

KIS BENEDEGÚZ
TDK DOLGOZAT

BUDAPESTI MŰSZAKI ÉS GAZDASÁGTUDOMÁNYI EGYETEM
GÉPÉSZMÉRNÖKI KAR
ÉPÜLETGÉPÉSZETI ÉS GÉPÉSZETI ELJÁRÁSTECHNIKA TANSZÉK



TDK DOLGOZAT

BUDAPESTI MŰSZAKI ÉS GAZDASÁGTUDOMÁNYI EGYETEM
GÉPÉSZMÉRNÖKI KAR
ÉPÜLETGÉPÉSZETI ÉS GÉPÉSZETI ELJÁRÁSTECHNIKA TANSZÉK



KIS BENDEGÚZ
TDK DOLGOZAT
Félfolyamatos osztófalas kolonna tervezése

Témavezető:
Dr. Hégely László
Egyetemi docens

Budapest, 2024

NYILATKOZATOK

Elfogadási nyilatkozat

Ezen dolgozat a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Gépészmérnöki Kara által a Tudományos Diákköri Konferenciára előírt valamennyi tartalmi és formai követelménynek, továbbá a célkitűzésekben megfogalmazottaknak maradéktalanul eleget tesz. Ezen dolgozatot a nyilvános bírálatra és nyilvános előadásra alkalmasnak tartom.

Budapest, 2024.11.10.

.....

témavezető

Nyilatkozat az önálló munkáról

Alulírott, *Kis Bendegúz* (LW01K5), a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem hallgatója, büntetőjogi és fegyelmi felelősségem tudatában kijelentem és saját-kezü aláírással igazolom, hogy ezt a dolgozatot meg nem engedett segítség nélkül, saját magam készítettem, és dolgozatomban csak a megadott forrásokat használtam fel. Minden olyan részt, melyet szó szerint vagy azonos értelemben, de átfogalmazva más forrásból átvettem, egyértelműen, a hatályos előírásoknak megfelelően, a forrás megadásával megjelöltem.

Budapest, 2024.11.10.

.....

hallgató

Köszönetnyilvánítás

Szeretném megköszönni elsősorban témavezetőmnek, Dr. Hégely Lászlónak a türelmét és segítségét. A dolgozat elkészítésének minden lépésében segédkezett nekem. Szeretném megköszönni Prof. Láng Péter Tamásnak tanácsaiért. Továbbá megköszönném Szávics Nikolettnek a támogató szavait. Szeretném még megköszönni Dr. Poós Tibornak és Dr. Varju Evelinnek, akik nagy motiváló hatással volt rám, hogy készítsek egy TDK dolgozatot.

Budapest, 2024.11.10.

Kis Bendegúz

Tartalom

Előszó.....	0
Jelölések jegyzéke.....	1
1. Absztrakt.....	3
1.1. Abstract in English.....	4
2. Bevezetés	5
2.1. Célkitűzések	5
2.2. Áttekintés	5
3. Irodalmi Áttekintés	6
3.1. Desztilláció.....	6
3.2. Rektifikálás:	6
3.3. Folyamatos rektifikálás többkomponensű elegyek esetében:	8
3.3.1. Kéttermékes rektifikáló kolonnák sorba kapcsolása	8
3.3.2. Oldaltermékes kolonna	10
3.3.3. Termikusan csatolt kolonna konstrukciók	10
3.3.4. Osztott terű vagy osztófalas kolonna	12
3.3.5. Szerkezet	13
3.3.6. Az osztófalas kolonna alkalmazásának hátrányai	15
3.4. Félfolyamatos desztilláció.....	15
4. Alapadatok és modell.....	20
4.1. A berendezést leíró adatok	20
4.2. A művelet	21
4.3. A folyadékelegy tulajdonságai.	24
5. Technológiai adatok megállapítása.....	25
5.1. A torony belső fizikai paraméterei	25
5.2. A refluxarányok megállapítása	26
5.3. Tisztaságok és kinyerések:	27
5.4. Energiaigény:	29
5.4.1. Fajlagos energiaigény	29
5.4.2. Elméleti minimális energiaigény	30
5.4.3. Fajlagos energiaigényt befolyásoló tényezők	31
6. Összefoglalás:	34
6.1. Jövőbeli tervek:	35
6.2. Summary	35
7. felhasznált Források.....	36
8. Mellékletek	38
8.1. M1 melléklet, az 5.1. képlet levezetése.....	38

ELŐSZÓ

A fenntarthatóság egy kulcsfontosságú kérdése a modern műszaki tudományoknak. Minden területen igyekeznünk kell környezetkímélő, a lehető legkisebb káros kibocsátásokkal járó és legenergiahatékonyabb technológiákat fejleszteni. A vegyipari gépészet egyik legégetőbb fenntarthatósági problémája a technológiák hatásfoka. Számos olyan széleskörben alkalmazott technológia létezik ezen a területen, amik aránytalanul nagy energiaigénnyel rendelkeznek. A szakaszos desztillációs eljárások is ebbe a kategóriába tartoznak. Ez a dolgozat egy következő eleme olyan kutatások láncának, amik a szakaszos desztilláció energiaigényének csökkentését célozzák meg és az egyik első azok között, amik fontolóra veszik a félfolyamatos desztilláció és az osztófalas konfiguráció kombinációját.

JELÖLÉSEK JEGYZÉKE

Latin betűk		
Jelölés	Megnevezés, megjegyzés, érték	Mértékegység
A	Legillékonyabb komponens	-
B	Második legnagyobb illékonyságú komponens	-
C	Harmadik legnagyobb illékonyságú komponens	-
D	Desztillátum áram	1
f	Betáplálási tényér szám	1
F	Betáplálás áram	$\frac{\text{m}^3}{\text{h}}$; $\frac{\text{kmol}}{\text{h}}$
H	Falmagasság	1
k	Darabszám	1
n	Anyagmennyiség	mol
N	Kapcsolt tornyok száma	1
N	Tányérszám	1
$\dot{Q}$	Fűtési teljesítmény	$\frac{\text{MJ}}{\text{h}}$
R	Refluxarány	1
S	Entrópiaáram	$\frac{\text{MJ}}{\text{K h}}$
SED	Fajlagos energiaigény	$\frac{\text{MJ}}{\text{kmol betáp}}$
T	Hőmérséklet	K
t	Idő	min; h
V	Térfogat	m^3
V	Gőzáram	$\frac{\text{m}^3}{\text{h}}$; $\frac{\text{kmol}}{\text{h}}$
W	Energiaigény	$\frac{\text{MJ}}{\text{kmol}}$
x	Koncentráció (móltörtben kifejezve)	1

Görög betűk		
Jelölés	Megnevezés, megjegyzés, érték	Mértékegység
σ	Gőzeloszlási hányados	1
η	Kinyerés	%

Indexek, kitevők

Jelölés	Megnevezés, értelmezés
1	1. eset
2	2. eset
hold	Hold-up
i	i. komponens
deszt	A desztillátumra vonatkozó érték
fűt	A fűtésre vonatkozó érték
k	k. elem
min	Minimális
üst	Az üstre vonatkozó érték
sarzs	A sarzsra vonatkozó érték
táp	A betáplálásra vonatkozó érték
telj	Teljes tartomány
torony	A torony belső részére vonatkozó értékek
w	Fal

1. ABSZTRAKT

Kulcsszavak: félfolyamatos desztilláció, osztófalas kolonna, dinamikus szimuláció

A desztilláció a legszélesebb körben alkalmazott módszer folyadékelegyek szétválasztására, amely egy, a gőz-folyadék egyensúlyra épülő, diffúziós vegyipari eljárás.

Szakaszos berendezések esetében a szétválasztandó elegy meghatározott mennyiségben kerül betáplálásra az üstbe. Az üstben történő hőközléssel a folyadékot részlegesen elpárologtatjuk. A keletkezett gőz végighalad az oszlopon, majd kondenzáljuk és az így kapott folyadék egy részét refluxként visszavezetjük az oszlopba, másik részét pedig desztillátumként összegyűjtjük. A szakaszos desztilláció nagy hátránya a berendezések nagy energiaigénye.

A félfolyamatos desztillációt egy egyedi szakaszos eljárásként lehet értelmezni, ahol a szétválasztandó elegy betáplálása részben folyamatosan történik. Alkalmazásával csökkenthető a művelet energiaigénye, de az irodalomban csak rendkívül korlátozottan vizsgálták.

Az osztófalas kolonna a Petlyuk-kolonna elrendezés alkalmazása egy héjon belül. A fal megosztja a torony belső terét, több részre osztva ezzel a folyadék- és gőzáramokat. Osztófalas elrendezés alkalmazásával csökkenthető a többkomponensű elegyek szétválasztásának energiaigénye. A kutatás célja a félfolyamatos eljárás és az osztófalas elrendezés kombinálásával, amit az irodalomban korábban még nem vizsgáltak, egy energia-takarékosabb berendezés tervezése. A kolonna működését egy n-hexán, n-heptán, n-oktán összetételű, háromkomponensű elegy példáján keresztül vizsgáltam a Chemcad folyamat-szimulátor felhasználásával.

1.1. Abstract in English

Keywords: semi-batch distillation, dividing wall column, dynamic simulation

Distillation is the most widely used method for the separation of liquid mixtures. It is a mass transfer operation based on vapor-liquid equilibrium.

In the case of batch distillation, the liquid mixture to be separated is introduced in the still pot of the column in a fixed amount. By heating the still pot, the liquid is then partially evaporated. The vapor that is created during the evaporation rises in the column, it is condensed, then one part of the condensate is led back to the column as reflux and the other part is collected as distillate. An important disadvantage of batch distillation is the high energy demand of the process.

Semi-batch distillation can be understood as a special batch distillation process, where part of the feed is continuously fed into the batch column. It's application was studied only to a very limited extent in the literature, although it can considerably reduce the energy demand.

A dividing-wall column is a realisation of the Petlyuk configuration within a single shell. The wall separates the inside of the column, separating the liquid and vapor streams. Using a dividing wall can reduce the energy demand of the process of separating multi-component mixtures.

The goal of this research is to combine the semi-batch process with the dividing wall column, not yet studied in the literature, and to design a more energy efficient process. The operation of the column will be presented through an example using a ternary mixture composed of n-hexane, n-heptane, n-octane. This research was done with the aid of the Chemcad flow-sheet simulator.

2. BEVEZETÉS

2.1. Célkitűzések

A kutatás célja alapvetően a desztillációs eljárások nagy energiaigényének csökkentése, a desztilláció fenttarthatóbbá tétele, olyan konfigurációt keresve, amivel csökkenthető a háromkomponensű folyadékelegyek desztillációval történő szétválasztásának energiaigénye. Jelen dolgozatban egy félfolyamatos osztófalas kolonna műveleti tervezésének folyamatát mutatom be.

2.2. Áttekintés

Ebben a dolgozatban elsőként egy átfogó irodalomkutatást folytattam a desztillációs eljárások, a termikusan csatolt kolonnák és a félfolyamatos desztilláció tudományterületein.

Az irodalomkutatás után ismertetem a kolonna paramétereit, beleértve azokat is, amiket optimalizáció során kaptam eredményül és a feldolgozandó folyadékelegy releváns tulajdonságait.

Ezt követően részletesen bemutatom az általam tervezett berendezést és annak részeit ábrákon és a Chemcad programban készített folyamatábrán és szimuláción keresztül.

3. IRODALOMI ÁTTEKINTÉS

3.1. Desztilláció

Az egyik legelterjedtebb módszer folyadékok elegyeinek szétválasztására a gőz-folyadék fázisegyensúlyra épülő desztilláció vagy annak ismételt formája, a rektifikálás. A desztilláció a diffúziós vegyipari műveletek közé sorolható. A desztilláció művelete a folyamatban résztvevő komponensek illékonyságának különbségén alapszik. Az illékonyság vagy volatilitás a folyadék elpárolgásra való készsége. Desztilláció során azt a jelenségnek vesszük hasznát, hogy, a folyadékfázissal érintkező, azaz termodinamikai egyensúlyban lévő gőzfázison belül, több egymástól eltérő illékonyságú vegyületet tartalmazó rendszerben, az alacsonyabb forráspontú, illetve a nagyobb tenziójú, komponensek koncentrációja nagyobb, mint a folyadékfázison belül.

