

Szakaszos desztillációs technológia optimalizálása helyettesítő modellek segítségével

Optimisation of a batch distillation technology by applying surrogate models

SZŰCS Márton Tamás, Dr. HÉGELY László, egyetemi docens, Dr. LÁNG Péter Tamás, professor emeritus

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Gépészmérnöki Kar, Épületgépészeti és Gépészeti Eljárástechnika Tanszék, 1111 Budapest Műegyetem rkp. 3., +36 1 463 1106, szucs.marton1997@gmail.com, hegely.laszlo@gpk.bme.hu, lang.peter@gpk.bme.hu, epget.bme.hu

Abstract

Distillation is one of the most frequent separation technologies. The aim of this article is to optimise a batch distillation process for waste solvent treatment with the application of surrogate models. Algebraic models were fitted to simulation results to describe the objective function (the profit of one batch), and the resulting optimisation problem was solved numerically. This method makes the optimisation faster and more flexible than the methods previously applied, such as genetic algorithm.

Keywords: batch distillation, simulation, optimisation, surrogate models, machine learning

Kivonat

Célunk egy hulladék-oldószerkelet regeneráló szakaszos desztillációs művelet optimalizálása helyettesítő modellek segítségével. A célfüggvény (egy sarzs maximális profitja) leírására algebrai modelleket illesztettünk szimulációs eredményekre; az így kapott optimalizálási problémát numerikusan oldottuk meg. Ezzel a módszerrel az optimalizálás gyorsabb és rugalmasabb volt, mint a korábban használt genetikai algoritmussal.

Kulcsszavak: szakaszos desztilláció, szimuláció, optimalizálás, helyettesítő modellek, gépi tanulás

1. BEVEZETÉS

A desztilláció fontos szerepet játszik a vegyiparban. E művelettel folyadékelegyek komponenseit illékonyágkülönbség alapján lehet szétválasztani [1]. A műveletet kis és változó mennyiségű elegyek esetében általában szakaszosan végzik. Ugyanakkor a szakaszos desztilláció vizsgálata, modellezése és optimalizálása korántsem egyszerű feladat, mivel a folyamat közben folyamatosan változnak az összetételek, így dinamikus szimulációt és optimalizálást kell végezni.

Feladatunk egy ötkomponensű, gyógyszeripari hulladékoldószer-elegyből az egyik komponens, a metanol (B) kinyerésének optimalizálása. B regenerálása nem csak gazdasági, hanem fenntarthatósági szempontból is fontos: kevesebb friss metanolra van szükség, valamint nem kell az elegy teljes mennyiséget elégetni, amivel csökkenthető a CO₂ kibocsátás. Az elegy tartalmaz még növekvő forrpon sorrendjében acetont (A), tetrahydrofuránt (C), vizet (D) és toluolt (E). Mivel B gyártását két azeotróp (B-C, B-E) is korlátozza, ezért csak úgy lehet tiszta metanolt kinyerni, ha előtte C-t és E-t két előpárlatban eltávolítják. Erre azért van lehetőség, mert mindkét azeotróp forráspontja alacsonyabb, mint a metanolé. A folyamat egy felfűtési szakaszból, két előpárlat, egy főpárlat és egy utópárlat szedéséből áll, ezek modellezésére a ChemCAD 7.1 professzionális folyamatszimulátort használtuk [3].

Az optimalizálás célfüggvénye egy sarzs profitja, hiszen ezzel lehet kifejezni, hogy mennyire gazdaságos B regenerálása. Hégyel és Láng [4] genetikai algoritmus (GA) alkalmazásával optimalizálta

a folyamatot. A célfüggvény kiértékeléséhez a GA a folyamatszimulátort hívta meg. A GA szakaszos desztillációs folyamatok optimalizálására az egyik legelterjedtebb módszer. Hátránya azonban, hogy nagy mennyiségű számítást igényel, így az optimalizálási folyamat hosszú időt vehet igénybe. További hátránya, hogy ha a kiindulási adatok (pl. árak) valamelyike változik, akkor az optimalizálást újból el kell végezni.

A folyamatszimulátor eredményeire helyettesítő modellek illeszthetők. E modellek segítségével a szimulációs eredmények megfelelő pontossággal leírhatók, és kiértékelésük sokkal gyorsabb, így alkalmazásukkal az optimalizálás időigénye csökkenthető. A modellek illeszthetők például válaszfelület módszerrel, kriging vagy mesterséges neurális hálók alkalmazásával.

