

Zárójelentés a „Különleges elválasztó műveletek, vegyipari rendszerek és folyamatok szintézise” című kutatásról (KM2: 46282)

A kutatás kezdetén a következő célkitűzéseket terveztük megvalósítani:

1. Vegyes egészértékű nemlineáris programozás algoritmusainak fejlesztése
2. Új rendszermodellek kifejlesztése
3. Különleges elválasztó műveletek kísérletes és szimulációs analízise, új szintézismodellek felállítása
4. Különleges elválasztó műveletek modelljeinek rendszermodellbe illesztése

Témakörök szerinti bontásban a következő eredményeket sikerült elérni:

1. Vegyes egészértékű nemlineáris programozás algoritmusainak fejlesztése:

Egy szakaszos extraktív desztillációs folyamat megvalósíthatósági tanulmánya a profiltérképek elemzésén alapul. A szinguláris pontok és a szeparatrixok léte és helye a műveleti paraméterek értékétől függ.

Grafikus eszközök használhatók arra, hogy megállapítsuk ezen paraméterek értékét. Ha szinguláris pont nem található grafikus eszközökkel, az még nem garantálja, hogy ezek valóban nem léteznek. Többváltozós nemlineáris egyenletrendszer gyökének megtalálására irányuló megbízható számításokkal ezen pontok meghatározhatóak. Ez intervallum-aritmetikával megoldható.

Egy intervallum-aritmetikán alapuló branch-and-prune optimalizáló eljárást alkalmaztunk a szinguláris és bifurkációs pontok megtalálására. Ezzel az eljárással egy térkép minden szinguláris pontja megtalálható. A bifurkációs pontok alapján meghatároztuk a szakaszos extraktív desztillációs folyamat megvalósíthatósági tartományát: minimális reflux áramát és egyéb korlátait.

Ez utóbbi módszert szeretnénk kiterjeszteni a folyamatos extraktív desztilláció megvalósíthatósági vizsgálatára is.

A témakörben 4 év alatt összesen 11 konferencia előadást tartottunk, és 2 idegen nyelvű cikket megjelentettünk.

2. Új rendszermodellek kifejlesztése:

A strukturális multiplicitás jelentős hatása van a folyamatszintézisben a folyamatok leírására használt MINLP modellek megoldhatóságára. Az MINLP modell tartalmazhat olyan beépített redundanciát, mely nem feltétlenül származtatható a szuperstruktúra multiplicitásából. Célunk olyan metodológia kidolgozása volt, amely lehetőséget nyújt arra, hogy a strukturális redundancia negatív hatása kiküszöbölhető legyen.

Bevezettük az alap GDP reprezentáció (BGR) fogalmát. A BGR logikai kifejezéseket tartalmaz, a folyamatról rendelkezésre álló mérnöki ismeretek alapján megalkotható. Definiáltuk az alap MINLP reprezentáció (BMR) fogalmát; ez a BGR alapján építhető fel, annak logikai kifejezéseit algebrai egyenletekké alakítva.

Definiáltuk az MINLP reprezentáció folytonos és bináris multiplicitásának fogalmát. Megállapítottuk, hogy ha a szupergráf (a szuperstruktúrát reprezentáló gráf) strukturális redundanciával rendelkezik, akkor az abból származtatott BMR binárisan redundáns lesz. Ellenkező irányban a reláció nem érvényes: a BMR bináris multiplicitásából nem feltétlenül következik a szupergráf strukturális redundanciája.

Definiáltuk az ideális és a binárisan minimális MINLP reprezentáció fogalmát. Az ideális MINLP reprezentáció csak a megengedett struktúrákat reprezentálja. A binárisan minimális MINLP reprezentáció minimális számú bináris változót használ a struktúrák megkülönböztetésére. Különböző MINLP reprezentációk megoldhatóságát vizsgáltuk közepes és nagyméretű szintézis problémákon. Megállapítottuk, hogy egy reprezentáció idealitása és bináris minimalitása javítja a megoldhatóságot, és csökkenti a megoldáshoz szükséges időt.

Definiáltuk a szuperstruktúráknak egy új típusú gráf megadását, melyet R-gráfnak neveztünk el.

A kidolgozott alapfogalmak felhasználására részletes metódust készítettünk, majd ezeket konkrét esetekre elemeztük.

