Simulering og analyse av lukket batch-destillasjon

Prosjektoppgave i fag

52075 Kjemiteknikk laboratorieøvninger og prosjektarbeid

Utført av

Per Furu og Ketil Eik

Institutt for kjemiteknikk, Fakultetet for kjemi og biologi, NTNU

17. desember 1998

SAMMENDRAG

For å simulere lukket batch destillasjon ble det utviklet en Matlab modell for kolonne. Kolonnen ble simulert med konstant og variabel holdup med forskjellige reguleringer. For disse tilfellene ble tidsforbruket, gitt av antall ganger føden har fordampet (energiforbruk), sammenlignet med hverandre og mot analytiske uttrykk for tidsforbruket. Effekten av relativ flyktighet α, forsterkning K_c og integraltid τ_I sin påvirkning på tidsforbruket ble også undersøkt. I tillegg ble det undersøkt om kontinuerlig destillasjon alltid er bedre enn batch destillasjon når det gjelder tiden det tar for å nå en gitt separasjon av blandingen.

Tidsforbruket ved simulering av lukket batch destillasjon viser at de analytiske uttrykkene for konstant holdup og variabel holdup med konstant sammensetning, vil komme innenfor det akseptable avviket mellom simulert og beregnet tid på mindre eller lik 10 %, når antall trinn i kolonnen settes lik $N = k \times N_{min}$. Dette forholdet er for de undersøkte renhetene gitt i tabell 1 og tabell 2 for henholdsvis konstant og variabel holdup.

Tabell 1: Beregnet forhold N over N_{min} for ulike renheter, hvor tidsforbruket ved simuleringen er 10% større enn beregnet fra det analytiske uttrykket for konstant holdup

x_D	$k = N/N_{min}$
0,999	1,10
0,99	1,21
0,95	1,44
0,90	1,71
0,80	2,50

Tabell 2: Beregnet forhold N over N_{min} for ulike renheter, hvor tidsforbruket ved simuleringen er 10% større enn beregnet fra det analytiske uttrykket for variabel holdup, med konstant sammensetning i topp

x_D	$k = N/N_{min}$
0,99	1,21
0,95	1,44
0,90	1,57

For å oppnå et akseptabelt tidsestimat med de analytiske uttrykkene viser resultatene i tabell 1 og tabell 2 at man trenger å bruke færre trinn over N_{min} etterhvert som kravet til renhet øker.

Simuleringene viser at en lukket batch kolonne bør opereres med variabel holdup, regulert med PI-regulator med måling i midten av kolonnen, hvis en ser på tidsforbruket for å nå gitte sammensetninger i topp- og bunn-produkt.

Resultatet for den undersøkte renheten, x_D = 0,99, viser at batch-destillasjon vil slå kontinuerlig destillasjon med hensyn på tidsforbruket, når $N \to N_{min}$ og den relative flyktigheten er lav.

Ved endring av relativ flyktighet, forsterkningen i regulatoren og integraltiden, viser simuleringene at tidsforbruket går ned med økning i relativ flyktighet, og at forholdet mellom forsterkning og integraltid også vil ha innvirkning på tidsforbruket for å nå en viss renhet.

Modellen for konstant optimalisert holdup stemmer godt overens med resultatene til Hasebe. Når det gjelder modellen for variabel holdup har vi tildels store avvik i resultatene. Disse uoverstemmelsene kan komme av at regulatoren som benyttes ikke er optimal.

1 INNLEDNING

Denne oppgaven er gitt i faget 52075 Kjemiteknikk laboratorieøvinger og prosjektarbeid, med Sigurd Skogestad som veileder.

Hensikten med denne oppgaven er å utvikle en Matlab modell for simulering og analyse av en lukket batch-destillasjon.

I prosessindustrien er destillasjon en vanlig enhetsoperasjon for separasjon av væskeblandinger. Separasjonen foregår vanligvis ved kontinuerlig destillasjon da batch destillasjon som oftest er mindre energi effektiv og tidsforbruket er lengre.

Ved vanlig batch destillasjon blir føde tilsatt kokeren og produktet tatt ut i toppen av kolonnen. Metoden som her er undersøkt består av at en binær blandingen blir tilsatt kokeren i sin helhet, eller fordelt i kokeren og kondensatoren. Destillasjonen foregår så ved å anrike produkten etterhvert i kokeren og kondensatoren, og ved en gitt sammensetning blir de to produktene tatt ut av kokeren og kondensatoren. For at denne kolonne skal opereres optimalt er det viktig å vite den tiden det tar for å nå en gitt sammensetning og hvordan holdupen i kokeren og kondensatoren skal reguleres.

Generell destillasjonsteori er gitt i McCabe og Smith [1]. Dynamikken og reguleringen av en kontinuerlig destillasjonskolonne er beskrevet av Skogestad [2] hvor det også er beskrevet Matlab modeller for kontinuerlige destillasjonskolonner.

Lukket batch-destillasjon er beskrevet av Treybal [3] hvor han også gir analytiske uttrykk for tiden det tar for å nå en gitt sammensetning.

De analytiske uttrykkene for tidsforbruket ved destillasjon som simuleringen i denne oppgaven sammenlignes mot, er utarbeidet av Skogestad [4].

