

Félfolyamatos osztófalas kolonna tervezése

Design of a semi-batch dividing-wall column

KIS Bendegúz, MSc hallgató, DR. HÉGELY László, egyetemi docens

Budapest Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Gépészmérnöki Kar, Épületgépészeti és Gépészeti Eljárástechnika Tanszék, Magyarország, H-1111, Budapest, Műegyetem rkp. 3., +36-1-463-2633, bkis@edu.bme.hu, hegely.laszlo@gkp.bme.hu, <https://epget.bme.hu/>

Abstract

Semi-batch distillation and the application of a dividing-wall column are both methods that can be used to reduce the energy demand of different distillation processes. The goal of this research is to combine these two technologies in order to create a more energy efficient process. The operation of a semi-batch dividing wall column was studied using the Chemcad flow-sheet simulator. The results so far indicate that this combined process does lead to reduced energy demand.

Keywords: semi-batch distillation, dividing-wall column, dynamic simulation, computer modelling, energy demand

Kivonat

A félfolyamatos desztilláció és az osztófalas kolonna alkalmazása egyaránt olyan módszerek, amik alkalmazásával csökkenthető különböző desztillációs eljárások energiaigénye. A cél a két technológia kombinálása egy energiahatékonyabb eljárás kidolgozása érdekében. A félfolyamatos osztófalas kolonna működését a Chemcad folyamatszimulátor segítségével vizsgáltam. Az eddigi eredmények arra engednek következtetni, hogy ezzel az eljárással valóban csökkenthető az energiaigény.

Kulcsszavak: félfolyamatos desztilláció, osztófalas kolonna, dinamikus szimuláció, számítógépes modellezés, energiaigény

1. BEVEZETÉS

A szakaszos rektifikálás egy olyan desztillációs eljárás, ahol a szétválasztandó folyadékelegy feldolgozása meghatározott adagokban, úgynevezett sarzsokban, történik. A sarzsot a desztilláló torony aljában elhelyezkedő üstbe töltik be, ott felforrallják, aminek következtében az elegy részben elpárolog és gőz formájában végighalad a kolonna mentén. A kolonna tetején elhelyezkedő kondenzátorban a gőz lecsapódik, annak egy része refluxként visszakerül a toronyba, ahol a gőzárammal szemben halad vissza az üst felé. A kondenzátort elhagyó folyadéknak az a részét, ami nem képez refluxot pedig párlatként összegyűjtik [1].

A félfolyamatos eljárás esetében a feldolgozandó elegy egy része folyamatosan kerül betáplálásra. A jelenlegi kutatás esetében az üst eredeti tartalmával megegyező összetételű elegy alkotja a betáplálást [2]. Félfolyamatos eljárás alkalmazásával csökkenthető a szakaszos rektifikálás energiaigénye [2,3]

Termikusan csatoltnak olyan többszlopos rendszereket szokás nevezni, amelyben az egyes oszlopokhoz tartozó hőcserélőkben közölt hő egy része több oszlopon is keresztülmelegy. Ilyen például az oldalkolonnás, oldalsztipperes és Petlyuk-kolonna rendszer. Az osztott terű vagy osztófalas kolonna egy olyan desztilláló torony, amelynél egy héjon belül valósítunk meg egy termikusan csatolt rendszert [4]. Az oszlopteret egy függőleges válaszfal osztja meg. A fal megosztja a toronyban mozgó folyadék- és gőzáramokat és fizikailag megosztja a betáplálási és elvételi zónákat, mivel a betáplált elegy legillékonyabb komponensét a fal a kolonna teteje felé irányítja, a legnehezebb komponens pedig az üst irányába. Az osztófalas konfiguráció alkalmazása akár 25-30%-os energiamegtakarítást is hozhat [5]. Termikus csatolást gyakorlatilag kizárólag folyamatos desztillálórendszerekben alkalmaznak.

Ebben a kutatásban a félfolyamatos eljárás és az osztófalas kolonnakonfiguráció együttes alkalmazását vizsgáltuk a szakaszos desztilláció energiaigényének csökkentése érdekében.

