Acta Agraria Kaposváriensis (2006) Vol 10 No 1, 177-184
Kaposvári Egyetem, Állattudományi Kar, Kaposvár
University of Kaposvár, Faculty of Animal Science, Kaposvár

Desztillációs kolonna R-gráf alapú szuperstruktúrája és MINLP modellje

Czuczai B., Farkas T., Rév E., Fonyó Zs., Lelkes Z.
Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Vegyipari Műveletek Tanszék, 1521 Budapest, Műegyetem rkp. 3.

ÖSSZEFOGLALÁS

Új modellt fejlesztettünk desztilláló oszlopok szintézisére és optimalizálására. A fejlesztés első lépéseként GDP-modellt alkottunk, amit olyan MINLP-modellé alakítottuk, amely már csak a megengedett struktúrákat reprezentálja, és minimális számú bináris változót használ a struktúrák megkülönböztetésére. A kapott MINLP-modellt összehasonlítottuk a talált irodalmi modellekkel (Viswanathan és Grossmann, 1993; Yeomans és Grossmann, 2000). Az új modell kevesebb bináris változót használ és szignifikánsabban gyorsabb.
(Kulcsszavak: MINLP, desztilláció, szuperstruktúra, folyamatszintézis)

ABSTRACT

Distillation column superstructure and MINLP-model based on R-graph representation

B. Czuczai, T. Farkas, E. Rév, Zs. Fonyó, Z. Lelkes
Budapest University of Technology and Economics, Department of Chemical Engineering

A new model has been developed for distillation column synthesis and optimization based on R-graph represented superstructure. A GDP model is generated first; this is transformed into an MINLP model which represents only the considered structures, and uses minimum number of binary variables to make distinctions between the different structures. The MINLP model is compared to literature models (Viswanathan and Grossmann, 1993; and Yeomans and Grossmann, 2000). The new model uses less number of binary variables, and is significantly faster.
(Keywords: MINLP, distillation, superstructure, process synthesis)

BEVEZETÉS

A vegyipari folyamatok tervezésekor általában a minimális költségű folyamat megtalálása a cél. Komoly ipari jelentőséggel bíró probléma desztillálókolonnákat tartalmazó folyamatok optimalizálása.

A desztillálókolonnák olyan oszlopok, melyeket többkomponensű folyadékelegyek elválasztására alkalmaznak. Az elválasztás minőségét, de a folyamat költségét is befolyásolják az üzemeltetési paraméterek. Konkrétan az oszlop tetejéről távozó pára lekondenzáltatása után kapott folyadéknak az oszlop tetejébe visszavezetett aránya - az úgynevezett refluxarány −, és az, hogy az oszlop milyen számú ún. egyensúlyi tányért tartalmaz. Ugyanolyan tisztasági követelmények mellett kisebb tányérszámhoz nagyobb refluxarány szükséges, és fordítva. A tányérszámtól függ a fix (beruházási) költség, a refluxaránytól a változó (üzemeltetési) költség. A kolonna modellezésekor az egyensúlyi tányérok létét ill. nemlétét logikai változókkal írjuk le, ezért a tervezés olyan szintézisfeladat, melyet a folytonos változók mellett egészértékű változók is jellemeznek.

A struktúraorientált folyamatszintézis lényege, hogy egyszerre optimalizáljuk a tervezési és üzemeltetési paramétereket. Ennek során először létrehozunk egy szuperstruktúrát, amely az összes, mérnöki szempontból megengedett struktúrát tartalmazza. Ezután előállítjuk a szuperstruktúra matematikai modelljét, ami általában egy vegyes egészértékű nemlineáris programozási (Mixed Integer Nonlinear Programming, MINLP) feladat. Végül ezt a matematikai modellt optimalizáljuk.

Egy MINLP-feladat általános alakja a következő:

$$\begin{aligned} &\min\left[c^T \cdot \bar{y} + f(\bar{x})\right] \\ &h(\bar{x}) = 0 \\ &g(\bar{x}) \leq 0 \qquad , \\ &A \cdot \bar{x} = a \\ &B \cdot \bar{y} + C \cdot \bar{x} \leq d \end{aligned}$$

ahol $\bar{x}$ a folytonos változók, $\bar{y}$ a bináris változók vektora, $c^T \cdot \bar{y} + f(\bar{x})$ pedig az optimalizálandó célfüggvény. Az egyenlőség típusú korlátok általában mérlegegyenleteket reprezentálnak, az egyenlőtlenség típusúak különböző, a folyamatra vonatkozó előírásokat. Az ilyen feladatok megoldásának nehézségei általában meredeken növekednek a bináris változók számával. Ezért a bináris változók számának csökkentése kulcsszerepet játszik az ilyen típusú problémák megoldási módszereinek kidolgozásakor.