Batch destillasjon i serie hvor bare den første kolonnen har koker og bare den siste kolonnen har kondensator er beskrevet av Hasebe et al. [5] og Skogestad et al. [6]. Hasebe viser at optimalisering av holdup i kokeren gir et lavere energiforbruk. Skogestad beskriver reguleringen av denne type kolonne.

2 PRINSIPP

Teorien er hentet fra McCabe og Smith [1] og Skogestad [2].

2.1 GENERELT OM LUKKET BATCH-DESTILLASJON

Ved vanlig batch-destillasjon blir føde tilsatt kokeren og produktet tatt ut i toppen av kolonnen. Denne type kolonne kan opperes ved at sammensetningen i toppen av kolonnen holdes konstant og refluksforholdet økes når sammensetningen av væsken i kokeren forandres. En alternativ metode er konstant refluksforhold hvor en lar sammensetningen variere med tiden. Destillasjonen blir da stoppet når den gitte sammensetningen er nådd.

Lukket batch-destillasjon består av at en binær blanding blir tilsatt en lukket batch kolonne hvor all mengde blir tilsatt kokeren, eller blandingen blir fordelt i kokeren og kondensatoren. Destillasjonen foregår så ved å anrike produktene etter hvert i kokeren og kondensatoren og ved en gitt sammensetning blir de to produktene tatt ut av henholdsvis kondensator og kokeren.

2.2 MINIMUM ANTALL TRINN I KOLONNEN

Separasjonsfaktoren for en binær blanding er

$$S = \frac{\left(\frac{x_L}{x_H}\right)_{topp}}{\left(\frac{x_L}{x_H}\right)_{bunn}} \tag{2-1}$$

hvor L er lett komponenten og H er tung komponent.

Materialbalanse over et trinn i kolonnen gir $V_i = L_{i+1}$, og materialbalansen for en komponent gir $V_i\, y_i = L_{i+1} x_{i+1}$ hvor V er dampstrøm [kmol] og L er væskestrøm [kmol]. Ved likevekt hvor $y_i = x_{i+1}$ og konstant relativ flyktighet α, har man for en binær blanding at

$$\alpha = \frac{\frac{y_{L,i}}{y_{H,i}}}{\frac{x_{L,i}}{x_{H,i}}} = \frac{\frac{x_{L,i+1}}{x_{H,i+1}}}{\frac{x_{L,i}}{x_{H,i}}} \tag{2-2}$$

Frenskes ligning for separasjonsfaktoren S er da gitt for N antall trinn ved å repetere ligning (2-2) N ganger.

$$S = \frac{\left(\frac{x_L}{x_H}\right)_{topp}}{\left(\frac{x_L}{x_H}\right)_{bunn}} = \alpha^N \qquad \textbf{(2-3)}$$

For en kolonne med en gitt separasjon er da Frensk ligning for minimum antall trinn gitt av

$$N_{min} = \frac{\ln S}{\ln \alpha} \qquad \textbf{(2-4)}$$

2.3 MASSE OG HOLDUP BALANSER

En destillasjonskolonne for to-produkt destillasjon er vist i figur (2-1), og med tegnforklaring gitt i tabell (2-1).

Figur: 2-1 Destillasjonskolonne av to-produkt destillasjon

Tabell: 2-1 Tegnforklaring av destillasjonskolonnen i figur (2-1)

- F, Fødestrøm [kmol/h]
- z_F, Fødesammensetning [molbrøk]
- D, Destillat [kmol/h]
- B, Bunnprodukt [kmol/h]
- L, Væskestrøm [kmol/h]
- V, Dampstrøm [kmol/h]
- MB, holdup i kokeren [kmol]
- MD, holdup i kondensatoren [kmol]
- MK, holdup på trinn n i kolonnen [kmol]
- x_i, molbrøk væske, komponent i
- y_i, molbrøk damp, komponent i

Massebalansen for kondensatoren, trinn NT, er gitt ved,

$$\frac{d}{dt}(MDx_{NT}) = Vy_{N-1} - L_{NT}x_{NT} - Dx_{NT} \tag{2-5}$$

hvor MD er holdup i kondensatoren [kmol], x og y er molbrøker av væske og damp, V er dampstrøm [kmol/h], L er væskestrøm [kmol/h] og D er destillat [kmol/h].

Holdupbalansen for kondensatoren er gitt av ligning (2-6)

$$\frac{d}{dt}MD = V - L_{NT} - D \tag{2-6}$$

Massebalansen for kolonnen som består av n-trinn er,

$$MK\frac{dx_i}{dt} = Lx_{n+1} + Vy_{n-1} - Lx_n - Vy_n \tag{2-7}$$

hvor MK er holdup på trinn n i kolonnen [kmol].

Ved fødetrinnet NF i kolonnen er massebalansen,

$$MK\frac{dx_{NF}}{dt} = Lx_{NF+1} + Vy_{NF-1} - Lx_{NF} - Vy_{NF} + Fz_F \tag{2-8}$$

hvor F er fødestrømmen [kmol/h] og z_F er fødesammensetningen.