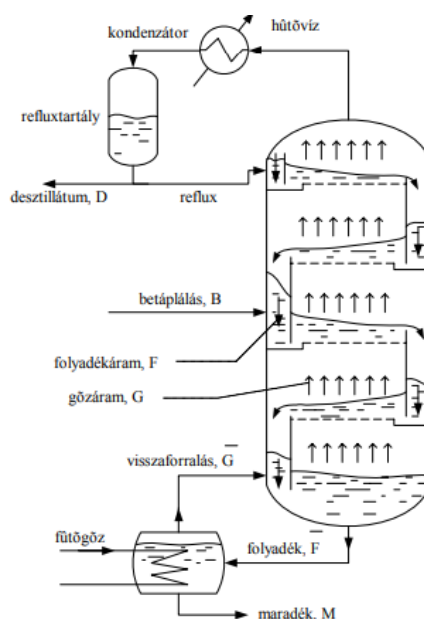
A desztillációs eljárások a működés módja szerint a következő csoportokba sorolhatók [1]:

- **Szakaszos desztilláció:** A szétválasztásra kerülő komponensek alkotta folyadék-elegy meghatározott összetételű és mennyiségű adagokban kerül betáplálásra a kolonna üstjébe. A folyadékelegyet hőközléssel részben elpárologtatjuk, az így keletkezett gőzt kondenzáltatjuk majd a párlatként összegyűjtjük.
- **Folyamatos desztilláció:** A folyadékelegy betáplálása megszakítás nélkül, állandó áramban történik, a kolonna adott pontjába. A keletkezett fázisok szétválasztása és elvétele is folyamatosan történik.
- **Félfolyamatos desztilláció:** Félfolyamatos esetben a folyadékelegy szétválasztása részben szakaszosan történik, részben folyamatos betáplálással.

3.2. Rektifikálás:

Egyszerű lepárlás, illetve desztilláció, alkalmazásakor a keletkező párlat összetétele különbözik a megmaradó folyadék összetételétől, ám a komponensek szétválasztása korlátozottan valósul meg [1]. Ha folytatni akarnánk a szétválasztást, akkor a párlat és a maradék újbóli lepárlása lenne szükséges. Ennek az eljárásnak ilyen módon rettenetes

lenne az energetikai hatásfoka a külön készülékben elvégzendő hűtés és fűtés következtében. Úgy érhetünk el kedvezőbb energetikai hatásfokot, ha az elpárolgó folyadék gőzét nem külön egységben kondenzáltatjuk, hanem a lepárlásra kerülő folyadékpárlatokba, a folyadékfázisokba, vezetjük. A folyadékfázison belül a gőzfázis kevésbé illékony komponensei kondenzálódnak és a kondenzációs hő az illékonyabb komponensek elpárolgásához járul hozzá. Ezt az elvet követve az illékonyabb komponensek dúsulása következik be a gőzfázisban, míg a folyadékfázisban a kevésbé illékony komponensek fognak dúsulni [1]. A rektifikáció folyamata gyakorlatban oszlopszerű berendezésekben történik. A fázisérintkezési rendszerek szempontjából, leggyakoribb esetekben, tányéros és töltetes szerkezetekről beszélhetünk. Tányéros esetben a folyadék és gőzfázis a rektifikáló oszlopban kialakított tányérokon érintkeznek egymással. A 3.1. ábrán egy tányéros belső szerkezetű, folyamatos üzemű torony elvi ábrája látható.



3.1 ábra: Rektifikáló oszlop vázlata [1]

Ahogy azt a 3.1. ábra szemlélteti, egy kéttermékes rektifikáló kolonna működésekor a kolonnába egy áramot vezetünk be, ez a betáplálási áram, és egy-egy terméket veszünk el a torony tetején és alján. A kolonna tetején elvett terméket nevezzük desztillátumnak, az alján elvett terméket pedig maradéknak [3].

Töltött oszlop esetében az oszlopban a fázisérintkezés viszonylag nagy fajlagos felülettel rendelkező töltetelemek felületén történik. A nagy fajlagos felület biztosítja a

nagy érintkezési felületet a különböző fázisok számára. A rektifikáló oszlopokat hőcserélőkkel egészítik ki. Fűtés céljából az oszlop aljára visszaforralót (hőközlő egységet), az oszlop tetejére kondenzátort (hőelvonó egységet) helyeznek.

3.3. Folyamatos rektifikálás többkomponensű elegyek esetében:

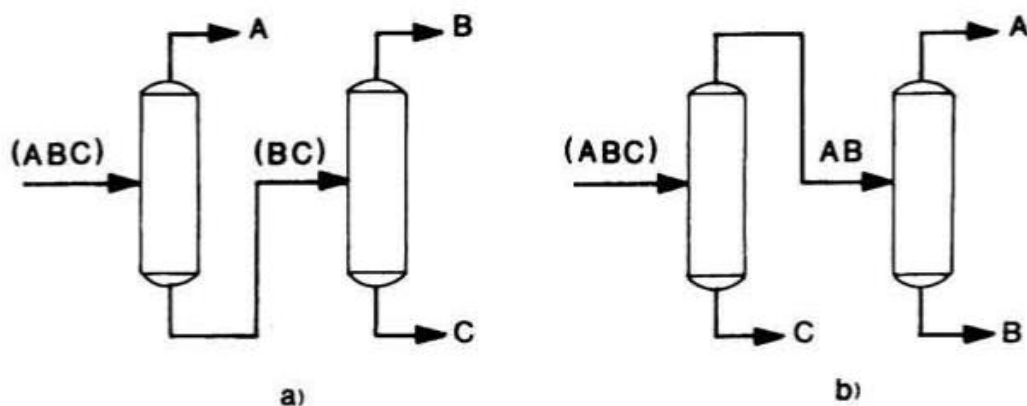
Rektifikálással lehetőség nyílik kettőnél több komponenst tartalmazó elegyek szétválasztására. Ebben a fejezetben bemutatok több, sok komponensű elegyek szétválasztására alkalmas módszert is. Ebben a fejezetben a folyamatos eljárásokra bemutatására lesz hangsúlyos.

3.3.1. KÉTTERMÉKES REKTIFIKÁLÓ KOLONNÁK SORBA KAPCSOLÁSA

Kettőnél több komponensű elegy szétválasztását ezzel a módszerrel úgy lehet megoldani, hogy sorba kapcsolunk több kolonnát. Ennek a módszernek az alkalmazásakor a betáplált elegyből a sorba kötött kolonnákból az elsőben leválasztjuk vagy a legkönnyebb vagy a legnehezebb komponenst vagy két különböző elegyre választjuk azt szét. Egyenes szétválasztáskor mindig a relatív illékonyság sorrendjében veszik el a komponenseket (a legillékonyabbal kezdve), fordított sorrendű szétválasztáskor pedig a nehéz komponens az elvett termék. A konfigurációkat a 3.2. ábra. szemlélteti. A leválasztást követően a megmaradó elegyet egy következő rektifikáló oszlopba tápláljuk be.

Ha k darab komponenst tartalmazó elegyet szeretnénk ezzel a módszerrel szétválasztani, akkor $k-1$ darab készülék sorba kapcsolása lesz szükséges. A kapcsolások száma (N_k) a komponensek számának növelésével ugrásszerűen nő és amennyiben minden komponenst tisztán nyerünk ki a 3.1. egyenlet alapján számolható [2, 3]:

$$N_k = \frac{(2 \cdot (k-1))!}{k! \cdot (k-1)!} \quad (3.1.)$$



3.2. ábra: a) az egyenes és b) fordított kapcsolási sorrend három komponens esetében

A: legillékonyabb komponens; B: közepes illékonyaságú komponens;
C: legnehezebb komponens [2]

Annak a meghatározására, hogy melyik kapcsolási sorrendet érdemes választani léteznek bizonyos gyakorlaton alapuló heurisztikus szabályok [2, 3]:

- Egyenes kapcsolat kedvezőbb azokban az esetekben, ha kolonnánként közel ugyanolyan komponensáramok, relatív illékonyaságok és szétválasztási igények vannak.
- Fordított sorrend lehet kedvezőbb, ha szétválasztáskor az egyik kevésbé illékony komponens túlsúlyban van, vagy ha két egymást követő szétválasztáskor a komponensek relatív illékonyasága közel 1 (tehát közeli a forráspontjuk).
- Azt a komponenst, amelyre nagy tisztasági fokot írunk elő, célszerű a folyamat végén leválasztani, így ilyen esetben is a fordított sorrend alkalmazása lehet indokolt [2].
- Tervezéskor érdemes olyan sorrendet választani, hogy a korróziót okozó és polimerizációra hajlamos komponenseket érdemes a folyamat elején leválasztani [3].

Ezek az elvek láthatóan együtt több esetben ellentmondásosak, így érdemes részletes műszaki és gazdasági elemzések eredményeivel és az aktuális körülményekkel közösen számításba venni őket.

A sorba kapcsolt kolonnák előnye, hogy a termékek tisztasága jól szabályozható és nagy relatív illékonyaság különbségek esetén is jó hatásfokkal lehet alkalmazni őket. Egy ilyen rendszer használatának hátránya, hogy kizárólag kisszámú komponens esetén gazdaságos, sok műveleti egységből áll és ezért magas a beruházási költség igény és energia igény szempontjából is kedvezőtlen.

3.3.2. OLDALTERMÉKES KOLONNA

Az oldaltermés, vagy másik nevén oldalelvétes, kolonna ugyancsak többkomponensű elegyek szétválasztására alkalmazható berendezés. Abban tér el az eddig tárgyalt esetektől, hogy ez a desztilláló oszlop kettő helyett három vagy több eltérő összetételű terméket állít elő a betáplált elegyből. Ha például egy oldalelvétes kolonnát alkalmazunk, akkor három terméket vehetünk el [3]. Ebben az esetben az egy oldalelvétes kolonna képes ellátni két sorba kapcsolt kéttermés kolonna feladatát. Továbbiakban az egy oldalelvétes kolonnáról esik csak szó.

Oldaltermés kolonna esetében két nagy csoportba lehet sorolni a berendezéseket, attól függően, hogy milyen a betáplálás és az oldalelvétel relatív helyzete [4, 5]: a betáplálás történhet az elvétel fölött, vagy alatt. Oldaltermés kolonna alkalmazásakor, ha ABC összetételű betápot akarunk szétválasztani komponenseire, úgy, hogy a párlat A, a maradék C és az oldaltermék B, akkor figyelembe kell venni, hogy az oldaltermék tisztaságának van egy felső határa, aminél nagyobb tisztaság nem érhető el [4]. Olyan esetekben alkalmazható ilyen berendezés, ahol az oldaltermék nagy tisztasága nem előírás. Például ha a szétválasztandó elegyben B egy reagens és az oldalterméket újra felhasználjuk, nem szükséges a nagy tisztaság. Az oldaltermés kolonna esetében a legfontosabb tervezési paraméterek a tányérszám és a betáplálás helye [3].