Az irodalomban két MINLP modell található desztillációs kolonnák szintézisére: *Viswanathan és Grossmann* (1993), valamint *Yeomans és Grossmann* (2000) modellje. Az utóbbi közleményben egy általánosított diszjunktív programozási (Generalized Disjunctive Programming, GDP) modellt publikáltak, de GDP szolver hiányában ezt MINLP modellé alakítottuk, és ezt optimalizáltuk.

Ezek a modellek annak érdekében, hogy minden struktúra reprezentálható legyen, minden tányérhoz tartozik egy bináris változó.

Farkas és mtsai. (2004) definiálták a binárisan minimális MINLP reprezentációt, amely minimális számú bináris változót alkalmaz a struktúrák reprezentálására. Ha k darab struktúra létezik, akkor azt a legkisebb n számú bináris változót kell használni, amelyre igaz, hogy $n \geq \log_2 k$.

Munkánk célja az volt, hogy az irodalomban leírt modelleknél jobb numerikus tulajdonságokkal rendelkező modellt alkossunk, mely alkalmas rövid számítási időn belül optimális megoldást nyújtani, és ezzel részmodellként használható legyen desztilláló kolonnákat tartalmazó folyamatok szintézisénél és optimalizálásakor.

ANYAG ÉS MÓDSZER

Szuperstruktúra és R-gráf reprezentáció

Egy maximum 15 egyensúlyi tányért tartalmazó hagyományos desztillációs oszlop szuperstruktúrája látható az *1. ábrán*. Az egyensúlyi tányérokat sötétített oválisok, az egységeket téglalapok jelölik. A kis körök az input és output portok, melyeket az áramok kötnek össze. A betáplálás (Feed), a termékek (Dist és Bot), a kondenzátor (Cond), a visszaforraló (Reb) és a betáp egység állandó egységek, a többi egység feltételes. Alulról számolva egy szekció *k*-dik egységében lévő egyensúlyi tányérok száma 2^{k-1}. Ezt az elrendezést a binárisan minimális ideális MINLP reprezentáció létrehozásának érdekében alkalmaztuk. Minden egyensúlyi tányérokat tartalmazó egység mellett van egy gőz- és folyadéktovábbító egység. Ha a gőz illetve folyadékáram az egyensúlyi egységek helyett az elkerülő egységeken halad keresztül, a megfelelő egyensúlyi egység nem létezik. Ezáltal a szuperstruktúra bármely egyensúlyi tányérokat tartalmazó egysége megkerülhető.