Kokeren vil ha følgende massebalanse,

$$\frac{d}{dt}MBx_1 = L_2x_2 - Vy_1 - Bx_1 \tag{2-9}$$

hvor MB er holdup i kokeren [kmol] og B er bunnprodukt [kmol/h].

Holdupbalansen i kokeren er gitt av ligning (2-10)

$$\frac{d}{dt}MB = L_1 - V - B \tag{2-10}$$

Dampsammensetningen for en ideell binær blanding er gitt av ligning (2-11),

$$y = \frac{\alpha x}{1 + x(\alpha - 1)} \tag{2-11}$$

der α er relativ flyktighet.

2.4 MATLAB MODELLEN FOR LUKKET BATCH KOLONNE

Matlab modellen som ble utviklet for kolonnen modellere en kontinuerlig kolonne med variabelt holdup i kokeren og kondensatoren og konstant holdup på trinnene i kolonnen. Ved lukket batch destillasjon er fødingen F, destillatet D og bunnproduktet B lik null. Kolonnen ble simulert med konstant og variabel holdup. Ved konstant holdup er væskestrømmen L og dampstrømmen V like og konstante. Variabelt holdup ble modellert ved at dampstrømmen V var konstant og væskestrømmen L ble regulert. Reguleringen av holdupen ble indirekte regulert ved hjelp av temperaturregulering, gitt av sammensetningen i toppen av kolonnen ved PI-regulering og i midten av kolonnen ved P- og PI-regulering.

Forutsetninger for modelleringen av kolonnen:

- Konstant relativ flyktighet, α (idelle binær blanding)
- Konstant molar væskeholdup på trinnene, MK
- Konstant molar dampstrøm, V
- Konstant trykk
- Konstant platevirkningsgrad (100%)
- Neglisjerbar damp holdup
- Perfekt blanding på alle trinnene
- Total kondensator
- Neglisjerer tiden det tar å varme kolonnen og føden til kokepunktet, varm start
- Initiell sammensetning er lik fødesammensetningen

Ved usymmetrisk renhetskrav antar vi at det er optimalt å holde konstant sammensetning i midten av kolonnen, dette gir følgende metode for å innstille settpunktet for regulatoren. Minimum antall trinn blir beregnet ved ligning (2-4) hvor separsjonsfaktoren S er gitt av ligning (2-3). Målepunktet for regulatoren velges å være på trinn $N_{min}/2$. Ved å kombinere denne forutsettningen med ligning (2-3) får en ligning (2-12),

$$\frac{\dfrac{x_{midt}}{1-x_{midt}}}{\dfrac{x_1}{1-x_1}} = \alpha^{\frac{N_{min}}{2}} \qquad \textbf{(2-12)}$$

hvor x_1 og x_{midt} er molbrøk i henholdsvis koker og i midten av kolonnen. Løser en ligning (2-12) med hensyn på x_{midt} får en settpunktet for regulatoren.

Utskrift av Matlab modellen er gitt i bilag A.

2.5 ANALYTISK UTTRYKK FOR TIDSFORBRUKET VED KONSTANT HOLDUP

Teorien er hentet fra Skogestad [4].

Ved pinch i toppen av kolonnen er tidsforbruket, antall ganger føden har fordampet (energiforbruk), gitt i ligning (2-13)

$$\frac{M_v}{M} = \frac{z_F}{\alpha - 1}\left[\left(\ln\frac{x_D}{z_F}\right) + \alpha\ln\frac{1 - z_F}{1 - x_D}\right] \tag{2-13}$$

hvor M_v er totalt fordampet væske [kmol] og M er opprinnelig mengde væske [kmol].

Ved pinch i bunnen av kolonnen blir tidsforbruket

$$\frac{M_v}{M} = \frac{z_F}{\alpha - 1}\left[\left(\ln\frac{z_F}{x_B}\right) + \alpha\ln\frac{1 - x_B}{1 - z_F}\right] \tag{2-14}$$

Forutsetninger for ligningene:

- MD og MB er konstante
- MK er neglisjerbar, ingen holdup i kolonnen
- Konstant relativ flyktighet α
- Antall trinn er uendelig
- $x_D = x_B = z_F$, initielt
- Total refluks, L = V

2.6 ANALYTISK UTTRYKK FOR TIDFORBRUKET VED VARIABEL HOLDUP

Teorien er hentet fra Skogestad [4].

Tidsforbruket ved variabel holdup og konstant sammensetning i toppen av kolonnen er gitt av integralet

$$\frac{Vt}{MB_0} = \frac{x_D - x_{B0}}{x_D - x_B} \int_{x_B}^{x_{B0}} \frac{1 + x_B(\alpha - 1)}{x_B(1 - x_B)(x_D - x_B)} dx_B \qquad \textbf{(2-15)}$$

Forutsetninger for uttrykket er at x_D er konstant, antall trinn er uendelig, pinchen er i bunnen av kolonnen og dampstrømmen V er konstant. Utledningen er gitt i bilag B. Integralet er løst numerisk i Matlab med programmet batch.m, bilag C.

2.7 ANALYTISK UTTRYKK FOR TIDSFORBRUKET VED KONTINUERLIG KOLONNE

Teorien er hentet fra Skogestad [4].