3.3.3. TERMIKUSAN CSATOLT KOLONNA KONSTRUKCIÓK

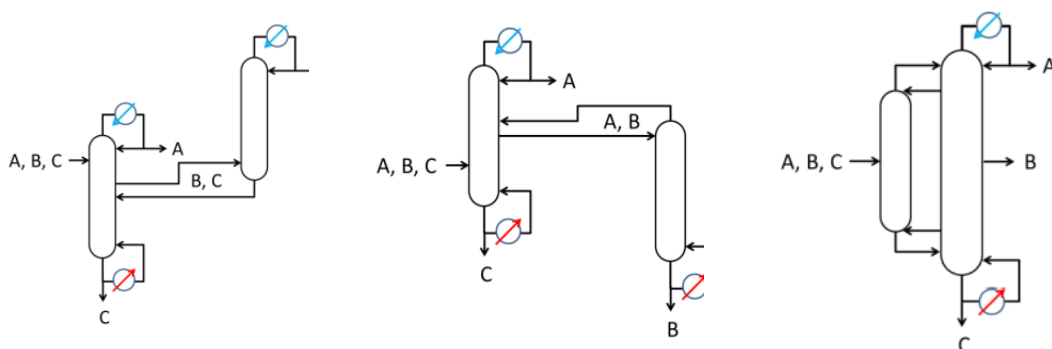
A termikusan csatolt rendszer, egy olyan több oszlopból álló rendszer, melyekben az egyes oszlopokhoz tartozó hőcserélőkben közölt hő egy része keresztülhalad több oszlopon is [10]. Ebbe a kategóriába tartozik a Petlyuk-kolonna, oldalsztripperes kolonna, az oldalkolonnás elrendezés. Az osztófalas kolonna is ebbe a kategóriába sorolható. Különböző elrendezések a 3.3. ábrán láthatók. A komponensek legnagyobbtól a legkisebb illékonyságúig A, B, C jelölést kaptak, ahol „A” komponens forráspontja a legkisebb.

Az oldalkolonnás elrendezés esetében gőz halmazállapotban veszünk el oldalterméket a fő kolonnából, amit aztán betáplálunk a kondenzátorral ellátott segédkolonnába. Az oldalkolonna betáplálása túlnyomórészt „B” és „C” komponensekből áll, termékként „B” komponens az, amit elveszünk. Az oldalkolonna aljából folyadékáram vezet vissza

a fő kolonnába. Három komponenst tartalmazó elegy szétválasztásakor a betáplálás helye az oldalsó elvétel fölött helyezkedik el [10].

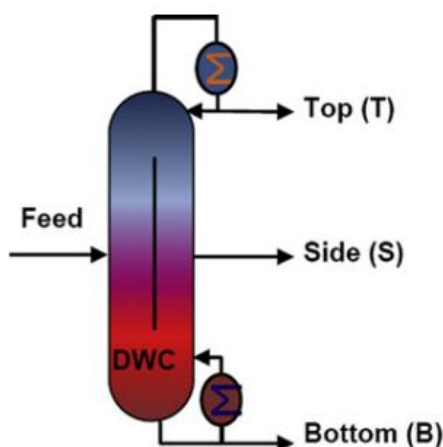
Az oldalsztripperrel ellátott kolonna konstrukció esetében ugyancsak oldaltermék elvétele történik a fő kolonából, viszont ebben az esetben folyadék halmazállapotban, nem gőz formájában. Ezt a folyadék ezután bekerül egy visszaforralóval ellátott segédoszlopba. Az oldalsztripper betáplálása ebben az esetben többnyire „A” és „B” komponensek elegye. Az oldalsztripper visszaforralójából „B” komponenst veszik el termék-ként, az oldalsztripper tetején pedig a gőzt vezetik a fő kolonnába.

A Petlyuk-kolonna két részből épül fel, egy előfrakcionálóból és egy fő rektifikáló toronyból áll. Az előfrakcionálót úgy lehet felfogni, mint egy, a 3.3.1. szekcióban leírt kéttermékes kolonnát, amiből mind a felső és alsó terméket bevezetjük a fő kolonnába. A fejtermék „A” és „B” elegye és gőz halmazállapotú, a fenéktermék „B” és „C” elegye és folyékony halmazállapotú. A Petlyuk kolonna esetében a fő kolonna egy oldaltermékes kolonna [3, 6, 7]. A két-tornyos elrendezésben csak egy kondenzátor és visszaforraló van. Az előfrakcionáló reflux árama a fő kolonnából érkező folyadék és a kiforralást (boil-up) a fő kolonnából elvett gőz adja. Az elrendezés hátránya a szerkezet és a szabályozás komplexitása, ami a több szabadsági fok következménye [6]. Előnye az alacsonyabb energiaigény és, hogy kevesebb hőcserélő szükséges a működéshez [6, 7].



3.3. ábra: Termikusan csatolt rendszerek sematikus ábrái.
Balról jobbra: oldalkolonnás elrendezés, oldalsztripperes elrendezés, Petlyuk-kolonna [10]

3.3.4. OSZTOTT TERŰ VAGY OSZTÓFALAS KOLONNA

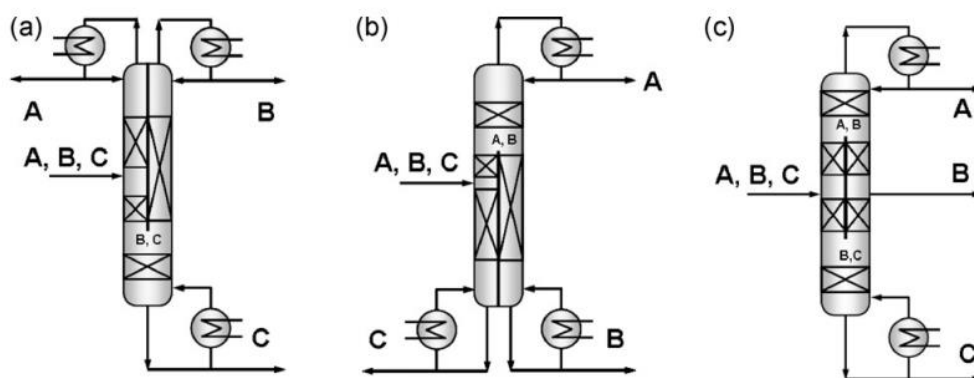


3.4. ábra: Osztófalas kollona sematikus rajza (DWC: dividng-wall column Feed: betáp; Top: fejtermék; Side: oldaltermék; Bottom: fenéktermék) [9]

Az osztófalas kolonnát úgy lehet elképzelni, mint egy Petlyuk-kolonna egy héjon belül történő megvalósítását. Említésre méltó, hogy Petlyuk és társai 1965-ös cikkükben már elméleti szinten foglalkoztak ezzel a szerkezeti modellel rektifikáló tornyok számára [7]. Az osztófalas kolonna elvi vázlata a 3.4. ábrán látható. Egy osztófalas kolonnában az oszlopteret két részre osztják egy függőleges válaszfal beépítésével. A fal elválasztja egymástól a betáplálási zónát és az (oldal)elvérteli zónát, azaz az osztófalas kolonnát úgy is föl lehet fogni, mint egy olyan

Petlyuk-kolonnát, amiben az előfrakcionálót beépítették a fő kolonna belsejébe. A pusztán oldaltermékes, osztófal nélküli kolonna konstrukciót befolyásolja, hogy elkerülendő a betáplálási áram és az oldalelvétel közvetlen keveredése [3]. Az oszloptér kettéosztásával elérhető, hogy a betáplálási áram és az elvétel között közvetlen keveredés ne történjen. Ez növeli a berendezés hatásfokát, tehát egy energetikai szempontból kedvezőbb szerkezetet kapunk [8]. A fal két oldalán létrejön a betáplálás oldal (feed side) és az oldalelvételi rész (side stream section). Az osztófal betáplálási oldalán a többkomponensű elegy legnehezebb (legkisebb illékonyságú) és legkönnyebb (legnagyobb illékonyságú) elemének leválasztása történik. Az osztófal az illékonyabb komponenst a kolonna teteje felé irányítja, a másikat pedig a torony feneke irányába. Az osztófal oldalelvételi oldalán a többihez képest közepes forráspontú/illékonyságú komponens elkülönül és nagy tisztaságú oldaltermékként hagyja el a kolonnát [9]. A hagyományos desztillációs eljárásokhoz képest az osztófalas kolonna alkalmazásával akár 25-30%-os energiamegtakarítás is elérhető [9].

A 3.5. ábra szemlélteti az osztófalas kolonna egyes konfigurációit, és, hogy melyik többkolonnás eljárásnak feleltethetők ezek meg. Belátható, hogy osztófalas kolonnával egy héjon belül egyesíteni lehet a többoszlopos termikusan csatolt rendszereket, amiket a 3.3.3. szekcióban részletesen ismertettem.



3.5. ábra: A háromkomponensű elegyek szétválasztására alkalmas osztófalas kolonna elrendezések: a) oldalkolonnás, b) oldalsztipperes, c) Petlyuk elrendezések [11]

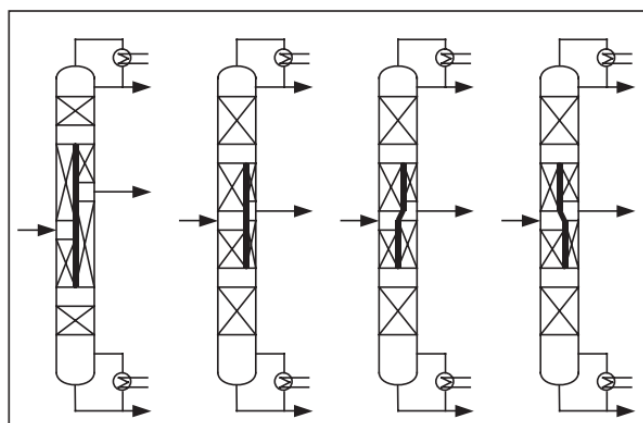
3.3.5. SZERKEZET

A hagyományos kolonnákhoz hasonlóan az osztófalas kolonna belső szerkezete és két nagy csoportra osztható, lehet tányéros vagy töltelékes. Ezen a téren nincs különbség szerkezeti szinten. A kolonnák átmérője jellemzően a 0,1-10 méter tartományba esik a magasságuk pedig elérheti a 100 métert is [12].

Tányéros esetben az osztófal képes szerkezeterősítő feladatot ellátni. Mivel a fal megfelel a távolságot a szemközti falak között, így a tányérokat tartó oszlopszerkezetek mérete csökkenthető [12]. Töltelékes esetben elkerülendő, hogy a töltelék közvetlenül érintkezzen a torony falával vagy az osztófallal. Erre azért van szükség, hogy elkerülhető legyen a túlzott fali áramlás (wall flow) vagyis a falon történő lefolyása folyadéknak, ami káros hatással lenne a szeparációs műveletre [12]. Ebben az esetben a fal behegesztése a lehető legnagyobb körültekintéssel kell, hogy történjen. A falnak ideális esetben teljesen laposnak kell lennie, tehát nem lehetnek benne hullámok vagy kitüremkedések, annak érdekében, hogy elkerüljük az érintkezést a töltelékkel [12].

A kolonnán belül az osztófal lapos, vékony fémlemez(ek)ből áll [11]. Az osztófalat többnyire hegesztéssel rögzítik a torony belsejében, ahol a kötés a torony fala és a lemez széle között történik kialakításra [11]. A fal beépítésénél a legfontosabb szempont, hogy a hegesztett kötést úgy kell létrehozni, hogy ne alakulhasson ki fali áramlás, mivel ez a termék összetételére negatív hatást gyakorolhat [11]. Egy további hátránya a hegesztésnek, hogy összeszerelés után maradó feszültség alakulhat ki a szerkezetben a nem egyenletes hűlés következtében.

Egy alternatíva a hegesztett osztófalra a MONTZ által kidolgozott egymásra pakolható, kisebb lemezelemekből felépülő osztófal [11, 12], ami egy hegesztésmentes konstrukció. Ebben az esetben az osztófal kisméretű, egységnyi méretű és kis vastagságú lemezelemekből építhető fel, amiket egymásra és párhuzamosan egymás mellé lehet helyezni. A legnagyobb előnye ennek a megoldásnak, hogy képes alkalmazkodni a kolonna átmérőjében gyakran bekövetkező egyenetlenségekhez. További előnye, hogy az összeszerelés gyorsabb és a fal esetleges javítása is egyszerűbb [12]. További előny a hegesztett fallal szemben, hogy egyszerűbb az alkalmazkodás egyes egyedi eljárásokhoz, például olyan esetben, amikor a betáplálás és az oldalelvétel eltérő magasságban történik, a fal nem középen helyezkedik el, hanem valamilyen meghatározott arányban osztja meg a kolonna belső terét vagy olyan esetben ahol az osztófal helyzete változik a torony magasságának függvényében. Ezeket az eseteket a 3.6. ábra illusztrálja.