A javasolt kolonnakonfigurációt egy közel ideális háromkomponensű elegy rektifikálással történő szétválasztásán keresztül vizsgáltuk. Annak érdekében, hogy a számítási eredmények összehasonlíthatók legyenek korábbi, Ferchichi et al. [3] által félfolyamatos desztillációra végzett számítások eredményeivel, az ott megadott paramétereket (kolonna tányérszáma, sarzs összetétel, betáplálás árama), előírt kinyeréseket és tisztaságokat alkalmaztuk a kolonna műveleti tervezésekor. A szétválasztandó elegy ekvimoláris összetételű, és a következő három komponenst tartalmazza, illékonyaság szerint csökkenő sorrendben: n-hexán (A), n-heptán (B), n-oktán (C). Az előírt tisztaság mindhárom komponensre 95 mol%. Az előírt kinyeréseket, komponensekre lebontva, az 1. táblázat tartalmazza. A dinamikus szimulációt ChemCAD professzionális folyamatszimulátor programmal végeztük. A szimuláció során alkalmazott gőz-folyadék egyensúlyi modell a Soave-Redlich-Kwong (SRK) modell volt.

A kiindulási elegy összetétele

1. táblázat

Komponens	x_i (móltört)	Előírt kinyerés (%)
n-hexán	0,333	98,0
n-heptán	0,333	89,0
n-oktán	0,334	97,3

2. MŰVELET LEÍRÁSA

2.1. A berendezés adatok

A tervezett berendezés atmoszferikus nyomáson üzemel. Mivel a ChemCAD 7.0. verziójában nincs dedikált modul osztófalas kolonnák szimulációjára, ezért azt egy több kolonnából álló rendszerrel modelleztük. A kolonnákhoz a program SCDS Column modulját használtuk.

Az üst térfogata $V_{\text{üst}} = 10 \text{ m}^3$, a benne lévő maximális folyadékmennyiség $V_{\text{sarzs}} = 8 \text{ m}^3$. Az oszlop elméleti tányérszáma $N = 30$. A kondenzátor folyadék hold-upja $V_{\text{hold}}^{\text{kond}} = 0,08 \text{ m}^3$, a torony hold-up tányéronként ugyancsak $V_{\text{hold}}^{\text{torony}} = 0,08 \text{ m}^3$. A betáplálás a kolonnába történik, az osztófal alsó éle felett, folyadék halmazállapotban, forrponti hőmérsékleten történik. A betáplálás térfogatárama $F = 1 \text{ m}^3/\text{h}$. A kezdeti állapotban az üst 8 m^3 sarzsot tartalmaz, benne a folyadékszint a művelet során közel állandó. A szimuláció során a fűtési teljesítmény $\dot{Q} = 2872 \text{ MJ/h}$. Az osztófal a kolonna fejtől számítva $H_w = 22$ tányérig tart. A betáplálás pontja felülről számítva a $f = 18$ tányér. Azt, hogy a fal milyen arányban ossza meg a kolonna belső terét, az 1. egyenlettel határoztam meg. A σ_1 gőzelosztási arány az osztófal betáplálási oldalára jutó gőzáram és az osztófal alsó élét elérő gőzáram hányadosa. Segítségével becslést adhatunk arra, hogy mekkora része legyen a kolonna keresztmetszetének az osztófal betáplálás felőli 1. oldalán, hogy adott refluxarányok mellett biztosítva legyen az előírt tisztaság. Az egyenlet levezethető azt feltételezve, hogy a két desztillátumáram összege megegyezik a betáplálás áramával ($F=D_1+D_2$), és hogy a betáplálás „A” komponensárama teljes mértékben a betáplálásoldali desztillátumáramban (D_1) távozik.

$$\sigma_1 = \frac{1}{1 + \frac{(R_2 + 1) \cdot D_2}{(R_1 + 1) \cdot D_1}} \quad (1.)$$

2.2. Műveleti lépések

A művelet lépései a következők:

1. A sarzs felfűtése (folyamatos betáplálás nélkül).
2. Az „A” komponens (n-hexán) kinyerése az üstből, betáplálás kikapcsolva. Mindkét kondenzátorból a hexán szedőtartályába kerül a termék.
3. A betáplálás bekapcsolása, továbbra is a hexán szedőtartályába irányul mindkét oldali termék. A lépés célja, hogy mielőtt váltanánk a szedőtartályok között, a toronyban még jelen lévő hexán is a megfelelő tartályba kerüljön, és ne szennyezze a heptánt