Tidsforbruket ved kontinuerlig destillasjon er gitt av ligning (2-16),

$$\left(\frac{V}{F}\right)_{min} = \frac{1}{\alpha - 1}\left(\frac{z_F - x_B}{y_D - x_B} \cdot \frac{x_D}{z_F} - \left(\alpha \cdot \frac{z_F - x_B}{y_D - x_B} \cdot \frac{1 - x_D}{1 - z_F}\right)\right) + \frac{z_F - x_B}{y_D - x_B} \qquad \textbf{(2-16)}$$

med forutsettningen at antall trinn er uendelig.

3 RESULTATER

Fullstendige beregningseksempel er gitt i bilag E.

3.1 SAMMENLIGNING AV ANALYTISK UTTRYKK MOT SIMULERING MED KONSTANT HOLDUP.

Kolonnedata og startbetingelser er gitt i tabell 3-1.

Tabell: 3-1 Kolonnedata og startbetingelser, konstant holdup

Dampstrøm	V = 10 kmol/h
Væskestrøm	L = 10 kmol/h
Holdup i kondensator	MD = 5 kmol
Holdup i koker	MB = 5 kmol
Holdup pr. trinn i kolonnen	MK = 0,0005 kmol
Relativ flyktighet	$\alpha = 2{,}0$
Fødesammensetning	$z_F = 0{,}5$

Tidsforbruket for å nå en gitt renhet i koker og kondensator ved simulering ble sammenlignet med tiden gitt av det analytiske uttrykket, ligning (2-13). Minimum antall trinn ble beregnet med ligning (2-4) for et gitt renhetskrav.

Tabell 3-2 viser hvor mange trinn N over N_{min} man trenger for å få et tidsforbruk ved simulering på 10% over det som er gitt av det analytiske uttrykket. Beregningene av dette forholdet, gitt som k, for ulike renheter er gitt i bilag F.

Tabell: 3-2 Beregnet forhold N over N_{min} for ulike renheter, hvor tidsforbruket ved simuleringen er 10% større enn beregnet fra det analytiske uttrykket for konstant holdup

Sammensetning av lett komponent i kondensator, x_D	$k = N/N_{min}$
0,999	1,10
0,99	1,21
0,95	1,44
0,90	1,71
0,80	2,50

3.2 SAMMENLIGNING AV ANALYTISK UTTRYKK MOT SIMULERING MED VARIABEL HOLDUP

Kolonnedata og startbetingelser er gitt i tabell 3-3.

Tabell: 3-3 Kolonnedata og startbetingelser, variabel holdup

Dampstrøm (konstant)	V = 10 kmol/h
Væskestrøm	L = 0 kmol/h
Holdup i kondensator	MD = 0,01 kmol
Holdup i koker	MB = 9,99 kmol
Holdup pr. trinn i kolonnen (konstant)	MK = 0,0005 kmol
Relativ flyktighet	$\alpha = 2{,}0$
Fødesammensetning	$z_F = 0{,}5$
Regulator	PI-regulering i topp av kolonnen
Forsterkning	$K_C = 50$
Integraltid	$\tau_I = 0{,}05$

Tidsforbruket for å nå en gitt renhet i bunnproduktet for simuleringen med konstant sammensetning i toppen, ble sammenlignet mot tiden gitt av ligning (2-15), som ble beregnet numerisk i Matlab med programmet batch.m bilag C. Minimum antall trinn ble beregnet med ligning (2-4) for et gitt renhetskrav.

Tabell 3-4 viser hvor mange trinn N over N_{min} man trenger for å få et tidsforbruk ved simulering på 10% over det som er gitt av det analytiske uttrykket. Beregningene av dette forholdet, gitt som k, for ulike renheter er gitt i bilag G.

Tabell: 3-4 Beregnet forhold N over N_{min} for ulike renheter, hvor tidsforbruket ved simuleringen er 10% større enn beregnet fra det analytiske uttrykket for variabel holdup, med konstant sammensetning i topp

Sammensetning av lett komponent i kondensator, x_D	$k = N/N_{min}$
0,99	1,21
0,95	1,44
0,90	1,57

3.3 SAMMENLIGNING AV ULIKE REGULERINGSMODELLER, MED HENSYN PÅ TIDSBRUKEN FOR Å NÅ EN BESTEMT RENHET

I dette forsøket ble de ulike reguleringsmetoden av den lukkede batch kolonnen, PI- regulering topp, PI- regulering midt, P-regulering midt og konstant holdup, sammenlignet mot hverandre med hensyn på tiden det tar for å nå en gitt sammensetning i topp- og bunnproduktet.

Forsøksbetingelser for konstant holdup er gitt i tabell 3-1, og for variabelt holdup med ulike reguleringer er gitt i tabell 3-3. I dette forsøket ble forsterkningen satt til 20 og antall trinn var 22. For x_D = 0,99 ved PI-regulering i midten og i toppen av kolonnen, ble det kjørt med K_C = 50 på grunn av resultatene i kap 3.5.2, som viser at dette er en bedre innstilling.

Resultatene for sammenligningen av tidsforbruket ved de ulike reguleringsmodellene og de analytiske uttrykkene for konstant og variabel holdup, er gitt i tabell 3-5.