Például új esetalapú metódust dolgoztunk ki desztilláció kolonnák szuperstruktúráinak megválasztására.

Új R-gráf alapú szuperstruktúrát és MINLP reprezentációt dolgoztunk ki desztilláló kolonnák optimalizálására. Az új reprezentáció minimális számú bináris változót tartalmaz, és sokkal jobb numerikus tulajdonságokkal rendelkezik, mint a szakirodalomban közölt MINLP modellek.

A kutatást tovább folytattuk, jelenleg olyan szoftveren dolgozunk, amely képes automatikusan létrehozni egy adott probléma binárisan minimális és ideális reprezentációját.

Új, csaknem lineáris MINLP modellt alkottunk anyagcserélő hálózatok optimalizálására, végül kidolgoztunk egy hibrid metódust anyagcserélő hálózatok optimalizálására.

Kidolgoztunk egy hibrid metódust anyagcserélő hálózatok optimalizálására, amely automatikusan végrehajtható. Az eljárás új integer cutok és korlátok bevezetésén alapszik, annak érdekében, hogy lokális optimumban való megrekedést elkerüljük. Amennyiben az MINLP megvalósíthatatlan megoldást talál, az algoritmus új kezdeti megoldásból indul, egyébként az addigi legjobb megoldást választja kiindulópontként. Ennek következményeként az MINLP modell minden iterációban változik. A leállási kritérium akkor teljesül, amikor a megoldás egy előre meghatározott környezetébe kerül a célként kitűzött értéknek.

Kidolgoztunk egy új MILP modellt többtermékes szállítási és elosztási probléma optimalizálására. Az új modellt ipari partnerünk, a SABMiller Europe problémáján teszteltük, és összehasonlítottuk más irodalmi modellekkel. Egy megvalósíthatóság-ellenőrző eljárást dolgoztunk ki, mely olyan nagyméretű problémák esetében alkalmazható, amikor bináris változók csak a célfüggvényben fordulnak elő. A megvalósíthatóság ellenőrzése egy speciális relaxált LP megoldásán keresztül történik; szükség esetén az eljárás rámutat a legvalószínűbb fizikai okra, melynek a megvalósíthatatlanság köszönhető.

A témakörben 4 év alatt összesen 8 konferencia előadást tartottunk, 2 cikket megjelentettünk és egyet közlésre elfogadtak.

3. Különleges elválasztó műveletek kísérletes és szimulációs analízise, új szintézismodellek felállítása:

A szakaszos extraktív desztilláció alkalmas eljárás azeotróp elegyek szétválasztására. Ezek a folyamatok szakaszos rektifikálóban és szegényítő oszlopban is elvégezhetőek; megvalósíthatósági vizsgálatokat azonban még nem közöltek a szakirodalomban.

Részletes megvalósíthatósági vizsgálatot dolgoztunk ki a szakaszos extraktív sztripperben végrehajtott heteroazeotróp desztillációra. A módszert teszteltük részletes számítások segítségével. A köztes forrpontú oldószerrel kapott eredményeket közöltük a következő rendszerekre: 1) metanol/toluol (minimális forrpontú azeotróp) elválasztása trietil-amin szolvens alkalmazásával; 2) kloroform/etil-acetát (minimális forrpontú azeotróp) elválasztása 2-klór-bután szolvens alkalmazásával.

Elemeztük a műveletek gazdaságosságát. Vizsgáltuk a szakaszos extraktív desztilláció megvalósíthatóságát könnyű oldószer alkalmazásakor és új struktúrát javasoltunk arra az esetre, amikor az oldószer könnyebb az azeotróp összetételű elegynél. Ekkor a szolvens teljes mennyiségét szakaszos módon előzetesen a forralóba töltjük, és a szétválasztandó elegyet folytonosan tápláljuk be az oszlopba. Emellett elvégeztük a szakaszos extraktív desztilláció rektifikálóban történő megvalósítási lehetőségeinek szisztematikus összehasonlító vizsgálatát. Eredményeink alapján az új konfiguráció hatékonyabb, mint a hagyományos eljárás. A megvalósíthatósági vizsgálat érzékenységvizsgálatát szigorú számításokkal validáltuk.