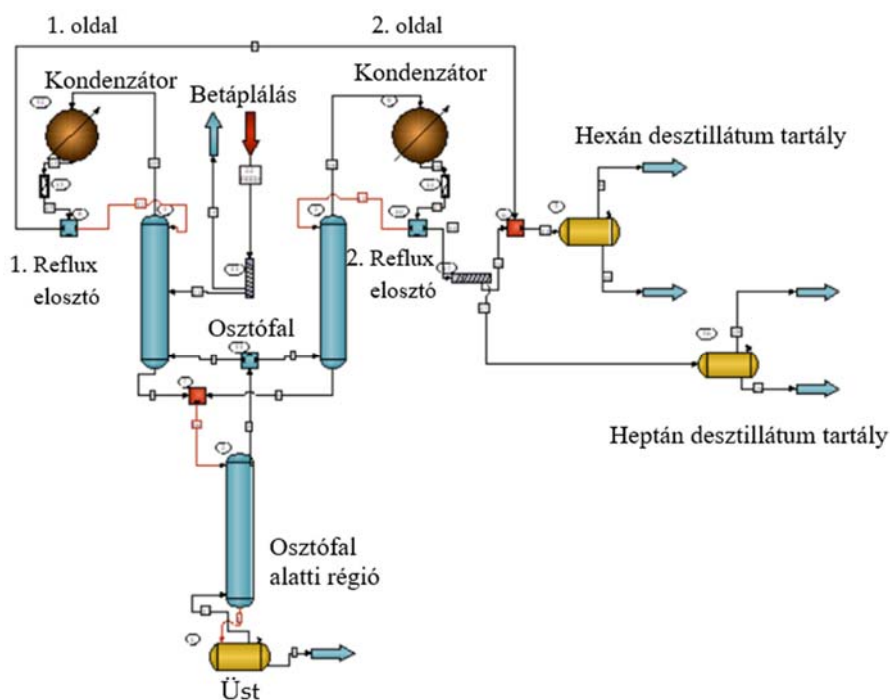
4. A „B” komponens (n-heptán), és a „C” komponens (n-oktán) kinyerése, a hexán további termelése mellett. Az 1. számú, a fal betáplálás oldali kondenzátor továbbra is a hexán szedőtartályára irányítja a páratot, míg a 2. számú kondenzátor már a heptán szedőjére irányul.

Az első és második lépés során a kolonna üzemelése megegyezik egy szakaszos berendezéssel. A betáplálás csak ezt követően kezdődik. A betáplált elegy összetétele megegyezik a sarzséval.

A refluxarányok a lépések között módosulnak. A felfűtés során mindkét oldal teljes refluxszal működik. A 2. lépés közben, a hexán kitermelésekor, mindkét oldalon $R_{11} = R_{12} = 6,45$. A 3. lépés közben már eltérnek egymástól a refluxarányok a fal két oldalán ($R_{21} \neq R_{22}$). Mikor a sarzsban található hexán elfogy, akkor már csak a betáplálásból érkező „A” komponens kinyerése történik. Ez, az általam végzett szimulációk során $t = 104$ min időpillanatban következett be. Ez azt jelenti, hogy a kolonnában drasztikusan lecsökken a hexán aránya, így a 1. számú (betáplálás) oldalon, ahol továbbra is a hexán kinyerése történik, a refluxarányt egy jóval nagyobb, $R_{21} = 27$ -es értékre kell módosítani. A 2. oldalon a gyűjtőtartályok közti átkapcsolás időpontjában módosul a refluxarány. Ez a jelen esetben $t = 134$ min volt. Mivel az osztófal 2. számú oldalán ezt követően a 4. lépés során szinte kizárólag heptán van jelen, ezért a refluxarányt itt csökkenteni kell, $R_{22} = 6$ -ra.

