-0,417	-0,884
1845					-0,250	-0,175	-0,233	-0,358	-0,697
1855						-0,166	-0,214	-0,316	-0,569
1865						-0,157	-0,197	-0,282	-0,476
1875						-0,162	-0,183	-0,254	-0,407
1885						-0,223	-0,172	-0,231	-0,354

22. Melléklet: Benzínfrakcionáló kolonna betáplálásainak összetétele

	Könnyű alapanyag	Nehéz alapanyag		Könnyű alapanyag	Nehéz alapanyag
	m/m	m/m		m/m	m/m
n-Octane	0,015	0,070	35-Mheptane	0,001	0,000
n-Heptane	0,059	0,047	22-Mbutane	0,001	0,000
n-Nonane	0,002	0,060	22-Mpentane	0,000	0,000
n-Pentane	0,176	0,010	n-Pcyhexane	0,001	0,049
n-Hexane	0,096	0,031	Mcyclohexane	0,031	0,045
n-Decane	0,000	0,029	n-Bcyhexane	0,002	0,045
n-Butane	0,069	0,000	1Mcycpentene	0,043	0,019
i-Pentane	0,123	0,003	Cyclohexane	0,023	0,017
2-Mpentane	0,061	0,014	nBCC5	0,000	0,021
2-Mheptane	0,013	0,026	Ecyclohexane	0,002	0,019
3-Mhexane	0,028	0,018	1-tr2-MCC5	0,015	0,012
3-Mpentane	0,038	0,010	1-tr4-MCC6	0,005	0,013
2-Mhexane	0,020	0,012	1ci2ci3-MCC5	0,004	0,010
3-Moctane	0,001	0,017	Ecylopentan	0,006	0,009
3-Mheptane	0,007	0,015	1-tr3-MCC5	0,010	0,007
26-Mheptane	0,002	0,016	1M-tr2-ECC5	0,000	0,010
26-Moctane	0,000	0,015	1-ci3-MCC5	0,008	0,006
4-Moctane	0,001	0,013	Cyclopentane	0,017	0,003
2-Moctane	0,000	0,012	1-tr2-MCC6	0,002	0,007
25-Mheptane	0,000	0,010	1tr2ci3-MCC5	0,005	0,006
5-Mnonane	0,000	0,009	i-Pcyhexane	0,000	0,007
35-Moctane	0,000	0,009	1tr2ci4-MCC5	0,003	0,005
4-Mnonane	0,000	0,009	1M-tr3-ECC5	0,002	0,005
4-Mheptane	0,004	0,007	1ci2tr3-MCC5	0,002	0,004
23-Mpentane	0,008	0,006	1M-ci3-ECC5	0,001	0,004
3-Eoctane	0,000	0,007	sec-BCC6	0,000	0,004
24-Moctane	0,000	0,007	1c3t5MCC6	0,000	0,004
45-Moctane	0,000	0,004	1M-ci2-ECC5	0,000	0,003
i-Butane	0,015	0,000	1-ci2-MCC5	0,002	0,002
25-Mhexane	0,003	0,003	2244Mpentane	0,000	0,002
3-Eheptane	0,000	0,004	1-ci2-MCC6	0,000	0,002
2M-3Epentane	0,002	0,003	1ci2tr4-MCC5	0,001	0,002
23-Mhexane	0,002	0,003	11-Mcyhexan	0,001	0,002
n-C11	0,000	0,004	11Mcycpentan	0,001	0,001
23-Mbutane	0,006	0,002	p-Xylene	0,000	0,027
24-Mhexane	0,006	0,001	Toluene	0,016	0,020
3-Ehexane	0,000	0,003	Benzene	0,026	0,009
33-Moctane	0,000	0,002	E-Benzene	0,002	0,015
24-Mpentane	0,003	0,001	124-MBenzene	0,000	0,010
22-Mhexane	0,001	0,002	1M3-EBenzene	0,000	0,009
23-Mheptane	0,002	0,001	n-PBenzene	0,000	0,007
36-Moctane	0,000	0,001	1M2-EBenzene	0,000	0,006
4-Eheptane	0,000	0,001	123-MBenzene	0,000	0,005
234-Mpentane	0,001	0,001	o-Xylene	0,001	0,005
22-Mheptane	0,000	0,001	1M4-EBenzene	0,000	0,004
2M-3Eheptane	0,000	0,001	Cumene	0,000	0,003
34-Mheptane	0,000	0,001	135-MBenzene	0,000	0,003
27-Moctane	0,000	0,001	1M3nPropylBZ	0,000	0,002
			Indane	0,000	0,002