A reaktív desztilláció megvalósíthatósági vizsgálatát többreakciós esetre bővítettük a dimetil-karbonát átészterezésének vizsgálatával. Ehhez eddig BiphyAddIn szoftvert használtunk, de a számolás lassúsága és konvergenciaproblémák miatt jelenleg Matlab/Simulis kombináció fejlesztése folyik. A Berliini Műszaki Egyetemmel közreműködésével (DAAD program keretén belül) a 2005-ben felépített szakaszos extraktív desztilláció modelljét továbbfejlesztve, felépítettük a sztripper modelljét gPROMS környezetben, amely az oszlop felfűtését is figyelembe veszi. Az etanol-metanol-víz rendszerrel az egyetem félüzemi laborjában a modellt sikeresen validáltuk.

A témakörben 4 év alatt összesen 9 konferencia előadást tartottunk, és 4 cikket megjelentettünk.

4. Különleges elválasztó műveletek modelljeinek rendszermodellbe illesztése:

A szakaszos extraktív desztilláció különböző megvalósítható oszlopkonfigurációit részletesen vizsgáltuk, beleértve az oldószer illékonyságának hatását a műveleti tervre. Továbbfejlesztettük a szakaszos extraktív desztilláció megvalósíthatósági elméletét szakaszos reaktív és szakaszos extraktív reaktív desztillációra.

Megoldottuk a folyamatos extraktív desztilláció optimális tervezésének problémáit. Nagyszámú komponens esetén, több desztilláló oszlopot tartalmazó, nagy tényérszámmal dolgozó rektifikáló rendszerek modellezése esetén a nagyszámú nemlineáris egyenlet és azok nem-konvexitása jelentős numerikus problémákat okoz. A folyamatot leíró MINLP feladat megoldása során az NLP szolver a nagyszámú egyenlet miatt gyakran nem talál minden korlátot kielégítő megoldást. Ezért szükségessé vált, hogy a már korábban mások által MINLP feladatok megoldására kifejlesztett Outer Approximation algoritmust úgy módosítottuk, hogy azzal rendkívül összetett, sok komponenst tartalmazó, több oszlopból álló, nagy tényérszámokkal dolgozó rektifikáló rendszerek is nagy biztonsággal optimalizálhatók, beleértve az oldószer kiválasztását is. Minden iterációban az MILP alprobléma és az az alapján felépített NLP alprobléma közé beszúrtunk egy lépést, amely minden változóra kezdőértéket számít az MILP által szolgáltatott fixált bináris vektort felhasználva. A kezdőértékek számítása a problémát leíró összefüggések alapján történik. Szintén változtatás az irodalmi algoritmushoz képest, hogy az MILP alproblémák felépítésekor nem minden nemlineáris egyenletet használunk fel a lineáris becsléshez, csak azokat, amik nem járulnak hozzá a probléma nemkonvexitásához. Ezáltal elkerüljük, hogy az algoritmus fizibilis megoldásokat vágjon ki a megoldási folyamat során

A kidolgozott modellt és megoldási módszert gyakorlati célokra hasznosítottuk: olyan új módszert fejlesztettünk ki, mellyel összetett extraktív desztillációs rendszerek műveleti és elsősorban gazdasági szempontból történő vizsgálatát az optimalizálás eszközeivel végezzük. Az eljárást két különböző extraktív desztillációs rendszeren tanulmányoztuk (aceton/metanol rendszer szétválasztása víz szolvens alkalmazásával, és etanol/víz rendszer szétválasztása etilén-glikol oldószer alkalmazásával); megállapítottuk, hogy az extraktív desztilláció gazdasági értelemben stabil műveletnek tekinthető, mivel az optimális struktúra széles tartományban független marad a költségfaktorok értékétől.

A reaktív desztilláció MINLP modelljének felépítésén jelenleg is dolgozunk.

Kifejlesztettünk egy MILP modellt tengervíz sótalanító üzemek típusának, elhelyezésének és kapcsolatrendszerének szimultán optimalizálására. A modell elfogadható idő alatt nyújt optimális megoldást sok településből álló rendszerek ivóvízellátásának minimális költséggel történő biztosítására.

A témakörben 4 év alatt összesen 3 konferencia előadást tartottunk, és 3 cikket megjelentettünk.