Tabell: 3-5 Resultater fra sammenligning av de ulike modellene med hensyn på tidsforbruk for å nå en viss renhet

Molbrøk i topp, x_D	Konst. holdup	Ideell ber. konst. holdup	PI-reg. topp	Ideell ber. var. holdup	PI-reg. midt	P-reg. midt
0,99	4,28	4,25	3,29	3,26	3,23	3,36
0,95	2,64	2,62	2,34	2,34	2,21	2,46
0,90	1,91	1,90	1,86	1,87	1,79	2,02

3.4 SAMMENLIGNING AV BATCH- MOT KONTINUERLIG DESTILLASJON

I dette forsøket ble tidsforbruket fra simulering av batch- og kontinuerlig destillasjon sammenlignet for ulike relative flyktigheter.

Batch-kolonnen ble simulert med PI-regulering midt og med innstillinger slik som beskrevet i tabell (3-3) Det ble brukt et renhetskrav på 0.99 i topp- og 0.01 i bunn-produktet, men relativ flyktighet α ble variert. Minimum antall trinn ble beregnet med ligning (2-4) for et gitt renhetskrav. Tidsforbruket for å nå en gitt renhet i topp- og bunn-produktet, beregnet med lineær interpolasjon, ble sammenlignet mot en kontinuerlig kolonne som ble simulert i programmet fenske.f [7]. Dette er et program som simulere en kontinuerlig kolonne med gitt fødesammensetning, topp og bunnprodukt, relativ flyktighet og antall trinn. Det ble undersøkt ved hvilken faktor for antall trinn N over N_{min} , og ved hvilken verdi på relativ flyktighet som gjør at lukket batch destillasjon slår kontinuerlig destillasjon med hensyn på tidsforbruket.

Tabell 3-6 gir det største forholdet mellom antall trinn N og N_{min}, hvor batch med PI-regulering midt slår kontinuerlig destillasjon med hensyn på tidsforbruket for de ulike relative flyktigheter som ble benyttet.

Beregningene er gitt i bilag I.

Tabell: 3-6 Beregnet forhold mellom N og N_{min} hvor batch, PI-regulering midt, slår kontinuerlig destillasjon med hensyn på tidsforbruket for ulike relative flyktigheter

Relativ flyktighet, α	N/N_{min}
1,1	1,19
1,2	1,20
1,5	1,17
2,0	1,14

3.5 VIRKNING AV RELATIV FLYKTIGHET, FORSTERKNING OG INTEGRALTID PÅ TIDSFORBRUKET

Kolonnen ble simulert med PI-regulering i midten av kolonnen og med innstillinger slik som beskrevet i tabell 3-3. Antall trinn ble satt til 50. Tidsforbruket for å oppnå en gitt renhet i topp- og bunn-produktet, ble sammenlignet med forskjellige verdier av α, K_c og τ_I hvor bare en av variablene ble variert av gangen. For endring i α ble også virkningen på de andre reguleringsmodellene med hensyn på tidsforbruk undersøkt.

3.5.1 Variasjon av relativ flyktighet, α

Tabell 3-7 gir tidsforbruket ved endring av α ved ulike renheter.

Tabell: 3-7 Tidsforbruk fra simulering med PI-regulering midt ved endring av α for ulike renheter

Molbrøk i topp x_D	Simulert tidsforbruk, $t_{simulert}$		
	α_1 = 1,5	α_2 = 2,0	α_3 = 2,5
0,99	5,74	3,23	2,29
0,95	4,03	2,32	1,71
0,90	3,22	1,89	1,42

Trendkurver for endring av α med hensyn på tidsforbruk er gitt i bilag J. Resultater fra endring av α for de øvrige reguleringsmodellene er gitt i bilag K.

3.5.2 Variasjon av K_C

Tabell 3-8 gir tidsforbruket ved endring av K_C ved ulike renheter.

Tabell: 3-8 Tidsforbruket fra simulering med PI-regulering midt ved endring av K_C for ulike renheter

Molbrøk i topp, x_D	Simulert tidsforbruk, $t_{simulert}$				
	K_{C1} = 5	K_{C2} = 10	K_{C3} = 20	K_{C4} = 50	K_{C5} = 100
0,99	4,91	4,43	3,76	3,23	3,27
0,95	3,19	2,60	2,21	2,32	2,36
0,90	2,42	1,84	1,79	1,89	1,93

3.5.3 Variasjon av τ_I

I dette forsøket ble det brukt en forsterkning på 20.

Tabell 3-9 gir tidsforbruket ved endring av τ_I ved ulike renheter.

Tabell: 3-9 Tidsforbruket fra simulering med PI-regulering midt ved endring av τ_I for ulike renheter

Molbrøk i topp, x_D	Simulert tidsforbruk, $t_{simulert}$				
	τ_{I1} = 0,005	τ_{I2} = 0,01	τ_{I3} = 0,05	τ_{I4} = 0,1	τ_{I5} = 0,5
0,99	3,28	3,25	3,76	4,15	5,02
0,95	2,37	2,34	2,21	2,45	3,30
0,90	1,94	1,91	1,79	1,71	2,52

3.6 SAMMENLIGNING MED VERDIER FRA HASEBE

Forsøksbetingelser og resultater fra Hasebe [5] er gitt i bilag D.