3.6. ábra: Az osztófal különböző pozicionálási lehetőségei

Balról jobbra: a betáplálás és az oldalelvétel eltérő magasságban; a fal nem középre pozicionálása radiálisan; a fal változó pozicionálása tengelyirányban [12]

3.3.6. AZ OSZTÓFALAS KOLONNA ALKALMAZÁSÁNAK HÁTRÁNYAI

Osztófalas kolonna alkalmazásakor a lehetséges problémák a következők [11]:

- A többtornyos elrendezéssel szemben, ahol minden toronyban külön állítható az alkalmazott nyomástartomány, osztófalas kolonna esetében csak egyféle lehet. Ennek az eredménye nagyobb hőmérsékletkülönbség a kondenzátor és a visszaforráló között
- Többkolonnás esethez képest az osztófalas kolonna magassága nagyobb. Olyan esetekben, ahol korlátozott hely áll rendelkezésre függőleges irányban, ez problémát jelenthet
- Olyan esetben, ha a kémiai reakciók a torony aljában alacsony forráspontú komponens létrejöttéhez vezetnek, illetve ha a reakciók miatt a torony tetejében magas forráspontú komponens keletkezik, az kizárja az osztófalas kolonna alkalmazását, mivel ekkor az oldaltermék összetétele nem lesz megfelelő

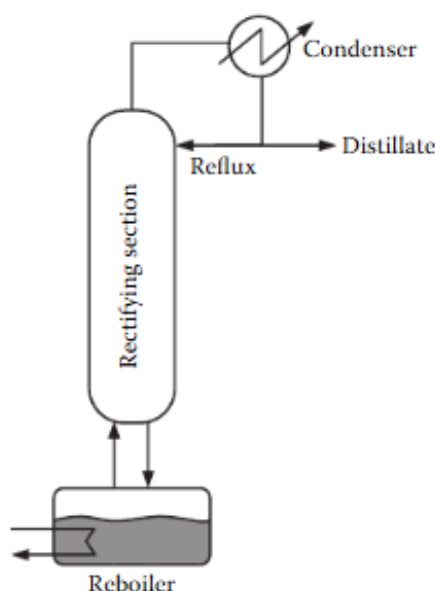
3.4. Félfolyamatos desztilláció

Szakaszos desztilláció és rektifikálás (batch distillation, röviden BD) esetében a betáplált keverék meghatározott adagokban, úgynevezett sarzsokban, folyadékutánpótlás kerül feldolgozásra. A berendezést a 3.7. ábra mutatja be. Rektifikáláskor a forralás hatására képződő gőz a toronyban felfelé, a kondenzátorban már lecsapódott és refluxként a toronyba visszavezetett folyadékfázissal ellenáramban halad. A kondenzátort elhagyó folyadék azon részét, ami nem része a refluxnak párlatként összegyűjtik [2]. Az üstben található folyadék mennyisége az eljárás során folyamatosan csökken. Egy sarzs feldolgozásának végeztével általában üst maradék szükséges.

Ennek az okai a következők [13]:

- Amennyiben a visszaforráló fűtése csőköteges vagy csőkígyós kialakítású hőcserélővel történik, akkor ezeket mindig folyadéknak kell beborítani
- Ha valamilyen oldott anyag van a folyadékban aminek a megnövekedett koncentrációja viszkozitásnövekedést vagy kiválások, szilárd fázis megjelenését okozná a maradékban, ami a folyadék túlzott besűrűsödéséhez vezetne.

Szakaszos eljárást akkor alkalmazunk, ha viszonylag kevés anyagot dolgozunk fel és azt élesen akarjuk szétválasztani vagy olyan esetekben, amikor a feldolgozandó elegy összetétele gyakran eltér egymástól [2].



3.7. ábra: A szakaszos rektifikáló oszlop elvi vázlata [17]

Félfolyamatos desztilláció vagy rektifikálás esetén (semi-batch distillation, röviden SBD) a betáplált elegy egy része folyamatosan kerül betáplálásra az eljárás során. Fontos kikötni, hogy az itt tárgyalt félfolyamatos desztilláció esetén az eredeti elegyével megegyező összetételű a betáp, ami bekerül a kolonnába. Ebben eltérhet más félfolyamatos eljárásoktól. Például az extraktív desztilláció esetében egy új komponenst táplálunk be, vagy szakaszos reaktív desztilláció esetében az egyik reagenst táplálhatjuk be folyamatosan [14]. A rendelkezésre álló irodalom a félfolyamatos desztilláció területén rendkívül korlátozott, olyannyira, hogy az irodalomkutatás következő része minden olyan cikket tartalmaz, ami ezzel a kérdéssel, akár csak érintőlegesen, foglalkozott a kutatásom megkezdését megelőzően.

Atanasijevic és társai félfolyamatos kolonnák vezérlésével foglalkoztak [15]. A cikk metil- alkohol-víz elegy félfolyamatos desztillációjának modellezését tárgyalja. Emelítést tesznek arról, hogy a félfolyamatos desztilláció egyes előnyei a szakaszossal szemben például a megnövekedett termelékenység és az, hogy adott állandó szint biztosított a

visszaforralóban, ami állandó párolgási térfogatáramot biztosít [15]. Ez a mű főként irányítástechnikai szempontból közelíti meg a félfolyamatos desztilláció témáját, csak érintőlegesen beszél magáról a desztillációs folyamatról.

Ibrahim és Zaini [16] etanol és víz szétválasztását vizsgálták félfolyamatos desztillációval. A kísérleteket egy tányéros belső szerkezetű 10 tányért tartalmazó kolonnával végezték. Három betáplálási helyet vizsgáltak: a torony aljában az 1. tányéron, a torony közepén az 5. tányéron és a torony tetején a 10. tányéron. Amikor a betáplálás középen vagy alul történt, akkor közel ugyanakkor volt az etanoltartalma a desztillátumnak és nagyobb, mint akkor, amikor a torony tetején történt a betáplálás [16]. Továbbá az üstmaradékban abban az esetben volt a legkisebb az etanol mennyisége, amikor a betáplálás a torony közepén történt [16].

Láng és Hégely [13] különböző betáplálási módokat vizsgáltak cikkükben. A vizsgálatokat Chemcad professzionális folyamatszimulátorral végzett szimulációkon keresztül végezték. Az összehasonlítás alapja a fajlagos energiaigény (specific energy demand, SED) és a hasznos komponens kinyerése volt. Két fő esetet vizsgáltak: 1. víz („A” komponens, illékonyabb) és morfolin („B” komponens, kevésbé illékony) elegye és 2. aceton („A” komponens, illékonyabb) és víz („B” komponens, kevésbé illékony) elegy. Az 1. esetben a B komponens, a 2. esetben az A komponens kinyerése volt a cél.

Három elrendezést vizsgáltak [13]:

- Szakaszos eljárás ahol a maradékot a visszaforralóban hagyták és friss elegyet töltöttek rá, addig folytatva ezt, míg el nem érték az előírt B komponens koncentrációt (BD1)
- Szakaszos eljárás ahol a visszaforralót szakaszonként leengedik és a maradékot külön összegyűjtik. Több szakasz lezajlását követően a maradékokat újra desztillálják (BD2)
- Félfolyamatos eljárásban működtetett szakaszos kolonna:
 - Az elegy egy része folyamatosan betáplálásra kerül a visszaforralóba (SBD1)
 - Az elegy egy része folyamatosan betáplálásra kerül a közvetlenül a kolonna egy pontjában (SBD2)

- Az elegy egy része folyamatosan betáplálásra kerül a kolonnába, változó magasságban, a kolonnában található vegyület aktuális összetételéhez igazodva egyre magasabb pontban (SBD3)

A cikkben az 1. elegyre a legkisebb fajlagos energia igény és legnagyobb kinyerés az SBD3 esetben volt, a második legjobb pedig az SBD2 eset volt. Ugyanakkor az SBD3 annak ellenére, hogy jóval összetettebb, nem sokkal volt jobb, mint az SBD2. Előny volt mindhárom félfolyamatos betáplálás esetében, a BD2 szakaszos esettel szemben, hogy kisebb volt a holtidő, tehát az az idő, amit a művelet kiegészítő lépéseire fordítunk a termelésen kívül, mint a betöltés, felfűtés vagy az üst leeresztése. A 2. elegy esetében a fajlagos energiaigény és kinyerés különbségei kisebbek voltak a különböző eljárások között, úgy, hogy a félfolyamatos eljárások mutatkoztak jobbnak. A cikk arra a következtetésre jutott, hogy a felsorolt félfolyamatos eljárásokkal növelhető a szakaszos kolonnák termelékenysége, a holtidő csökkenthető [13].

Hégely és Láng és Ferchichi egy további cikkben vizsgálták a félfolyamatos desztillációt [14]. Cikkükben két- és háromkomponensű elegyek szakaszos és félfolyamatos rektifikálását vizsgálták egyenes és fordított szétválasztási sorrendben és összehasonlították ezeket energiaigényük alapján egymással és a folyamatos rektifikálással. Ez a kutatás a Chemcad professzionális folyamatszimulátor segítségével valósult meg. A kétkomponensű elegy diklórmetán (az „A” tehát illékonyabb komponens) –aceton („B” tehát a nehezebb komponens) volt, a háromkomponensű elegy esetében az elegy pedig, csökkenő illékonyaságú sorrendben: n-hexán (A), n-heptán (B), n-oktán (C).

A háromkomponensű elegy szétválasztása esetében összehasonlítottak a folyamatos (CD), szakaszos (BD) és kétféle félfolyamatos eljárási módszert (SBD1 és SBD2). Ebben a kutatásban az SBD1 és SBD2 ugyanazokat az eljárásokat takarja, mint a korábban tárgyalt cikk esetében [13]. Az SBD1 esetben a betáplálás helye az üst, SBD2 esetben pedig a torony oldala. A háromkomponensű elegy feldolgozásakor a betáplálás és a sarzs is ekvimoláris összetételű volt. Az előírt tisztaság mindhárom komponensre 95 mol%. Az előírt kinyerés a hexánra 98%, a heptánra 89% az oktánra 97,3% volt. A kinyeréseket a folyamatos eljárás alapján határozták meg. Fontos megjegyezni, hogy a fajlagos energiaigények összehasonlításakor a felfűtést nem vették figyelembe.

Az egyenes szétválasztás esetben az tenzió szerint növekvő sorrendben történt az egyes komponensek kinyerése, fordított esetben pedig fordítva. Az egyenes esetben a fajlagos energiaigény szempontjából az SBD2 volt a legkisebb energiaigényű a CD folyamathoz képest, ezt követték a BD majd az SBD1 konfigurációk. Szakaszos és félfolyamatos esetben nem volt lehetséges elérni ugyanazt az n-heptán kinyerést mint folyamatos eljárásnál. A fordított esetben ugyancsak az SBD2 volt a legközelebb a CD konfigurációhoz. SBD1 meghaladta a BD fajlagos energiaigényét. Az fordított és egyenes szétválasztás eljárásokat egymással összehasonlítva az derült ki, hogy fordított esetben a folyamatos és szakaszos eljárás fajlagos energiaigénye nagyobb lett, mint az egyenes sorrend esetében, de mind SBD1 és SBD2 esetében csökkent ez az érték. A fajlagos energiaigény különbség SBD2 és BD között nagyobb volt fordított esetben.

4. ALAPADATOK ÉS MODELL

4.1. A berendezést leíró adatok

Mivel jelen munka egy kutatás következő eleme, ezért a kolonna jellemzői megegyeznek a korábbi számítások kiinduló adataival [14]. A desztillációs folyamat atmoszferikus nyomáson játszódik le. A korábbi szimulációk a Chemcad 7.0. programban történtek. Különbséget képez, hogy abban az esetben a félfolyamatos eljárást a programba beépített kész szakaszos kolonna modul alkalmazásával szimulálták. Az én esetemben, mivel osztófalas kolonna modellezésére nincs modul a programban, ezért egy többtor-nyos rendszerrel modelleztem a vizsgált berendezést.