A munka célja, hogy olyan helyettesítő modelleket kapjunk, amik megfelelő pontossággal írják le a szimulációs eredményeket, és így azokkal az optimum helye jól becsülhető. A modellillesztés az ALAMO programmal [6] történt, ami gépi tanulás segítségével képes előre nem meghatározott alakú függvényt illeszteni a bemeneti és kimeneti adatsorokra.

2. A SZÉTVÁLASZTÁSI FELADAT ISMERTETÉSE

Az ötkomponensű elegyből a metanolt kell kinyerni [4]. A komponensek egymással öt minimális azeotrópot képeznek (A-B, B-C, B-E, C-D és D-E), melyek közül B kinyerését B-C és B-E nehezíti meg. Hogy a metanolt nagy tisztaságban ($x_{mc,B}=99,5\%$) ki lehessen nyerni a főpárlatban, előtte az A, C és E szennyezőket el kell távolítani. Az 1. táblázat tartalmazza a kiindulási adatokat. (A megadott elméleti tányérszám tartalmazza a totális kondenzátort és az üstöt is.)

Kiindulási adatok 1. táblázat

Kolonna	Érték
Elméleti tányérszám	26 db
Folyadék hold-up az oszlopban	0,05 m ³ /tányér
Kondenzátor hold-up	0,45 m ³
A torony nyomásesése	0,25 bar
A torony fejnyomása	1,013 bar
Kiindulási elegy	
Térfogata	25 m ³
Hőmérséklete	15°C
Aceton (A)	0,07 s%
Metanol (B)	37,14 s%
Tetrahidrofurán (C)	4,89 s%
Víz (D)	56,34 s%
Toluol (E)	1,56 s%

A művelet úgy zajlik, hogy az oszlop felfűtése után először két előpárlattal eltávolítják az elegyből a szerves szennyezőket (A, C, E), ami azonban jelentős B veszteséggel is jár. Az első előpárlat égetésre kerül, a másodikat pedig visszakeverik a következő sarzshoz. Ezt követi a főpárlat vétele, amelynek már nagy tisztaságú metanol. Végezetül pedig szükség van még egy utópárlatra, amit szintén visszaforgatnak, amivel az üstmaradékból (vízből) el lehet távolítani a benne maradt metanolt a szükséges mértékben. Az egyes lépések leállási feltételeit a 2. táblázat tartalmazza.

A lépések leállási feltételei 2. táblázat

Párlat	Leállási követelmény
Első előpárlat	$x_{d,c} < Cr_1$ (C tömegtörtje a desztillátumban)
Második előpárlat	$x_{d,c} < Cr_2$
Főpárlat	$x_{mc,B} > 99,52\%$
Utópárlat	$x_{sr,B} < 0,25\%$ (B tömegtörtje az üstmaradéokban)

A maximalizálandó célfüggvény egy sarzs profitja (OF):

$$OF = p_B m_{fc} - c_{inc} m_{fc1} - c_{st} \frac{Q_{st}}{r_{st}} t \quad (1)$$

ahol p_B a metanol ára (0,46 US\$/kg), m_{mc} a főpárlat tömege (kg), c_{inc} az elégetés költsége (0,21 \$/kg), m_{fc1} az első előpárlat tömege (kg), c_{st} a fűtőgáz költsége (57,6 \$/t), r_{st} a fűtőgáz kondenzációs hője (2263 MJ/t), Q_{st} a fűtési teljesítmény (1800 MJ/h), t a művelet időtartama (h).

Az optimalizálási probléma megoldásainak az alábbi korlátoknak kell megfelelniük:

$$x_{mc,B} = 99,5 \text{ s\%} \quad (2) \quad \frac{x_{fc2,C}}{x_{fc2,B}} \leq 0,107 \quad (3) \quad \frac{x_{fc2,E}}{x_{fc2,B}} \leq 0,120 \quad (4)$$

ahol $x_{fc2,B}$, $x_{fc2,C}$ és $x_{fc2,E}$ a második előpárlat B-, C-, illetve E-tartalma. A (3) és (4) korlát biztosítja, hogy a szerves szennyezők ne halmozódjanak fel a második előpárlatban, és így az visszaforgatható legyen.