Tidsforbruket fra simulering med konstant og varierende holdup, PI-regulering midt, ble sammenlignet mot tidsforbruket fra Hasebe [5], gitt i bilag D, hvor vår tid tilsvarer 50/PI. Ved variabel holdup ble også holdupen ved den gitte renheten sammenlignet mot holdupen i bilag D.

3.6.1 Konstant holdup

Det ble her utført fem forsøk hvor z_F og renhetskravene i toppen og bunnen ble variert.

Tabell 3-10 gir resultatene fra simulering med konstant optimalisert holdup (fra Hasebe, bilag D) i kokeren, sammen med resultatene til Hasebe.

Tabell: 3-10 Sammenligning av tidsforbruket fra simulering med konstant optimalisert holdup med resultatene fra Hasebe

Forsøk	$t_{simulert}$	t_{Hasebe}
0	3,15	3,15
1	2,12	2,11
2	3,78	3,79
3	2,33	2,28
4	1,22	1,22

3.6.2 Varierende holdup

Det ble her utført fem forsøk hvor z_F, holdup og renhetskravene i toppen og bunnen ble variert.

I forsøk 3 og 4 er det usymmetriske renhetskrav, da ble settpunktet for regulatoren beregnet av ligning (2-12).

Tabell 3-11 gir resultatene fra simulering med variabel holdup, sammen med resultatene til Hasebe.

Tabell: 3-11 Sammenligning av tidsforbruket og holdup i koker fra simulering med variabel holdup, PI-regulering i midt, med resultatene fra Hasebe

Forsøk	Verdier fra simulering		Verdier fra Hasebe	
	t	**MB_{slutt}[kmol]**	t	**MB_{slutt}[kmol]**
0	2,35	4,99	1,96	4,95
1	1,78	6,21	1,81	7,07
2	2,71	2,95	1,92	2,86
3	1,08	6,33	0,96	6,23
4	1,50	3,70	1,11	3,72

4 DISKUSJON

4.1 ANALYTISK UTRYKK FOR TIDSFORBRUKET VED KONSTANT HOLDUP

Tidsforbruket, gitt av antall ganger føden har fordampet, ved konstant holdup og symmetrisk blanding er gitt analytisk av ligning (2-13) og med forutsetninger gitt i avsnitt 2.5. Forutsetningene for modelleringen av kolonnen med konstant holdup er gitt i avsnitt 2.4. Ut fra disse forutsetningene er det betingelsene om uendelig antall trinn og ingen holdup i kolonnen som ikke er oppfylt.

I modellen for kolonnen er det satt en verdi på holdupen i kolonnen, men i forhold til holdupen i kokeren og kondensator er denne neglisjerbar, og derfor vil antagelsen være oppfylt.

Forutsetningen om uendelig antall trinn er ikke oppfylt da simuleringen bruker et bestemt antall trinn i kolonnen. Det er denne antagelsen som gjør at vi får avvikende svar når en sammenligner tidsforbruket for simuleringen av kolonnen med et bestemt antall trinn mot det analytiske uttrykket.

Resultatene, avsnitt 3.1, viser at k-verdien, som er forholdet mellom antall trinn brukt i simuleringen og minimum antall trinn, ligning (2-4), avtar med økende renhetskrav. Dette tyder på at lukket batch-destillasjon med konstant holdup er gunstig for høye renheter.

I industrien er det vanlig å sette $N = 2 \times N_{min}$ [2], og ut fra resultatene ser en at det analytiske uttrykket da vil gi akseptable tidsestimater for renheter over et renhetskrav som vil ligge i området 0,8-0,9.

4.2 ANALYTISK UTTRYKK FOR TIDSFORBRUKET VED VARIABEL HOLDUP

Tidsforbruket ved variabel holdup og konstant sammensetning i topp er gitt av ligning (2-15), og forutsetningen for utrykket i avsnitt 2.6. Forutsetningene for modelleringen av kolonnen med variabel holdup med PI-regulering topp er gitt i avsnitt 2.4.

Antagelsen om konstant sammensetning i toppen, x_D, antas oppfylt da kolonnen ble regulert med PI-regulering topp. Dette gir en rask regulering til konstant sammensetning i toppen når en antar varm start i kolonnen. Ved start av simuleringen er all væske i kokeren og vi vil ha en mye raskere respons i toppen enn i bunnen av kolonnen, noe som gir rask regulering til konstant sammensetning i toppen. Dette er vist i figur L-1, bilag L.

Antagelsen om pinch, sammenfallende sammensetningskurver for kokeren (trinn1) og trinn2, er også riktig når en ser på plottet av sammensetningskruven for kokeren og trinn 2, figur L-2, i bilag L.

Da står en igjen med antagelsen om uendelig antall trinn, og denne vil ikke være oppfylt da kolonnen med variabel holdup er simulert med et gitt antall trinn, og vi får avvik i de to beregnede tidsforbrukene for kolonnen.

Trenden i resultatene er at k-verdien, øker når N_{min} avtar. Sammenhengen mellom antall trinn og den ønskede renhet er gitt av ligning (2-4), og ut fra denne ligningen går minimum antall trinn ned med avtagende renhetskrav. Dette viser at k-verdien øker med avtagende renhetskrav. Dette kommer av at det analytiske uttrykket for variabel holdup baserer seg på at antall trinn skal være uendelig og, derfor vil dette uttrykket gjelde bedre for høye renheter.