Az üst térfogata $V_{\text{üst}} = 10 \text{ (m}^3\text{)}$, a maximális folyadékmennyiség benne $V_{\text{sarzs}} = 8 \text{ (m}^3\text{)}$. Az elméleti tányérszám $N = 30$. Ez az oszlop modellezési módja miatt tér el a korábbi $N = 32$ esettől, mivel a mi esetünkben a kondenzátort és a visszaforralót külön-külön modelleztük, a Chemcad sajátossága, hogy ezeket hozzáadja a tányérszámhoz egyébként. A kondenzátor hold-up $V_{\text{hold}}^{\text{kond}} = 0,08 \text{ (m}^3\text{)}$ a torony hold-up $V_{\text{hold}}^{\text{torony}} = 0,08 \text{ (m}^3\text{)}$. A betáplálás folyadék halmazállapotban, forrponi hőmérsékleten történik, a betáp térfogatáram $F = 1 \left(\frac{\text{m}^3}{\text{h}}\right)$. A kezdeti állapotban az üst a teljes sarzsot tartalmazza, benne a folyadékszint közel állandó.

A szimuláció során a fűtési teljesítmény $\dot{Q} = 2872 \left(\frac{\text{MJ}}{\text{h}}\right)$. Tehát ez az a teljesítmény amivel az üstöt fűtik. Mivel a célom a szakaszos eljárásnál jobb hatásfokú berendezés tervezése, ezért ez a teljesítmény megegyezik a korábbi adatok közül [14] az egyenes, szakaszos desztillációs eljárásra jellemző értékkel. Önmagában az ez alapján számolt energiaigény nem jelentene semmit, ezért az irodalomban [14] elvégzett szakaszos és folyamatos eljárások Chemcad szimulációi során kapott eredményekkel fogom őket összehasonlítani.

4.2. A művelet

A berendezés elvi rajzát az 4.1. ábra tartalmazza, a tervezett eljárás egyes elméleti lépéseit pedig az 4.1. táblázat foglalja össze. A berendezés folyamatábráját az 4.2. ábra tartalmazza. A feladatokat a Chemcad folyamatszimulációs szoftverkörnyezetben az SCDS Column modul alkalmazásával oldottam meg, dinamikus szimulációval.

Lépés-szám	Cél	Betáp	1. fejtermék a lépés végén	2. fejtermék a lépés végén	Üst tartalma a lépés végén
1	Felfűtés	Nincs	-	-	A, B, C
2	A kinyerése	Nincs	A	A	B, C
3	B és C gyártás	Van	A	B	C

4.1. táblázat: Az eljárás elméleti lépései

A művelet elméletben három lépésből áll. 1. Felfűtés, 2. hexán kinyerés és a 3. heptán és oktán gyártás. A szimuláció során el kellett térnem az elméleti műveleti lépésektől és beiktatnom egy átmeneti lépést a 2. és 3. lépések közé, az optimálisabb eredmények érdekében. A 2. lépés végére az üstben található hexán mennyisége 2 (mol%) alá csökken. A szimuláció esetében ez körülbelül $t = 104$ (min) időben következett be. Ehhez képest 15 perccel később indult el a betáplálás, annak érdekében, hogy a toronyban lévő hexán minél nagyobb része bekerüljön a szedőtartályba és ne csökkentse a kinyert heptán tisztaságát. 15 perccel a betáplálás megkezdése után a 2. oldalról lekapcsoltam az „A” komponens gyűjtőtartályáról a „B” komponens szedőjére. Ezt az időt ugyancsak úgy választottam meg, hogy minél kevesebb hexán kerüljön a heptán tartályba és minél kevesebb heptán a hexán tartályba.

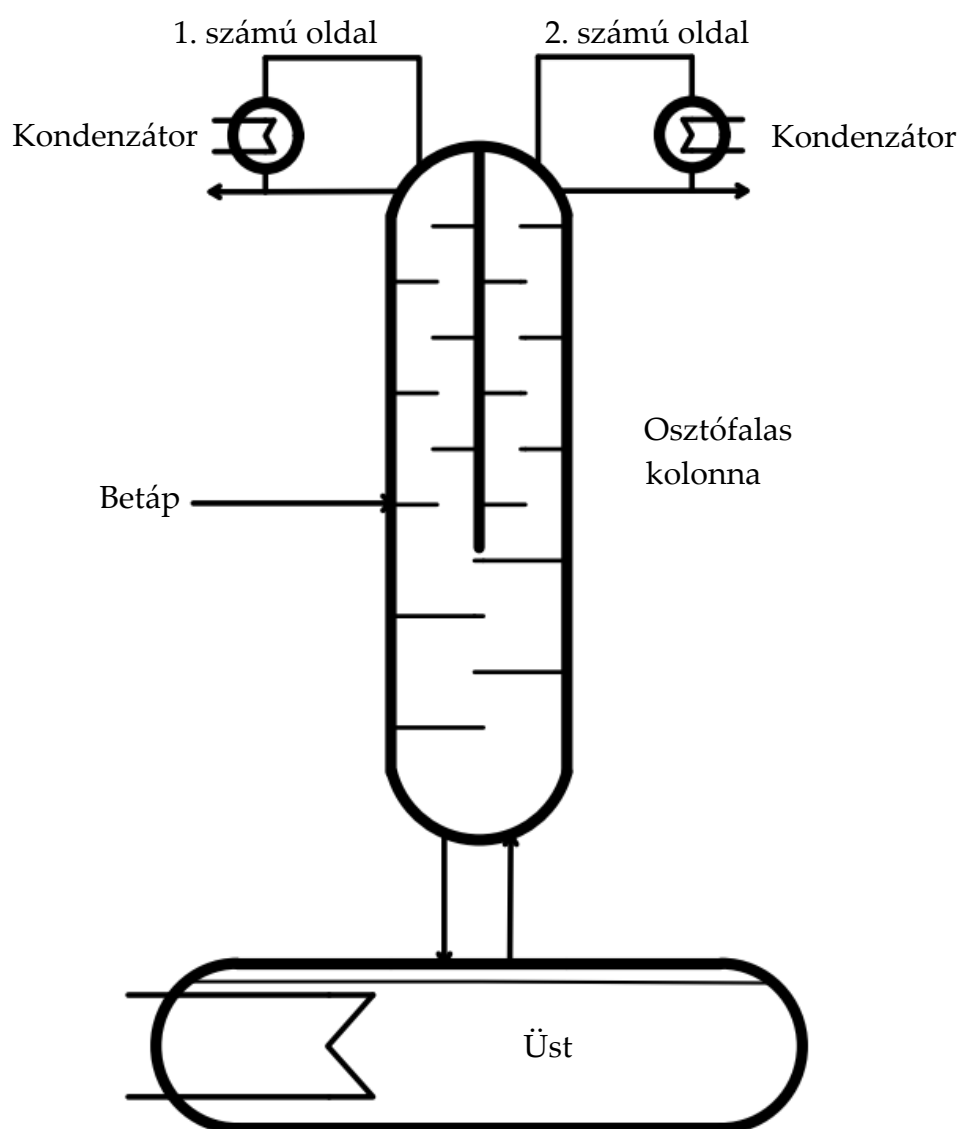
Az első és második lépésben a kolonna szakaszos berendezésként üzemel, betáplálás a harmadik lépésben történik. A berendezés több részből épül fel. A szakaszos eljárással

megegyezően alul az üst helyezkedik el, ide töltik be a sarzsot. Az üst fölött van a kolonna, benne az osztófallal. A kolonna tányéros belső szerkezetű, elrendezése a 3.3.3. szekcióban leírt oldalkolonnás berendezésre hasonlít.

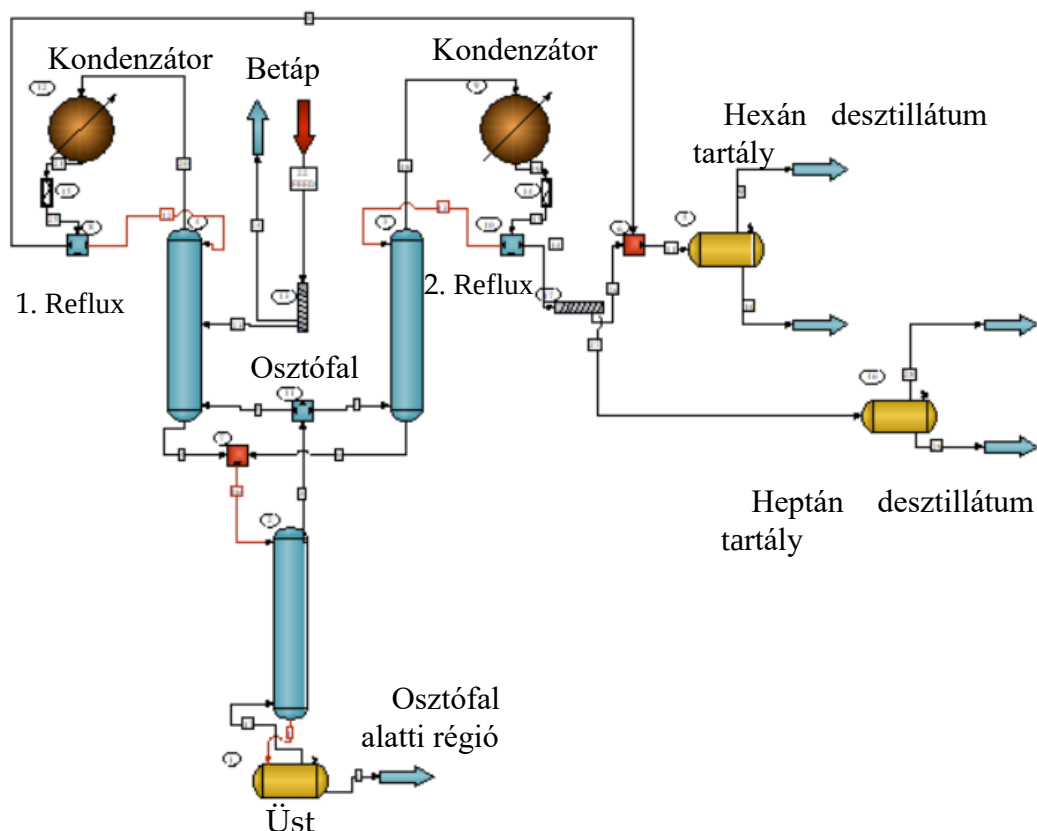
A betáplálás a kolonna oldalába történik. Ez az irodalomban leírt SBD2 konfiguráció alkalmazásának eredménye. Azért ezt választottam, mivel a korábbi kutatások során ez volt az energetikailag kedvezőbb konfiguráció. A betáplálás a fal alsó éle felett történik. A kolonnához két kondenzátor kapcsolódik.

Ez egy összetett, sok szabadságfokú rendszer. A szimulációk során ezek közül az osztófal helyzetét, hosszát, a betáplálás helyét és a két refluxarányt és azok hatását vizsgáltam.

Ahogy az a 4.2. ábrán látható, a Chemcad programban a kolonna belső terét három részre szedtem. Az osztófal két oldalát és az osztófal alatti régiót külön tornyokként modelleztem az SCDS column modul alkalmazásával. A folyadék és gőzáramok megosztását Stream Mixer és Stream Divider modulok végzik a refluxarányokat ugyancsak Stream Divider modulokkal adtam meg. A kondenzátorokat hőcserélőkkel, a Simple Heat Exchanger modul, az üstöt és a desztillátum gyűjtő tartályokat Dynamic Vessel modullal modelleztem. A betáplálás időpontját és a gyűjtőtartályok betáplálási áramai közti váltást Time Switch irányítja, míg a refluxarányok műveleti lépésenként váltását Ramp modul végzi.