1. ábra

A szuperstruktúra

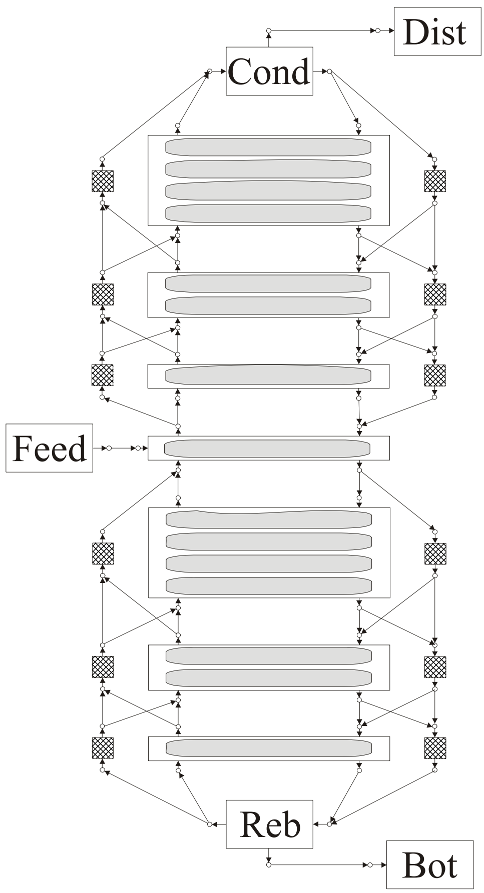

Figure 1: Superstructure

Alap GDP reprezentáció

Az alap GDP reprezentációt (Basic GDP Representation, BGR; lásd *Farkas és mtsai.*, 2004) az R-szupergráf (a szuperstruktúra R-gráfja) alapján állítjuk elő. Ez tartalmazza az egységek egyenleteit, a portok mérlegegyenleteit és a célfüggvényt. Ezeken kívül nem tartalmaz további összefüggéseket, ezért az összes megvalósítható struktúrát reprezentálja, és külön logikai változót használ minden feltételes egység jelölésére. Az egyensúlyi tányérokat tartalmazó egységek összefüggései tartalmazzák az egységhez tartozó, a fizikai-kémiai egyensúlyt leíró egyenleteket, a tömeg- és hőmérlegeket, továbbá az áramoknak és moláris entalpiáknak a koncentrációból történő számítását. A tányérok fix költségét összevonva egy külön egyenletben számítjuk ki.

$$\left[\begin{array}{ll}
Z^{U}_{s,3} & \\
\wedge & \\
V^{in,s,3}_{i} + L^{s,3}_{i,j+1} = V^{s,3}_{i,j} + L^{s,3}_{i,j} & j \in J4^{first} \\
V^{s,3}_{i,j-1} + L^{s,3}_{i,j+1} = V^{s,3}_{i,j} + L^{s,3}_{i,j} & j \in J4^{inner} \\
V^{s,3}_{i,j-1} + L^{in,s,3}_{i} = V^{s,3}_{i,j} + L^{s,3}_{i,j} & j \in J4^{last} \\
L^{out,s,3}_{i} = L^{s,3}_{i,j} & j \in J4^{first} \\
V^{out,s,3}_{i} = V^{s,3}_{i,j} & j \in J4^{last} \\
L^{s,3}_{i,j} = LIQ^{s,3}_{j} \cdot x^{s,3}_{i,j} & j \in J4 \\
V^{s,3}_{i,j} = VAP^{s,3}_{j} \cdot y^{s,3}_{i,j} & j \in J4 \\
V^{in,s,3}_{i} \cdot hV^{in,s,3}_{i} + L^{s,3}_{i,j+1} \cdot hL^{s,3}_{i,j+1} = V^{s,3}_{i,j} \cdot hV^{s,3}_{i,j} + L^{s,3}_{i,j} \cdot hL^{s,3}_{i,j} & j \in J4^{first} \\
V^{s,3}_{i,j-1} \cdot hV^{s,3}_{i,j-1} + L^{s,3}_{i,j+1} \cdot hL^{s,3}_{i,j+1} = V^{s,3}_{i,j} \cdot hV^{s,3}_{i,j} + L^{s,3}_{i,j} \cdot hL^{s,3}_{i,j} & j \in J4^{inner} \\
V^{s,3}_{i,j-1} \cdot hV^{s,3}_{i,j-1} + L^{in,s,3}_{i} \cdot hL^{in,s,3}_{i} = V^{s,3}_{i,j} \cdot hV^{s,3}_{i,j} + L^{s,3}_{i,j} \cdot hL^{s,3}_{i,j} & j \in J4^{last} \\
hL^{s,3}_{i,j} = f\left(T^{s,3}_{j}\right) & j \in J4 \\
hV^{s,3}_{i,j} = f\left(T^{s,3}_{j}\right) & j \in J4 \\
hL^{out,s,3}_{i} = hL^{s,3}_{i,j} & j \in J4^{first} \\
hV^{out,s,3}_{i} = hV^{s,3}_{i,j} & j \in J4^{last} \\
\sum_{i \in I} x^{s,3}_{i,j} = 1 & j \in J4 \\
\sum_{i \in I} y^{s,3}_{i,j} = 1 & j \in J4 \\
f^{L,s,3}_{i,j} = f^{V,s,3}_{i,j} & j \in J4 \\
f^{L,s,3}_{i,j} = f\left(x^{s,3}_{i,j}, T^{s,3}_{j}, P^{s,3}_{j}\right) & j \in J4 \\
f^{V,s,3}_{i,j} = f\left(x^{s,3}_{i,j}, T^{s,3}_{j}, P^{s,3}_{j}\right) & j \in J4 \\
c^{s,3} = f(DC) &
\end{array}\right]
\vee
\left[\begin{array}{ll}
\neg Z^{U}_{s,3} & \\
\wedge & \\
V^{in,s,3}_{i} = 0 & \\
L^{in,s,3}_{i} = 0 & \\
L^{out,s,3}_{i} = 0 & \\
V^{out,s,3}_{i} = 0 & \\
L^{s,3}_{i,j} = 0 & j \in J4 \\
V^{s,3}_{i,j} = 0 & j \in J4 \\
LIQ^{s,3}_{j} = 0 & j \in J4 \\
VAP^{s,3}_{j} = 0 & j \in J4 \\
hL^{s,3}_{i,j} = 0 & j \in J4 \\
hV^{s,3}_{i,j} = 0 & j \in J4 \\
hL^{in,s,3}_{i} = 0 & \\
hV^{in,s,3}_{i} = 0 & \\
hL^{out,s,3}_{i} = 0 & \\
hV^{out,s,3}_{i} = 0 & \\
c^{s,3} = 0 &
\end{array}\right]
\quad i \in I, s \in S$$