3. SZÁMÍTÓGÉPES MODELL

A dinamikus szimulációs modellt az 1. ábra mutatja be. A kolonna belső terét három részre osztottuk. Az osztófal két oldalát és az osztófal alatt elhelyezkedő szekciót külön tornyokkal modelleztük, az SCDS column modul alkalmazásával. A folyadék és gőzaramok megosztását a Stream Mixer és Stream Divider modulok végzik. A refluxarányokat ugyancsak Stream Divider modulokkal adtuk meg. A kondenzátorok modellezését Simple Heat Exchanger, az üst és a desztillátum gyűjtő tartályokat Dynamic Vessel modul segítségével modelleztük. A betáplálás megkezdését és a szedőtartályok közti váltást Time Switch irányítja, míg a refluxarányok lépések közti változtatását Ramp modul végezte.



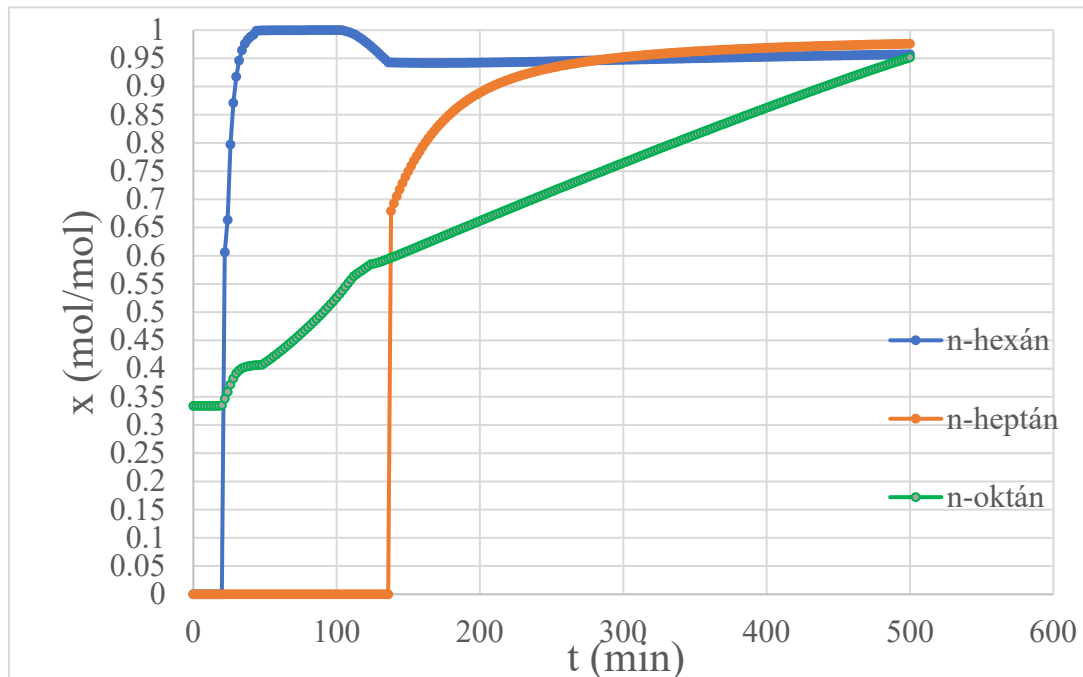
1. ábra. A felfolyamatos osztófalas kolonna ChemCAD modellje

4. EREDMÉNYEK

Az 1. egyenlet alapján a fal kétharmad-egyharmad arányban fogja megosztani a folyadék és gőzaramokat úgy, hogy a nagyobb rész az 1. oldalra, tehát a betáplálás oldalára kerül. Az egyes komponensek szedőtartályban található (átlagos) desztillátum-, illetve az oktán esetében üstbeli koncentrációjának változását a 2. ábra szemlélteti. A kezdeti, viszonylag gyors felfűtés után, a 2. lépésben

szinte teljesen tiszta hexánt nyerünk ki, körülbelül a 115. percig. Ekkor, mivel az üstből szinte az összes hexánt kinyertük, a koncentráció lecsökken, majd, a betáplálás miatt, beáll a kívánt 95%-os tisztaságra, amit az R_{21} refluxarány és a betáplálás biztosít. Ez a tisztaság a folyamat végéig közel állandó maradt.