4.1. ábra: A berendezés sematikus rajza



4.2. ábra: A berendezés számítógépes modellje

4.3. A folyadékelegy tulajdonságai.

A feldolgozott háromkomponensű elegy az üstben és a betápban egyaránt egyenlő arányban van jelen. Az elegy felépítése: A: n-hexán, B: n-heptán, C: n-oktán. Az előírt tisztaság mindhárom esetre 95 mol%. A vonatkozó adatok és az előírt kinyeréseket az 4.2. táblázat tartalmazza. A megcélzott kinyerések szintén a korábbi kutatási eredmények alapján lettek megállapítva [14]. A szimuláció során a Soave-Redlich-Kwong (SRK) termodinamikai modellt alkalmaztam.

Anyag	x_i	Kinyerés (%)
n-hexán	0,333	98
n-heptán	0,333	89
n-oktán	0,334	97,3

4.2. táblázat: Az elegy összetétele

5. TECHNOLÓGIAI ADATOK MEGÁLLAPÍTÁSA

5.1. A torony belső fizikai paraméterei

Az osztófal hossza a kolonna tetejétől számítva $H_w = 22$ tányérig tart. A betáplálás helye $f = 18$ tányér. Ezeket a paramétereket úgy kaptam meg, hogy a fajlagos energiaigény minimalizálására igyekeztem optimalizálni őket, a korábbi kutatások alapján felvett kezdeti értékekből kiindulva. A fal „vízszintes helyzetét” tehát azt, hogy az osztófal milyen arányban osztja meg a gőzárásokat az 5.1. egyenlet alapján becsültem meg. Az egyenlet levezetését az M1 melléklet tartalmazza.

$$\sigma_1 = \frac{1}{1 + \frac{(R_2 + 1) \cdot D_2}{(R_1 + 1) \cdot D_1}} \quad (5.1.)$$

Az 5.1. egyenlet alapján a gőzelosztási arány kizárólag a refluxarányoktól és a desztillátum áramoktól függ. A képlet arra vonatkozik, hogy az osztófal milyen arányban kell, hogy megossza a belső teret adott refluxarányok mellett a megfelelő tisztaságok biztosítása érdekében. A D_2 és D_1 áramokat konstansnak vettem, az értékeiket az osztófalas kolonna szimulációból kaptam. Az elosztási arány így csak a refluxarányoktól függ. Magát a σ_1 -t az 3. lépés refluxarányai szerint számoltam, tehát $R_1 = 27$ és $R_2 = 6$ alkalmazásával, illetve a szimulációból $D_1 = 2,38 \left(\frac{\text{kmol}}{\text{h}}\right)$ és $D_2 = 4,48 \left(\frac{\text{kmol}}{\text{h}}\right)$ értékek felvételével.

Ekkor az eredményem $\sigma_1 = 0,68$. Tehát az osztófal úgy helyezkedik el, hogy az 1. oldal javára $\frac{6,8}{10} : \frac{3,2}{10}$ arányban osztja fel a belső teret. A végső esetben nem egészen ezt az értéket alkalmaztam. Figyelembe véve, hogy a kolonnákat kézzel hegesztik össze, így figyelembe kell venni egy emberi tényezőt is, továbbá azt, hogy ez csak egy közelítő képlet, ami iránymutatásként szolgál csupán, a $\sigma_1 = 0,66$ értéket választottam, tehát a gőzárásokat kétharmad-egyharmad arányban osztva meg.

5.2. A refluxarányok megállapítása

Az alkalmazott refluxarányok a folyamat előre haladtával lépésenként módosulnak, alkalmazkodva a kolonnában lejátszódó folyamatokhoz. Minden lépésre külön optimalizáltam őket.

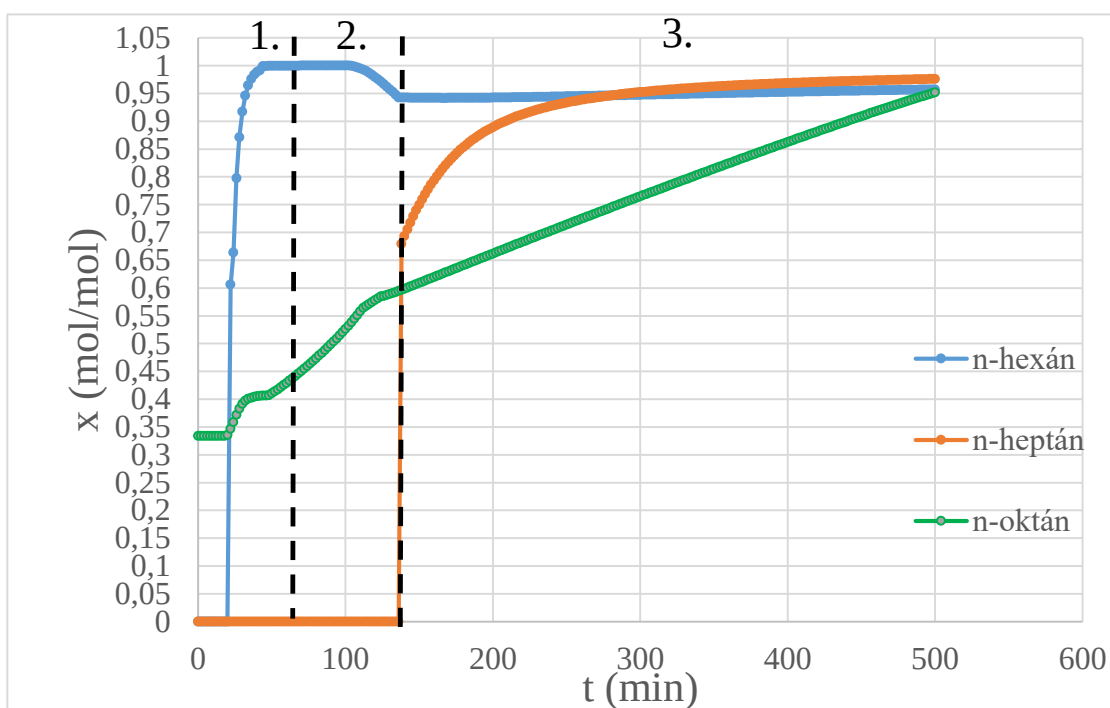
A felfűtés stádium során (1. lépés) teljes reflux van az osztófal mindkét oldalán. A 2. lépésben a tisztán hexán kitermelés közben mindkét oldalon $R_1 = R_2 = 6,45$. Az indexelés megegyezik a 4.1. és 4.2. ábrákon alkalmazott indexekkel. Tehát a torony bal oldala az 1. és a jobb oldala a 2. Az alkalmazott refluxarányt úgy kaptam, hogy az irodalomban [14] a hexán kinyeréshez alkalmazott refluxarányt vettem kiindulási alapnak, majd ezt csökkentve addig, amíg elértem a legkisebb olyan értéket, ahol még megfelelő volt a terméktisztaság.

Az átmeneti lépés közben a két refluxarány már eltér egymástól. Az „A” komponens toronyból való eltávozását követően, tehát jelen esetben $t = 104$ (min), az $R_1 = 27$ -re módosul. A nagy refluxarányra azért van szükség, mert ezt követően már csak a betáplálásból beérkező „A” komponens kinyerése történik, a magas refluxarány garantálja, hogy nem szennyezzük be heptánnal a kinyert hexánt, figyelembe véve, hogy a szétválasztásnak a betáplálási pont és az oszlop feje közötti rövidített szakaszon kell megtörténnie. Ez a refluxarány a művelet végéig megmarad.

A 2. oldalon eltérő időben, a gyűjtőtartályok közötti átkapcsolás időpontjában $t = 134$ (min) változik a refluxarány. Mivel az osztófal ezen oldalán a 3. lépésben közel teljes mértékben csak heptán van jelen, itt csökkenteni lehet a refluxarányt. Tehát itt $t = 134$ (min) $R_2 = 6$ módosítottam a refluxarányt.

5.3. Tisztaságok és kinyerések:

A tisztaságokat és azok változását az egyes desztillátumokban, illetve az üstmarradékban, az 5.1. ábra mutatja be. A folyamat egyes lépéseit a megfelelő számokkal jelöltem.



5.1. ábra: A termék tisztaságok változása időben

A folyamat egyes lépései jól kivehetők. A kezdeti viszonylag gyors felfűtés után, a 2. lépésben szinte teljesen tiszta hexánt nyerünk ki, körülbelül a 115. percig. Ekkor, mivel az üstből szinte a teljes kiindulási hexán mennyiség eltűnt, a hexán koncentrációja lecsökken, majd, a betáplálás miatt, beáll a kívánt 95%-os tisztaságra, amit az R_1 refluxarány és a betáplálásból származó hexán tart fent. Ez a tisztaság a folyamat végéig közel állandó marad.

A harmadik lépésben a fal két oldalán eltérő termékeket kapunk. Mivel a 2. oldalon a harmadik lépésben csak heptán termelése történik, ezért az azt szemléltető görbe gyorsan megközelíti a cél értéket, majd ellaposodik. Végeredményben, a vizsgált szimulációban a heptán kissé túl tiszta lett: 95%-os célérték helyett 97%-ot értem el. A 2. oldal mindezek alapján egyértelműen további optimalizálásra szorul.

Az oktán koncentrációja az első két lépésben egy lépcsőzetes jelleget mutat, a harmadikban pedig lineárishoz közeli jellegű. Az üstben kezdetben jelen van mindhárom komponens, viszont a harmadik lépés során már csak egy közel kétkomponensű elegy tölti ki az üstöt és ekkor csak a heptán koncentráció csökkenése hat a tisztaságra. Ez az oka a meredekségkülönbségnek is a 2. és 3. lépés között. A művelet végén 95%-os tisztaságú oktánt kaptam

Az egyes komponensekre vonatkozó kinyeréseket az 5.2. képlettel számoltam. A megállapított kinyeréseket pedig az 5.1. táblázat tartalmazza.

$$\eta = \frac{n_i^{deszt} \cdot x_i^{deszt}}{n_i^{sarzs} \cdot x_i^{sarzs} + (x_i^{táp} \cdot F \cdot t_{táp})} \quad (5.2.)$$

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

5.1. táblázat: Kinyerés eredmények

Az eredmények szerint egyik előírt kinyerést sem sikerült elérni a paraméterek. A legjobb eredményt a „C” komponens az oktán adta, de ez is 7%-al eltér a kívánt eredménytől. A második legjobb az „A” komponens, a hexán, a legrosszabb eredményt pedig a „B” komponensre, a heptánra kaptam. Fontos megjegyezni, hogy, ha a berendezés hosszabb ideig működik, az inkább a hexán kinyerésének kedvez, ha pedig minél rövidebb ideig, akkor az az oktánnak. A heptán kinyerése minden esetben nehézkes, de hosszabb folyamatoknál az is jobb. A kinyerésekből egyértelműen az következik, hogy további vizsgálatok szükségesek. Meg kell találni azt a paraméterezést, ahol kedvező kinyerések kaphatók.