Csak a feltételes egységek összefüggéseit részletezzük. A következő halmazokat definiáltuk: S a kolonna szekcióinak halmaza (alsó, felső), K a feltételes egységek halmaza, I a komponensek halmaza, Jn az *n* tányért tartalmazó egység egyensúlyi tányérainak halmaza. Jn^{first}, Jn^{last} és Jn^{inner} a Jn halmaznak az első, utolsó illetve közbenső tányérokat tartalmazó alhalmazai.

A feltételes egységek, valamint a gőz- és folyadéktovábbító egységek létezésének leírására a $z^U_{s,k}$, $z^V_{s,k}$ és $z^L_{s,k}$ logikai változókat használjuk. ($s \in S$, $k \in K$).

Az 1. egyenlet a 4 egyensúlyi tányért tartalmazó egység összefüggéseit tartalmazza. Ez az egység a harmadik a szekcióban, $k=3$ ($k \in K$). Ebben az egyenletben *V* a moláris gőzáram; *L* a moláris folyadékáram; *VAP* a teljes gőzáram; *LIQ* a teljes folyadékáram; *hV* a moláris gőzentalpia; *hL* a moláris folyadékentalpia; *x* a folyadék moltört; *y* a gőz moltört; *T* a hőmérséklet; *f* a fugacitás; *P* a nyomás; *c* az egység költsége; *DC* az oszlop átmérője. Az *in* és *out* alsó indexek az egységek be- és kimenő változóit jelölik. A *V* és *L* felső indexek a gőz- és folyadékáramokra vonatkoznak. A többi, egyensúlyi tányért tartalmazó egység összefüggései hasonlóan írhatók fel.

A 2. egyenlet a gőztovábbító egységre vonatkozik, ahol *tV* a moláris gőzáram a gőztovábbító egységben.

$$\begin{bmatrix} Z^V_{s,k} & s \in S, k \in K \\ \wedge & \\ tV^{in}_{i,s,k} = tV^{out}_{i,s,k} & i \in I, s \in S, k \in K \end{bmatrix} \vee \begin{bmatrix} \neg Z^V_{s,k} & s \in S, k \in K \\ \wedge & \\ tV^{in}_{i,s,k} = 0 & i \in I, s \in S, k \in K \\ tV^{out}_{i,s,k} = 0 & i \in I, s \in S, k \in K \end{bmatrix}$$

MINLP-reprezentáció

Az alap MINLP reprezentáció (Basic MINLP Representation, BMR) automatikusan előállítható a BGR-ből a logikai változókat binárisakkal helyettesítve (*Farkas és mtsai.*, 2004). A BMR külön bináris változót használ minden feltételes egységre, továbbá minden megvalósítható struktúrát reprezentál.