Det vi ser av resultatene er at det analytiske uttrykket for variabel holdup og konstant sammensetning i topp gir akseptabel tidsestimat for den lukkede batch kolonnen med et fastsatt avvik i tidsestimatetene på 10% for alle de undersøket renhetene, hvis vi bruker forutsetningen at $N = 2 \times N_{min}$ [2].

4.3 SAMMENLIGNING AV DE ULIKE REGULERINGSMODELENE AV KOLONNEN MED HENSYN PÅ TIDSFORBRUKET

Resultatene i avsnitt 3.3, viser at en lukket batch kolonne bør opereres med variabel holdup, regulert med PI-regulator med måling i midten av kolonnen, hvis en ser på tidsforbruket for å nå gitte sammensetninger i topp- og bunn-produkt.

I forsøket med konstant holdup er det ikke brukt optimale verdier på holdupen i kokeren og kondensatoren. Selv om det i simuleringen av konstant holdup ikke er brukt optimale verdier viser det ideellt beregnede tidsforbruket ved konstant holdup, ligning (2-13), at variable holdup også i dette tilfellet vil være best med hensyn på tidsforbruket for å nå en gitt sammensetning. Dette er også vist av Hasebe et al. [5], som har brukt optimaliserte verdier av holdup i sine simuleringer.

Ved variabel holdup er ikke regulatorene som regulerer holdupene tunet optimalt, men vi har allikevel en klar trend at PI-regulering midt vil være den beste reguleringen av holdupen i kolonnen når en tar hensyn til tidsforbruket ved destillasjonen.

Ulempen med PI-regulering midt er at destillasjonen må stoppes etter en gitt tid dersom en skal få den gitte renheten. Ved PI-regulering topp er ikke tiden for å stoppe kolonne så kritisk dersom man ikke er så avhengig av å ha en bestemt renhet i kokeren. I vårt tilfelle er vi interresert i å oppnå gitte renheter i topp og bunn. Tidsforbruket er da gitt av den sammensetningen som tar lengst tid. På grunn av dette kravet vil PI-regulering topp være uheldig for tidsforbruket for å oppnå en gitt renhet i kokeren da PI-regulering topp vil gi sen respons for regulering av sammensetningen i bunnen av kolonnen. PI-regulering midt vil i dette tilfellet være best da denne type regulering gir omtrent lik respons i topp og bunn av kolonnen ved regulering av holdupene. P-regulering midt gir lengst tidsforbruk ved variabel holdup, og denne type regulering vil også gi et stasjonæravvik ved forstyrrelse av utgangen.

4.4 BATCH MOT KONTINUERLIG

Ved sammenligning av analytisk utrykk for tidsforbruket ved variabel holdup og konstant sammensetning i topp, ligning (2-15), og analytisk uttrykk for tidsforbruket ved kontinuerlig kolonne, ligning (2-16), vil kontinuerlig alltid slå batch for de undersøkte tilfellene, gitt i bilag H, når vi ser på tidsforbruket for å nå en gitt renhet. Dette kommer av at begge uttrykkene har som forutsettning at antall trinn er uendelig, og da vil kontinuerlig alltid slå batch.

Bruker man modeller som spesifiserer antall trinn i kolonnen viser resultatene at batch destillasjon vil slå kontinuerlig destillasjon med hensyn på tidsforbruket når antall trinn i kolonnen går mot minimum antall trinn for den gitte renheten, og vi operere med lave verdier på relativ flyktighet. I sammenligningen av lukket batch- og kontinuerlig destillasjon ble det simulert med PI-regulering midt for batch kolonnen, og med fenske.f [7] for den kontinuerlige kolonnen. Variabel holdup med PI-regulering midt ble valgt da resultatene i avsnitt 3.3, viser at det er den kolonnen som bruker minst tid.

Resultatene i avsnitt 3.4, viser at ved et forhold k mellom antall trinn i kolonnen og minimum antall trinn på 1,2 fører til at batch slår kontinuerlig for et renhetskrav på 0.99 for topp-produktet og ved gitte verdier på relativ flyktighet. Samtidig er det en trend at k går ned når den relative flyktighetene α øker. Ved en viss relativ flyktighet, større enn 2, viser trenden i simuleringen at det vil bli umulig ved batch destillasjon å slå kontinuerlig i tidsforbruk ved alle forhold for N på N_{min} .

4.5 ENDRING AV RELATIV FLYKTIGHET, α

I følge teorien [1] skal tiden for å oppnå en bestemt separasjonsgrad, i dette tilfellet ved destillasjon, av komponenter øke ettersom den relative flyktigheten mellom komponentene øker. Fra figur J-1, bilag J, ser vi at nettopp dette er tilfellet. En annen trend fra figur J-1, er at tidsbruken faller kraftig når renhetskravet endres fra $x_D = 0{,}99$ til $x_D = 0{,}95$, mens spranget for simulert tid er mindre fra $x_D = 0{,}95$ til $x_D = 0{,}90$. Dette kommer av at separasjonstiden øker ettersom kravet til produktrenheten øker.