5.4. Energiaigény:

5.4.1. FAJLAGOS ENERGIAIGÉNY

A félfolyamatos kolonna fajlagos energiaigényét az 5.3. képlet szerint definiálom.

$$SED = \frac{\dot{Q} \cdot (t_{telj} - t_{fűt})}{n_{üst} + F \cdot t_{táp}} \quad (5.3.)$$

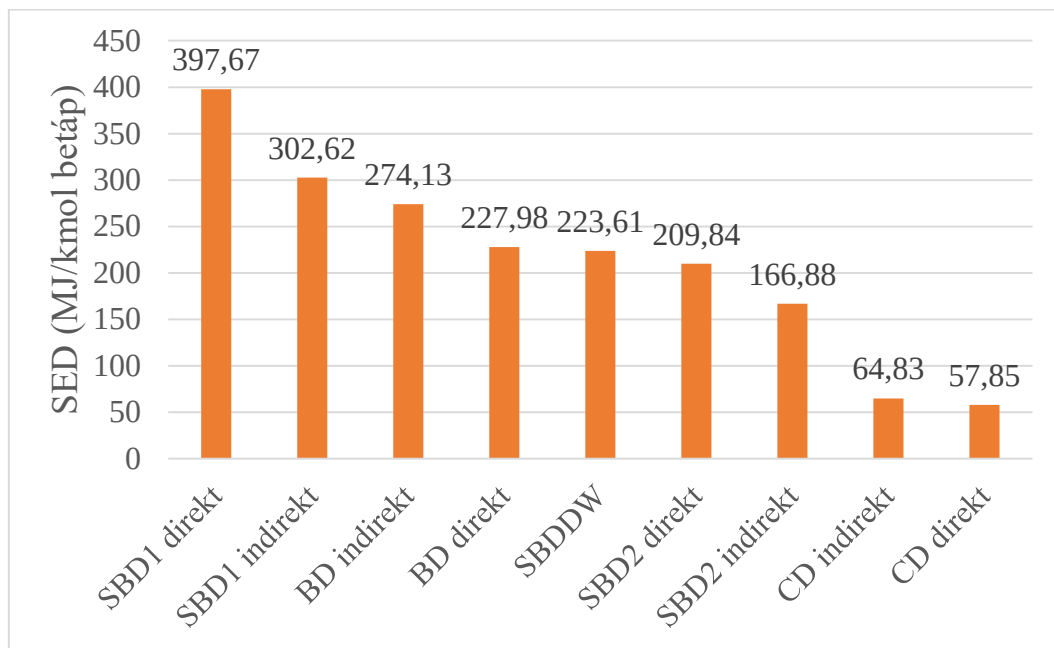
Az osztófalas kolonna esetében az eljárás teljes ideje $t_{telj} = 8.333$ (h), a felfűtés ideje $t_{fűt} = 0.6667$ (h), az idő, ami alatt betáplálás történik $t_{táp} = 6,35$ (h), a betáplálás mólárama pedig $F = 6,862 \left(\frac{\text{kmol}}{\text{h}} \right)$. A fűtési időt azért vonom ki a teljes eltel időből, mivel az irodalomban ezt a energiaigényét nem vették figyelembe [14].

Az eredményt és az összehasonlítási alapul szolgáló eredményeket az 5.2. táblázat tartalmazza. A konzisztencia érdekében ugyanazokat a jelöléseket használtam, mint a korábbi kutatás [14]. A CD a folyamatos, a BD a szakaszos eljárás, az SBD1 a félfolyamatos, amikor a betáplálás az üstbe történik, az SBD2 pedig a félfolyamatos eljárás, ahol a betáplálás a torony oldalába történik. Az osztófalas eljárást, az elnevezési rendszer alapján, SBDDW névvel láttam el.

Csillaggal jelöltem minden olyan értéket, ami korábbi kutatás eredménye. A 5.2. ábra oszlopdiagram formájában foglalja össze ezeket.

Megnevezés	SED Direkt (MJ/kmol)	SED Indirekt (MJ/kmol)
CD*	57,85	64,83
BD*	227,98	274,13
SBD1*	397,67	302,62
SBD2*	209,84	166,88
SBDDW	223,61	

5.2. táblázat: A fajlagos energiaigények



5.2. ábra: A fajlagos energiaigények összehasonlítása

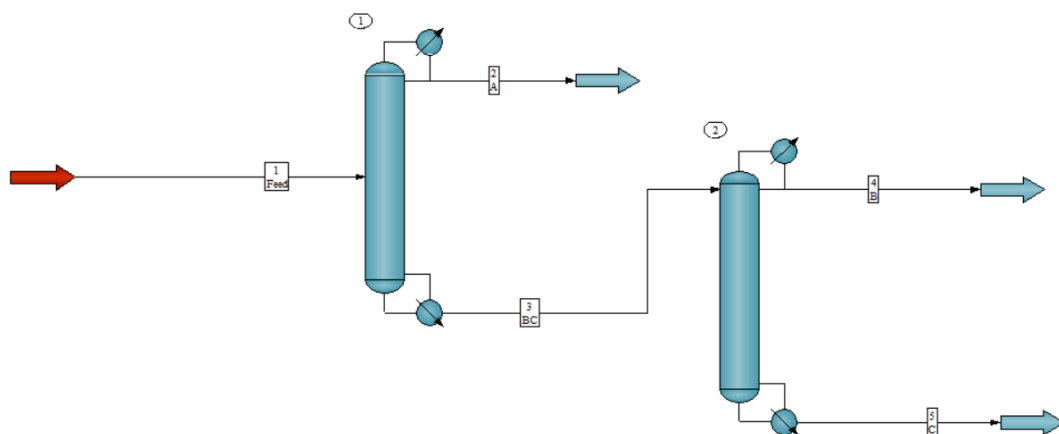
Az adatokból már egyértelműen látszik, hogy már a jelenlegi paraméterek mellett is jobb eredményt értem el fajlagos energiaigény tekintetében az osztófalas elrendezés alkalmazásával, mint a szakaszos és SBD1 eljárások.

5.4.2. ELMÉLETI MINIMÁLIS ENERGIAIGÉNY

A kiindulási elegy szükséges elméleti minimális energiaigényt a 5.4. képlet segítségével határoztam meg. A számítást nem a félfolyamatos rendszerre végeztem el, hanem ugyanazon elegy folyamatos rektifikálással, egyenes sorrendben történő szétválasztásának szimulációjával. Az eljárás folyamatábráját az 5.3. ábra mutatja be. A betáplálás helyei tornyonként: $f_1 = 14$ és $f_2 = 17$, a refluxarányok pedig $R_1 = 1,63$ és $R_2 = 1,79$.

$$SED_{min} = \frac{1}{F} \cdot \left[-H_{be} + T_0 \cdot S_{be} + \sum_{i=1}^k (H_{ki,i} - T_0 \cdot S_{ki,i}) \right] \quad (5.4.)$$

Ennek az eredménye $SED_{\min} = 2,916 \left(\frac{\text{MJ}}{\text{kmol}} \right)$. Ez az eredmény láthatóan egy nagyságrenddel eltér az szimulációkban kapott értékektől. A különbség jól szemlélteti, hogy mennyire aránytalan a valós energiaigénye a desztillációs eljárásoknak. A veszteségesség okai a következők: hidraulikus veszteségek, véges hajtóerők és irreverzibilis keveredés a vegyületben [2].

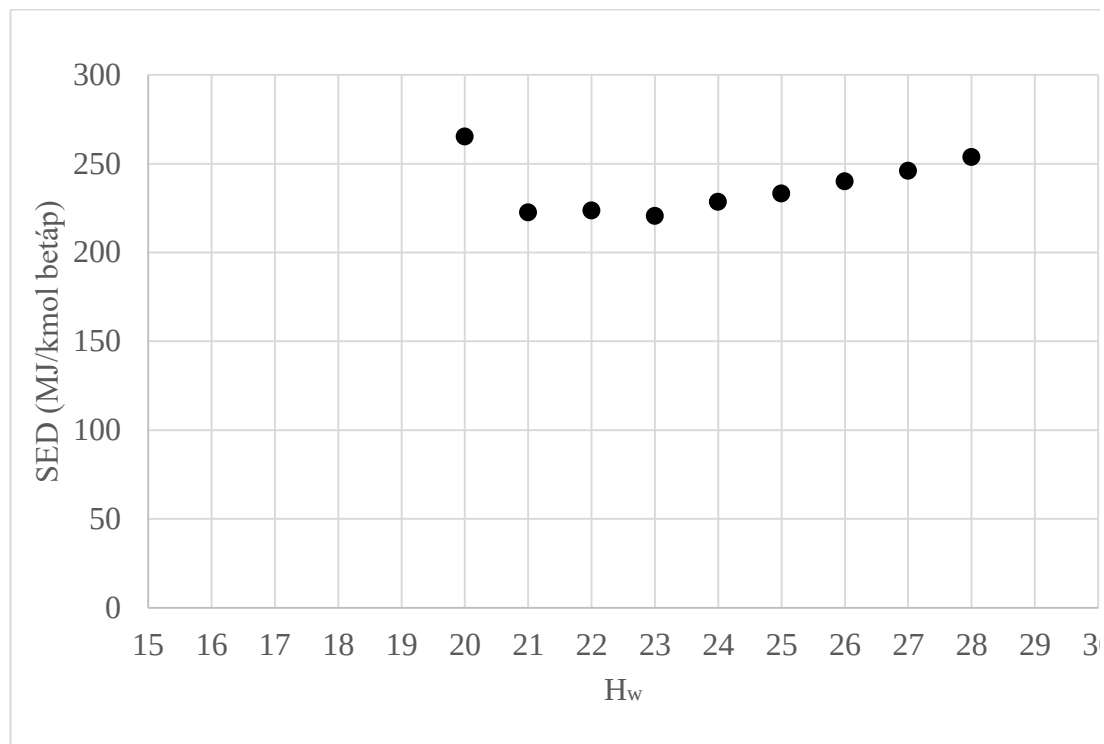


5.3. ábra: A folyamatos szétválasztás folyamatábrája

5.4.3. FAJLAGOS ENERGIAIGÉNYT BEFOLYÁSOLÓ TÉNYEZŐK

A fajlagos energiaigény értékét a kolonna több paraméterre befolyásolja. A legnagyobb hatást gyakorló tényező a szimulációk során műveleti idő volt. A felfűtés és a hexán ki-nyeréséhez szükséges idő, tehát az 1. és 2. lépések ideje, nem változik meg számottevően a különböző szimulációs paraméterek változtatásakor. A 3. lépést több tényező módosíthatja: a fal hossza, a betáplálás helye és a 2. oldali R_2 refluxarány.

Az első tényező, aminek a hatását megvizsgáltam a fal hossza volt, állandó refluxarányok és betáplálási hely mellett. A betáplálás minden esetben a fal alsó éle fölött történt, ugyanis, ha alatta lenne, akkor az osztófal elveszti funkcióját, mert mindkét oldalon ugyanolyan folyamatok játszódna le. A fal magassága és a fajlagos energiaigény közötti kapcsolatot az 5.4. ábra ábrázolja.



5.4. ábra: A fal magassága és a fajlagos energiaigény kapcsolata

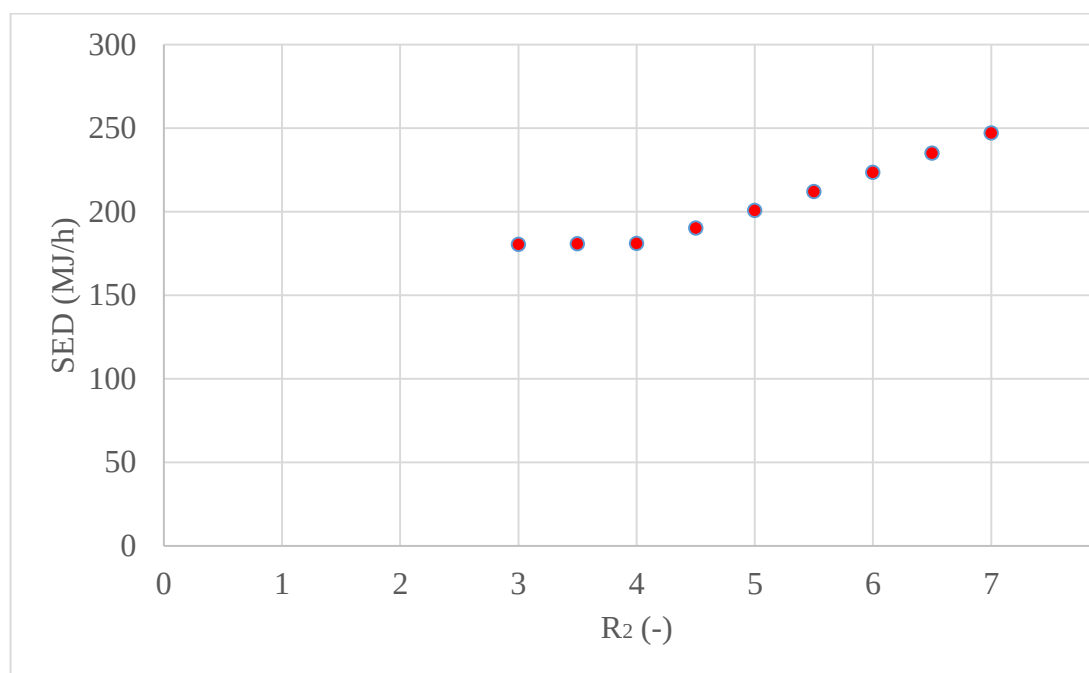
A vizsgált tartomány a 19-28 tányérok között van. Annak érdekében, hogy szemléletesebb legyen az ábra, a független változó 15-től kezdődik 0 helyett. Azért ezen a tartományon történtek a számítások, mert a 18. tányér a betáplálás helye, ami jelen esetben rögzített. Ha a betáplálás a fal alá kerül, az osztófal elveszti funkcióját. A 28-as érték pedig azért a felső határ, mivel e fölött már teljes hosszában megosztva lenne a belső tér, ami megint csak egy teljesen más eljárást eredményezne.