Mérnöki szempontból azokat a struktúrákat tekintjük megengedettnek, melyek vagy az egyensúlyi egységet tartalmazzák, vagy a hozzá tartozó megkerülő egységeket, de egyszerre kettőt nem. Ezt a következő logikai korlát beszúrásával érhetjük el.

$$Z^U_{s,k} \oplus \left(Z^V_{s,k} \wedge Z^L_{s,k}\right) \qquad s \in S, k \in K \qquad (3)$$

Ez a logikai korlát bináris változókkal is felírható:

$$z^U_{s,k} + z^V_{s,k} = 1 \qquad s \in S, k \in K \qquad (4)$$

$$z^U_{s,k} + z^L_{s,k} = 1 \qquad s \in S, k \in K \qquad (5)$$

Ezen korlátokat a BMR-hez adva az már csak a megengedett gráfokat reprezentálja, azaz Ideális MINLP reprezentációvá (Ideal MINLP Representation, IMR) válik.

Egy MINLP-modell megoldhatósága függ az egyenletek alakjától (linearitás, konvexitás, relaxáció, scaling). és a modell bináris változóinak számától. Ezért a bináris változók számának csökkentése csökkenti a MINLP feladat megoldásához szükséges időt.

A 3. egyenlet szerint a $z^V_{s,k}$ és $z^L_{s,k}$ bináris változók redundánsak, ha a $z^U_{s,k}$ változó már létezik, $\left(1 - z^U_{s,k}\right)$ kifejezéssel helyettesíthetők. Ezzel a helyettesítéssel a modell bináris változóinak száma a harmadára csökkenthető.

Binárisan minimális MINLP-reprezentáció

Farkas és mtsai. (2004) definíciója szerint a binárisan minimális MINLP reprezentáció (Binarily Minimal MINLP Representation, BMMR) minimális számú bináris változót használ a struktúrák megkülönböztetésére. Könnyen belátható, hogy *n* db bináris változó 2^n db különböző értéket vehet fel, azaz 2^n struktúra reprezentálható használatukkal. Így ha *k* számú különböző megkülönböztetendő struktúrát kell kezelnünk, és a bináris változók száma *n,* akkor a $2^n \geq k$ egyenlőtlenségnek teljesülnie kell, azaz $n \geq \log_2 k$.

Alkalmazzuk ezt a meggondolást egy maximum 31 tányért tartalmazó desztillálóoszlopra, amelyben a felső és alsó oszloprészben külön-külön a tányérok maximális száma 15-15, tehát a megkülönböztetendő struktúrák száma 16×16=256, vagyis a bináris változók minimális száma 8 ($\log_2 256=8$).

A *k*-adik feltételes egység 2^{k-1} egyensúlyi tányért tartalmaz a szuperstruktúrában (1. ábra). Minden ilyen egységhez egy bináris változó tartozik, és csak ezeket a bináris változókat használjuk a modellben. Így a kidolgozott reprezentáció ideális és binárisan minimális egyszerre (Binarily Minimal and Ideal MINLP Representation, BMIMR).

EREDMÉNY ÉS ÉRTÉKELÉS

A kidolgozott binárisan minimális ideális MINLP modellt (BMIMR) összehasonlítottuk két másik, az irodalomból vett modellel (*Viswanathan és Grossmann,* 1993; *Yeomans és Grossmann,* 2000) egy kétkomponensű elválasztási példában (*1. táblázat*).

Az MINLP reprezentációt Sun Sparc munkaállomáson GAMS (*Brooke et al.*, 1992) egyenletorientált optimalizáló programmal oldottuk meg. Két különböző, MINLP-feladatok megoldására alkalmas szolver használatát teszteltük, az Outer Approximation (OA) módszert alkalmazó DICOPT (*2. táblázat*), illetve a Branch-and-Bound (B&B) algoritmus elvén alapuló SBB-szolvert (*3. táblázat*).

Az OA algoritmust alkalmazó DICOPT++ szolverrel kapott eredményeket mutatja a *2. táblázat*. *Viswanathan* modelljének megoldása a 14. iteráció után szolverhiba miatt leállt. Mint azt az *1. táblázat* mutatja, az új modell több változót tartalmazott, mint a *Yeomans* által kidolgozott, megoldása mégis szignifikánsan rövidebb időt igényelt.