A fal két oldalán eltérő termékeket kaphatunk. A 2. oldalon a végső lépésben a heptán termelése történik, az erre vonatkozó görbe gyorsan megközelíti a célértéket, majd ellaposodik. Végeredményben, a szimulációban a heptán kissé túl tiszta lett: 95%-os célérték helyett 97%-ot ért el. A 2. oldal további optimalizálásra szorul. Az üstben kezdetben mindhárom komponens jelen van. A hexán kinyerése után már egy közel kétkomponensű elegy marad csak, ez az oka az oktán görbe meredekségváltozásának. Ekkor csak a heptán koncentrációja befolyásolja az oktán tisztaságát. Az oktán esetében is sikerült elérni a 95 mol% tisztasági célértéket.



2. ábra. A termékek tisztaságának változása időben

A kinyerés eredményeket a 2. táblázat foglalja össze. A jelenlegi paraméterek mellett egyik előírt kinyerést sem sikerült teljesíteni. Ha a folyamatot tovább üzemeltetjük, a hexán kinyerése javul, a műveleti idő csökkentése pedig az oktánnak kedvezett. A heptán kinyerése volt a legkevésbé érzékeny a műveleti időre, viszont a hosszabb eljárás itt is javuláshoz vezetett. A kinyerések javítása érdekében további vizsgálatok szükségesek, olyan paraméterezés megtalálása érdekében, amivel kedvezőbb eredmények kaphatók.

A számított kinyerések

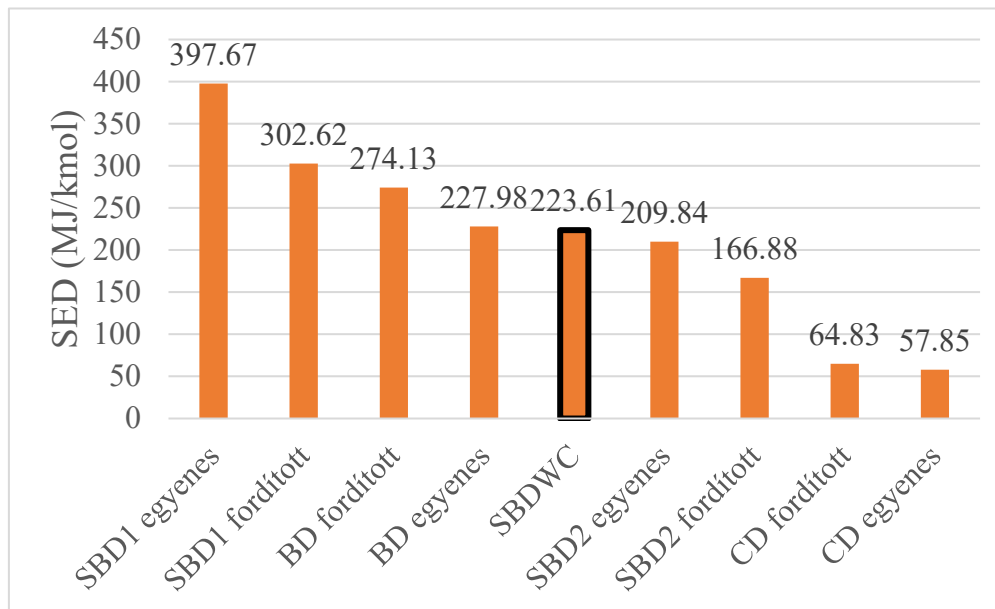
2. táblázat

Komponens	Kinyerés (%)	Cél (%)
n-hexán	89,9	98,0
n-heptán	77,8	89,0
n-oktán	90,7	97,3

A félfolyamatos osztófalas kolonna fajlagos energiaigényét (SED) összevettem a Ferchichi et al. [3] folyamatos, szakaszos és félfolyamatos desztillációra kapott értékekkel. A fajlagos energiaigényt a művelet során felhasznált teljes hőenergia mennyisége és a feldolgozott elegy mennyiségének hányadosaként számítottam. Az összehasonlítást a 3. ábrán szemléltettük. Az SBD1 olyan félfolyamatos eljárást jelöl, ahol a betáplálás az üstbe történt, az SBD2 olyan félfolyamatos eljárás, ahol a betáplálás a kolonna egy optimális pontjába történt, a BD a szakaszos eljárás, a CD pedig a folyamatos eljárás. Az egyenes-fordított jelölés a

szétválasztási sorrendre utal. Fordított esetben a legnehezebb komponens kerül először leválasztásra, egyenes esetben pedig a legkönnyebb. Ezeknek a mintájára az osztófalas berendezés az SBDWC jelölést kapta.