Az optimalizálási (független) változók: az első és második előpárlat, illetve a főpárlat refluxarányai (R_1 , R_2 , R_3), a második előpárlatra, valamint a főpárlatra történő váltás kritériumai (Cr_1 , Cr_2). Az utópárlat refluxaránya ($R_4=5,41$) érdemben nem befolyásolja a profit értékét.

3. SZÁMÍTÁSI MÓDSZER

A számítás menete az alábbi: 1. Nagyszámú független változó érték generálása latin hiperkocka-alapú mintavételezéssel. 2. Ezen értékekkel ChemCAD szimuláció futtatása, amiből a függő változókat ki lehet nyerni. 3. Matematikai modellek illesztése a függő változókra (ahol ez lehetséges). 4. E modellek segítségével a célfüggvény optimumának megkeresése.

A célfüggvény és a korlátok kiértékeléséhez szükséges függő változók az alábbiak: az első előpárlat (m_{fc1}) és a főpárlat (m_{mc}) tömege, a művelet időtartama (t), a második előpárlat B-, C- és E-tartalma ($x_{fc2,B}$, $x_{fc2,C}$ és $x_{fc2,E}$), valamint a főpárlat maximális B-tartalma ($x_{mc,B, \max}$). Utóbbira azért van szükség, mert ennek segítségével lehet megállapítani, hogy a főpárlat elérte-e a kívánt metanol tartalmat, illetve mennyire marad el attól. A második előpárlat tulajdonságaiból azt lehet megállapítani, hogy annak összetétele megsérti-e a korlátokat.

Az optimalizálási változók terében latin hiperkocka mintavételezési módszerrel [2] választottuk ki azokat a pontokat, ahol a szimulációt elvégeztük. n db változó esetén az optimalizálási tér egy n -dimenziós hiperkocka. Minden változó vizsgált tartományát k db intervallumra osztva k^n kisebb hiperkockát kapunk. Ezek közül úgy választunk ki véletlenszerűen k db-t, hogy egyetlen változó mentén se legyen ugyanabban az intervallumban két kiválasztott hiperkocka. A hiperkockák belsejében véletlenszerűen generálunk egy-egy pontot. Ez a módszer gyorsan tud nagy mennyiségű adatot szolgáltatni, valamint előnye, hogy könnyen programozható, [5], továbbá a pontok véletlenszerűen, de egyenletesen helyezkednek el, és nem csoportosulnak a vizsgálati tartomány egy pontja köré.

Jelen esetben a független változókra felállítottunk egy $k=500$ elemű latin hiperkockát, majd ezen értékekkel lefuttattuk a szimulációt. Mivel kevés (18) olyan pontot kaptunk, ahol $x_{mc,B}$ megfelelő volt, ezért a vizsgálati tartományokat szűkítettük. A szűkített tartományon létrehozott 500 elemű hiperkockával már 56 megfelelő pontot kaptunk.

A szűkített tartományon felvett pontok és a kapott értékek felhasználásával felállítottuk a helyettesítő modelleket, az ALAMO program segítségével. A program bázisfüggvények, például konstans, lineáris, polinomiális, exponenciális és logaritmus függvények kombinációjaként alkot meg egy algebrai modellt. A modellillesztés során egy kiválasztott, az illesztés jóságát leíró mutató optimalizálása történik. Jelen esetben a Bayes-féle információs kritériumot (BIC) alkalmaztuk.

4. EREDMÉNYEK

Példaképp bemutatjuk a műveleti időre kapott modellt:

$$t = 95.93 \cdot R_1 + 16.04 \cdot R_2 + 78.61 \cdot \ln R_2 - 0.89 \cdot e^{R_3} + 939.52 \cdot e^{Cr_1} - 3.59 \cdot R_1^2 + 24.95 \cdot R_3^2 - 4531 \cdot Cr_1^2 \quad (5)$$

Megfigyelhető, hogy Cr_2 nem befolyásolja az időt: Cr_2 növelésével csökken a második előpárlat vételének ideje, de valószínűleg a főpárlatvétel ideje hasonló mértékben nő.