A választott $H_w = 22$ tányér falmagasság közel optimális, viszont látható, hogy ugyanilyen paraméterek mellett, a fal hosszának egy tányérral történő növelése csökkentene a fajlagos energiaigényt. Végül azért maradtam a 22-nél, mert a cél, hogy energiahatékonyabb legyen a berendezés a szakaszos eljárásnál már arra is teljesül. Ugyanakkor ebből a példából látható, hogy akár kis módosításokkal, további csökkentés is lehetséges.

A fal magasságának további növelése monoton növekvő SED értékeket okoz a magassággal arányosan. A fal magasságának csökkenése ugyancsak a fajlagos energiaigény növekedését okozza, viszont mivel a betáplálás közel van a fal alsó éléhez, ebben az irányban a fajlagos energiaigény növekedése is drasztikusabb. $H_w = 19$ értéknél már felborul a folyamat, nem működik. A fal magasságának változtatása minden más esetben nem gyakorolt jelentős hatást a tisztaságok értékére.

Abban az esetben, ha állandó $H_w = 22$ értékkel számoltam és a betáplálási helyet emeltem a kolonna fal mentén, az nem változtatott a tisztaságokon és a fajlagos energiaigény eredményeken. Viszont ez nem zárja ki azt, hogy a betáplálási hely változtatásával ne lehetne jelentősebb hatást elérni, csak nagy valószínűséggel szükséges a refluxarányokat a betáplálási ponttal együtt módosítani.

A fajlagos energiaigény érzékenységét a 2. oldali R_2 refluxarányra is vizsgáltam. Ezt a függést az 5.5. ábra szemlélteti.



5.5. ábra: A fajlagos energiaigény függése R_2 -től a választott refluxarány környezetében

Az 5.5. ábrán az látszik, hogy a választott $R_2 = 6$ refluxarány környezetében lineáris jelleget mutató összefüggés figyelhető meg a fajlagos energiaigény és a 2. refluxarány között. Tehát a refluxarány további csökkentésével a művelet még energiatakarékosabb lehet. $R_2 = 4$ alá csökkentve ez a trend megváltozik. Ekkor már több termék tisztasága sem megfelelő. A hexán koncentrációja lecsökken 95% alá, az oktán pedig túl tiszta lesz. Alacsonyabb refluxarányoknál emiatt valószínűleg módosítani kell a kolonna további paraméterein, hogy tovább csökkenthessük a fajlagos energiaigényt.

6. ÖSSZEFOGLALÁS:

- A munkám során, a világon elsőként, egy félfolyamatos osztófalas kolonna szimulációját vizsgáltam. A számításokhoz a Chemcad szoftvert alkalmaztam. A folyamat egy háromkomponensű ekvimoláris folyadékelegy szétválasztására irányult. A tervezett osztófalas berendezés képes volt egy időben több komponens elvételére a kolonnából az osztófal két oldalán, a betáplálás oldalán n-hexán, a másikon n-heptán komponenseket gyártva.
- A folyamat három lépésből állt: felfűtés majd n-hexán komponens termelése, ezt követően n-heptán és n-oktán komponens kinyerése n-hexán további termelése mellett.
- Az osztófalra vonatkozó gőzelosztási hányados, tehát hogy milyen arányban osztja meg a kolonna belső terét és a gőzáramot $\frac{6,8}{10} : \frac{3,3}{10}$ lett, úgy hogy a nagyobb részarány tartozik az 1. számú oldalhoz, a kisebb a 2. számúhoz. Mivel az alkalmazott képlet csak közelítő eredményt tudott adni, így ezt $\frac{6,6}{10} : \frac{3,3}{10}$ arányra, tehát kétharmad-egyharmados osztásra módosítottam.
- A művelet fajlagos energiaigénye $223,61 \left(\frac{\text{MJ}}{\text{kmol feed}} \right)$ volt, ami javulást jelentett egy megegyező paraméterekkel rendelkező szakaszos berendezéssel szemben, de nem érte el az SBD2 berendezés értékeit. A fajlagos energiaigény még nagy valószínűséggel jelentős mértékben csökkenthető a refluxarányok és az osztófal pozíció optimalizálásával.
- Az előírt tisztaságokat mindhárom komponensre elértem a folyamat során, mitöbb a heptán esetében az előírtnál kis mértékben túl tiszta desztillátumot kaptam. Ugyanakkor egyik komponens esetében sem sikerült elérni az előírt kinyeréseket. A legjobb eredményt az oktán adta, a legrosszabbat a heptán. A műveleti lépések hossza hatással van a kinyerésekre. Ezen a területen is további paraméter változtatás szükséges a megfelelő eredmények elérése érdekében.
- Az elvégzett szimulációk bizalomra adnak okot és igazolják a létjogosultságát egy félfolyamatos osztófalas kolonnának, de mindenképp több munkára van szükség a berendezés tökéletesítése érdekében.

6.1. Jövőbeli tervek:

- A művelet optimalizálása, az előírt kinyerések teljesítése
- Egy másik konfiguráció alkalmazása a félfolyamatos osztófalas elrendezés tesztelésére, ahol a fal csak egy szakaszon osztja meg a torony belső terét és nem éri el a berendezés tetejét
- Amennyiben a megfelelő paramétereket megtaláltam, egy valós berendezés tervezése és az itt elért eredmények labormérésekkel történő igazolása

6.2. Summary

Keywords: semi-batch distillation, dividing wall column, dynamic simulation

In this work a semi-batch dividing-wall distillation column configuration was studied. The column was modelled using Chemcad professional flowsheet simulation software. The goal of the process was the separation of an equimolar ternary mixture, composed of n-hexane(A), n-heptane(B), n-octane(C). The designed system was able to produce two components as distillate at the same time, only using a single column. Component “A” was produced on the left side, component “B” on the right side of the dividing wall. The process was initially made up of 3 steps. 1. heat up, 2. production of most volatile component and step 3 the production of the other two components, while still producing the lightest one. But in the final simulation an in-between step was needed to ensure that the prescribed purities can be reached.

The wall split ratio was determined to be $\frac{6,6}{10} : \frac{3,3}{10}$. The specific energy demand was $223,61 \left(\frac{\text{MJ}}{\text{kmol feed}} \right)$ which makes this process more efficient than using batch distillation, but not as efficient as the SBD2 configuration. It is possible to further reduce the demand with further optimization of the configuration.

All prescribe purities were reached during the process, but the middle component distillate ended up being too pure. On the other hand, none of the prescribed recoveries were achieved, with octane coming the closest. Further optimization of the parameters is needed. The work proved that the subject was worthy of future research.

7. FELHASZNÁLT FORRÁSOK

[1] Cséfalvay Edit, Mika László Tamás, Vegyipari művelettan, ELTE Kémia Intézet, Budapest (2008)

[2] Fonyó Zsolt, Fábry György, Vegyipari művelettan alapismeretek, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest (2004)

[3] Szabó László, Osztott terű rektifikáló kolonna dinamikai vizsgálata, Diplomadolgozat, Pannon Egyetem, Folyamatmérnöki Intézeti Tanszék, Veszprém (2009)

[4] Konstantinos N. Gilnos, Michael F. Malone, Design of Sidestream Distillation Columns, Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development, 24, 822-828, (1985)

[5] C. Gutierrez-Antonio and A. Jimenez-Gutierrez, Design of Side-Stream Azeotropic Distillation Columns, Chemical Engineering Research and Design, 85, 1384-1389, (2007)

[6] Erik A. Wolff, Sigurd Skogestad, Operation of Integrated Three-Product (Petlyuk) Distillation Columns, Industrial & Engineering Chemistry Research, 34, 2094-2103, (1995)

[7] F.B. Petlyuk, V.M. Platonov, D.M. Slavinskii, Thermodynamically optimal method of separating multicomponent mixtures, International Chemical Engineering, 5, 555-561, (1965)

[8] Szabó László, Németh Sándor, Szeifert Ferenc, Osztott terű rektifikáló kolonna modellezése és stacioner vizsgálata, Informatika korszerű technikái, Dunaújváros, ISBN 978 963 991538 1 (2010)

[9] Anton A. Kiss, Servando J. Flores Landaeta, Carlos A. Infante Ferreira.: Towards energy efficient distillation technologies Making the right choice, Energy, 47, 531-542, (2012)

[10] Szabó László, 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)

[11] N. Asprion, G. Kaibel, Dividing wall columns: Fundamentals and recent advances, Chemical Engineering and Processing, 49, 139-146, (2010)

[12] B. Kaibel, H. Jansen, E. Zich, Z. Olujic, Unfixed dividing wall technology for packed and tray distillation columns, Distillation & Absorption 2006, IChemE Symposium Series 152, 1-9 (2006)

[13] Peter Lang, Laszlo Hegely, Different Feeding Policies for Semi-Batch Distillation, Chemical Engineering Transactions, 69, 439-444 (2018)

[14] Mariem Ferchichi, Laszlo Hegely, Peter Lang.: Devrease of energy demand of semi-batch distillation policies, Energy & Environment, 32(8), 1479-1503 (2022)

[15] M. Atanasijevic, R. Karba, F. Bremsak, T. Recelj, J. Golob, L. Fele, Comparison of three different approaches to the semi batch distillation column control design, In 'Simulationstechnik. Informatik-Fachberichte' 109 (szerk.: D.P.F. Moller) Bad Münster am Stein-Ebernburg, Németország, 1985. szeptember 24.–26., 464–468. Springer, Berlin, Heidelberg, (1985)

[16] Nur Atirah Ibrahim, Muhammad Abbas Ahmad Zaini, Parametric investigation of fixed-tray, semi continuous distillation column for ethanol separation from water, Jurna Teknologi, 78, 85-92 (2016)

[17] Kim-J. K., U. Diwekar: Chapter 5 Batch Distillation In 'Batch Processes' (szerk.: E. Korovessi, A.A. Linninger) CRC Press, Boca Raton, 107-150 (2005)

8. MELLÉKLETEK

8.1. M1 melléklet, az 5.1. képlet levezetése

A refluxarányok kifejezhetők a gőzáramok és desztillátum áramok segítségével a következő módon:

$$R_1 = \frac{V_1}{D_1} - 1 \quad (8.1.)$$

$$R_2 = \frac{V_2}{D_2} - 1 \quad (8.2.)$$

Ezeket rendezve kifejezhetők a gőzáramok:

$$(R_1 + 1) \cdot D_1 = V_1 \quad (8.3.)$$

$$(R_2 + 1) \cdot D_2 = V_2 \quad (8.4.)$$

A megoszlási hányados azt fejezi ki, hogy mekkora része jut a gőzáramnak a fal adott oldalára. Ha tehát azt nézem, hogy az 1. oldalra milyen arányban jusson az áram:

$$\sigma_1 = \frac{V_1}{V_1 + V_2} \quad (8.5.)$$

Az m.5. egyenletbe behelyettesítve az m.3. és m.4. egyenleteket:

$$\sigma_1 = \frac{(R_1 + 1) \cdot D_1}{(R_1 + 1) \cdot D_1 + (R_2 + 1) \cdot D_2} \quad (8.6.)$$

Ezt már csak rendezni kell, hogy megkapjuk az 5.1. egyenletet:

$$\sigma_1 = \frac{1}{1 + \frac{(R_2 + 1) \cdot D_2}{(R_1 + 1) \cdot D_1}} \quad (8.7.)$$