Az eredmények arra utalnak, hogy a félfolyamatos osztófalas berendezés már a jelenleg alkalmazott paraméterekkel is alacsonyabb fajlagos energiaigénnyel rendelkezik, mint a szakaszos eljárás és az SBD1, viszont még nem éri el az osztófal nélküli, optimális betáplálási helyű félfolyamatos eljárásra (SBD2) jellemző értékeket.



3. ábra. A fajlagos energiaigény összehasonlítása korábbi eredményekkel

5. ÖSSZEFOGLALÁS

Munkánk során, a legjobb tudomásunk szerint elsőként, egy félfolyamatos osztófalas kolonna alkalmazását vizsgáltuk. A számításokhoz a ChemCad szoftvert alkalmaztuk. A folyamatot egy háromkomponensű, ekvimoláris elegy (n-hexán, n-heptán, n-oktán) szétválasztásának példáján keresztül vizsgáltuk. Az osztófalas berendezés képes volt egy időben két komponens elvételére a kolonnából az osztófal két oldalán, a betáplálás oldalán n-hexán, a másikon n-heptán komponenseket gyártva.

Az osztófalra vonatkozó gőzelosztási hányados, tehát hogy milyen arányban osztja meg a kolonna belső terét és a gőzármat, 0,66:0,33 lett, közelítő képlet alapján, úgy hogy a nagyobb érték tartozik az 1. számú betáplálási oldalhoz, a kisebb a 2. számúhoz.

A művelet fajlagos energiaigénye 223,61 MJ/kmol volt, ami jobb, mint egy megegyező paraméterekkel tervezett szakaszos berendezés, de nem érte el az osztófal nélküli, optimális betáplálási helyű félfolyamatos eljárás (SBD2) energiaigényét. A fajlagos energiaigény tovább csökkenthető a refluxarányok és kolonna belső paramétereinek további változtatásával.

Az előírt tisztaságokat mindhárom komponensre elértük a folyamat során, a heptán esetében az előírtnál kis mértékben tisztább párlatot kaptunk. Ugyanakkor egyik komponens esetében sem sikerült elérni az előírt kinyeréseket. A legjobb eredményt itt az oktán adta, a legrosszabbat a heptán. A műveleti lépések hossza hatással van a kinyerésekre. Ezen a területen a kolonna paramétereinek optimalizálására van szükség a megfelelő eredmények elérése érdekében.

Az eddig végzett számítások bizalomgerjesztők; van létjogosultsága egy félfolyamatos osztófalas rektifikálótornyak. Az erősen hiányos irodalom és a berendezés összetettsége miatt további munka szükséges az eljárás tökéletesítése érdekében.

6. KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

A munkát a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal (NKFIH) OTKA (FK 143059) és TKP (TKP2021-EGA-02) pályázata támogatta.

7. IRODALMI HIVATKOZÁSOK

- [1] Fonyó Zs., Fábry Gy. *Vegyipari művelettani alapismeretek*, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 2004.
- [2] Lang P, Hegely L, *Different Feeding Policies for Semi-Batch Distillation*, Chemical Engineering Transactions, AIDIC – The Italian Association of Chemical Engineering, 2018, 69, 439-444.
- [3] Ferchichi M, Hegely L, Lang P.: *Decrease of energy demand of semi-batch distillation policies*, Energy & Environment, Sage, 2022, 32(8), 1479-1503.
- [4] Szabó L. *Sokkomponensű elegyek szétválasztási lehetőségeinek vizsgálata rektifikálás esetén*. PhD értekezés, Pannon Egyetem, Vegyészmérnöki-és Anyagtudományok Doktori Iskola, Vegyészmérnöki és Folyamatmérnöki Intézet, Folyamatmérnöki Intézeti Tanszék, Veszprém, 2018.
- [5] Kiss A.A., Flores Landaeta S.J., Infante Ferreira C.A. *Towards energy efficient distillation technologies - Making the right choice*. Energy. Elsevier, 2012, 47, 531-542.