A helyettesítő modellekkkel felírt célfüggvényt végezetül SQP módszerrel Maple-vel optimalizáltuk. A számított profit 493,4 \$. A becsült optimumban (3. táblázat) elvégezve a szimulációt, ettől csak 0,4 %-kal eltérő profitot kaptunk, ami azt mutatja, hogy a helyettesítő modellek jó

pontossággal leírják a szimulációs eredményeket. A 3. táblázatban a helyettesítő modell által adott optimumban elvégzett részletes szimulációval kapott eredmények láthatók.

A helyettesítő modell-alapú optimalizálással és GA-val kapott értékek összehasonlítása 3. táblázat

Független változó	GA	Helyettesítő modell-alapú optimalizálás	Eltérés
R ₁	6,22	5,70	-9,14%
R ₂	3,07	2,44	-20,59%
R ₃	3,05	3,10	1,54%
Cr ₁	0,175	0,2144	18,36%
Cr ₂	0,0262	0,0256	-2,54%
Műveleti idő (t), h	35,8	34,7	-3,06%
Profit és részei			Eltérés
Bevétel, \$	2597	2535	-2,4%
Égetés költsége, \$	492	455	-7,43%
Fűtőgáz költsége, \$	1638	1588	-3,06%
Profit, \$	467	491,2	5,19%

A helyettesítő modellek alkalmazásával kapott profit érték nagyobb, mint a GA-val kapott, és csak 1000, míg GA esetében 3000 szimulációra volt szükség. R₁ és R₂ csökkent, míg R₃ nem változott számottevően. Cr₁ növekedése miatt az első előpárlat mennyisége, és így az égetési költség csökkent. Cr₂ kissé csökkent, ami csökkentette ugyan a főpárlat mennyiségét, és így a bevételt, azonban ennél nagyobb mértékű volt a költségek csökkenése. A gőzköltség a rövidebb desztillációs idő miatt csökkent, ami a lényegesen kisebb R₁ és R₂ refluxarányokkal magyarázható.

5. ÖSSZEFOGLALÁS

Egy ötkomponensű hulladék-oldószerkeleget szakszerű desztillációval történő metanol visszanyerést vizsgáltunk szimulációval és optimalizálással. Egy sarzs feldolgozásának profitját maximalizáltuk szimulációs eredményekre illesztett helyettesítő modellek segítségével. A korábban genetikus algoritmussal meghatározott profitnál 5 %-kal nagyobbat értünk el, miközben a számítási igény a harmadára csökkent. Az égetendő hulladék mennyisége is csökkent, így még környezetbarátabbá vált a folyamat. A vizsgált optimalizálási módszer tehát sikeresen használható szakaszos desztillációs műveletek esetén. A számítási igény várhatóan még tovább csökkenthető a mintavételezési tartomány szűkítési módszerének finomításával.

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Szücs Márton Tamás konferenciárészvételét a BME Gépészmérnöki Kar NTP-HHTDK-21-0051 pályázata támogatta. A tanulmány alapjául szolgáló kutatás a Bolyai János Kutatási Ösztöndíj és az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-21-5 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott szakmai támogatásával készült.

IRODALMI HIVATKOZÁSOK

- [1] Cséfalvay E., Deák A., Farkas T., Hanák L., Mika L. T., Mizsey P., Sawinsky J., Simándi B., Szánya T., Székely E., Vágó E. *Vegyipari műveletek II*, Typotex Kiadó, Budapest, 2012.
- [3] Erdősné Sélley C., Janik J., Körtélyesi G. *Mérnöki optimalizáció*, Typotex Kiadó, Budapest, 2012.
- [2] Gmehling J., Kleiber M., Kolbe B., Rarey J. *Chemical Thermodynamics for Process Simulation*. Wiley-VCH, Weinheim, 2019.
- [4] Hégyel L., Láng P. *Optimization of a batch extractive distillation process with recycling*. Journal of Cleaner Production. Elsevier, 2016, 136, 99-110.
- [5] Tang B., Lin C. D. *Latin Hypercubes and Space-filling Designs*. In: Dean A., Morris M., Stufken J., Bingham D. Handbook of Design and Analysis of Experiments. Chapman and Hall/CRC, New York, 2015.
- [6] The Optimization Firm, <https://minlp.com/alamo> (Utolsó letöltés: 2020. 12.12.)