1. táblázat

Az MINLP modellek jellemzői

Modell (1)	Egyenletek száma (2)	Nemlineáris egyenletek száma (3)	Változók száma (4)	Bináris változók száma (5)
Viswanathan (6)	1138	388	1105	60
Yeomans (7)	2051	514	1272	60
Új (8)	1592	519	1449	10

Table 1: Characteristics of the MINLP representations

Model(1), Number of equations(2), Number of nonlinear equations(3), Number of variables(4), Number of binary variables(5), Viswanathan model(6), Yeomans model(7), New model(8)

2. táblázat

Az MINLP modellek megoldása DICOPT++ szolverrel

Modell (1)	Iterációk száma (2)	N	D	R	Célfüggvény (3)	Megoldási idő (CPU sec) (4)
Viswanathan	14	20	1,11	1,46	74,07	482
Yeomans	150	13	1,38	2,83	83,15	79 565
Új	150	16	1,18	1,76	72,12	13 643

Table 2: Solution of the MINLP representations with DICOPT++ solver

Model(1), Number of iterations(2), Objective function(3), Computation time(4)

3. táblázat

Az MINLP modellek megoldása SBB szolverrel

Modell (1)	N	D	R	Célfüggvény (2)	Megoldási idő (CPU sec) (3)
Viswanathan	18	1.137	1.585	72.77	120.7
Yeomans	17	1.151	1.651	72.08	406.5
Új	27	1.117	1.493	82.22	130.9

Table 3: Solution of the MINLP representations with SBB solver

Model(1), Objective function(2), Computation time(3)

A B&B algoritmus elvén alapuló SBB szolverrel nem sikerült egyértelmű eredményeket kapnunk. Amellett, hogy az SBB szolverrel kapott eredmények túl nagy szóródást mutattak, ezzel a szolverrel az új modell kevésbé jó eredményeket szolgáltatott, ami annak köszönhető, hogy az egyes bináris változóknak a célfüggvény értékére gyakorolt hatása eltérő, hiszen különböző tányérszámú konfigurációkat reprezentálnak. A struktúrából adódóan bináris fában hasonló célfüggvényértékek egészen más bináris kombinációkhoz tartoznak.

KÖVETKEZTETÉSEK

A kifejlesztett modell alkalmas desztilláló kolonnák tervezésére, az optimális tányérszám és refluxarány meghatározására. Az MINLP-modell mindkét általunk vizsgált szolverrel futtatható és megvalósítható megoldást nyújt. Az egyik szolverrel (DICOPT++) gyorsabban talál alacsonyabb optimumot, mint a másik két vizsgált modell. A Branch&Bound algoritmust alkalmazó SBB szolverrel nem lehet egyértelmű eredményeket kapni. A modell tulajdonságai tovább javíthatók a további fejlesztés folyamán.

IRODALOM

Brooke, A., Kendrick D., Meeraus, A. (1992). GAMS User's Guide. Scientific Press, USA.

Farkas, T., Rev, E., Lelkes, Z. (2005). Process flowsheet superstructures: Structural multiplicity and redundancyPart I: Basic GDP and MINLP representations. Comp. Chem. Eng., 29, 2180–2197.

Friedler, F., Tarjan, K., Huang Y.W., Fan, L.T. (1992). Graph-theoretic approach to process synthesis: axioms and theorems Chem. Eng. Sci., 47, 1973-1988.

Grossmann, I.E.(1996). Mixed-Integer Optimization Techniques for Algorithmic Process Synthesis. Advances in Chemical Engineering, 23, Process Synthesis, 171-246.

Luyben, M.I., Floudas, C.A.(1994). Analyzing the interaction of design and control—1. A multiobjective framework and application to binary distillation synthesis. Comp. Eng. Chem., 18, 933.

Farkas, T., Rev, E., Lelkes, Z. (2005). Process flowsheet superstructures: Structural multiplicity and redundancy Part II: Ideal and binarily minimal MINLP representations. Comp. Chem. Eng., 29, 2198–2214.

Viswanathan, J., Grossmann, I.E.: An alternate MINLP model for finding the number of trays required for a specified separation objective. Comp. Chem. Eng., 17, 949-955.

Yeomans, H., Grossmann, I.E. (2000). Disjunctive Programming Models for the Optimal Design of Distillation Columns and Separation Sequences. Ind. Eng. Chem. Res., 39, 1637-1648.

Levelezési cím (*Corresponding author*):

Czuczai Barbara
Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Vegyipari Műveletek Tanszék
1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.
Budapest University of Technology and Economics
Department of Chemical Engineering
H-1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.
Tel.: 36-1-463-34-01
e-mail.: bczuczai@mail.bme.hu