Det ble også kjørt samme forsøk for de andre modellene vi har modellert, dvs. modellene for konstant holdup, P-regulering i midten av kolonnen og PI-regulering i toppen av kolonnen Disse forsøkene viser den samme trenden, og er gitt i bilag K.

4.6 ENDRING AV FORSTERKNINGEN, K_C

I følge teorien, Seborg [8], er riktig tuning av regulatorparametrene viktig dersom man skal oppnå bra regulering. Siden denne oppgaven ikke omfatter optimalisering og tuning av regulatorparameterene, ble det bare valgt fem tilfeldige verdier for forsterkningen, for å se på trender og eventuelle K_C-verdier som ikke burde brukes.

Fra tabell 3-8 ser vi at beste K_C-verdi varierer alt etter hvilken renhet vi setter som krav. For $x_D = 0{,}99$ ser vi at K_{C4} er den beste av de som ble kjørt, og for $x_D = 0{,}95$ og $x_D = 0{,}90$ viste det seg at K_{C5} er å anbefale. Siden det ikke er en del av oppgaven og tiden ikke rakk til, ble ikke K_C-verdiene ytterligere forbedret. Men resultatene viser i hvilket intervall de optimaliserte K_C-verdiene vil befinne seg. For $x_D = 0{,}99$ vil den optimaliserte K_C-verdien ligge i intervallet $20 \le K_C \le 100$. Den optimaliserte K_C-verdien for $x_D = 0{,}95$ og $x_D = 0{,}90$ vil ligge i området $10 \le K_C \le 50$.

Siden det var en PI-regulator som ble benyttet i simuleringene, er K_C/τ_I-forholdet vel så interessant, som de enkeltstående regulatorparameterne. Kjøres det med en lav forsterkning må eventuelt integraltiden også justeres ned, og omvendt ved høy forsterkning. Dette vil bli diskutert mer under neste kapittel, hvor nettopp integraltiden ble variert.

4.7 ENDRING AV INTEGRALTIDEN, τ_I

Fra tabell 3-9 ser vi at beste τ_I-verdi varierer alt etter hvilke renhetskrav legger til grunn. For $x_D = 0{,}99$ ser vi at τ_{I2} er det beste valget, mens for $x_D = 0{,}95$ og $x_D = 0{,}90$ vil det beste valget være τ_{I3}. Altså viser resultatene at det kreves en mer aggresiv regulering når kravet til det som skal reguleres øker, noe som stemmer med det som står i litteraturen [8].

Resultatene i tabell 3-9 viser området hvor den optimaliserte τ_I-verdien befinner seg. For x_D = 0,99 vil den optimaliserte τ_I-verdien ligge i intervallet $0{,}005 \leq \tau_I \leq 0{,}05$. Den optimaliserte τ_I-verdien for $x_D = 0{,}95$ og $x_D = 0{,}90$ vil ligge i området $0{,}01 \leq \tau_I \leq 0{,}1$.

Som det ble nevnt ovenfor er det ofte K_C/τ_I-forholdet som er avgjørende for hvor god regulering man får ved bruk av en PI-regulator. K_C/τ_I-forholdet vil øke med økende renhetskrav. Denne trenden støttes opp av resultatene vi har fått. Men man må være obs på at dette forholdet ikke blir for stort, da det vil kunne føre til ustabilitet. Men generelt gjelder det at dersom man ønsker en rask regulering for en prosess med strenge krav til reguleringen, må det benyttes en relativ aggresiv regulering. Resultatene, avsnitt 3.5.2 og 3.5.3, viser denne trenden.

4.8 SAMMENLIGNING MED VERDIER FRA HASEBE

Når det gjelder modellen for konstant holdup stemmer våre resultater, avsnitt 3.6, svært godt overens med verdiene til Hasebe, bilag D. Dette bekrefter at modellen for konstant holdup som vi har sett på er en god modell.

Hasebe sine resultater, bilag D, for varierende holdup viste seg vanskelig å kopiere med vår modell for PI-regulering i midten av kollonnen. Problemet med modellen for PI-regulering i midten av kollonnen er at den ikke er optimalisert. Dvs. at avviket mellom optimaliserte verdier og de vi har kommet frem til etter simulering, kan skyldes at regulatoren som benyttes ikke er optimalisert.

Etter tips fra veileder, Sigurd Skogestad, ble det endret på setpunktene i forsøk 3 og 4, siden disse setter krav til usymmetrisk sammensetning i hhv. kokeren og kondensatoren, se avsnitt 2.4. Dette ga noe bedre resultater, men fortsatt er det et betydelig avvik mellom verdien fra simuleringen og de optimaliserte verdiene. Vi ser at simuleringen i enkelte tilfeller er nær de optimaliserte verdiene når det gjelder tiden, men i disse tilfellene får vi et betydelig avvik for kokerens holdup. Samme trenden viser seg i tilfellene hvor holdup i kokeren er nær de optimaliserte verdiene, hvor vi da får et betydelig avvik i tiden. Disse problemene kan skyldes at regulatoren som benyttes blir for dårlig i tilfeller hvor holdup på trinnene ikke kan neglisjeres.

For forsøk 4 ser vi at modellen for konstant holdup faktisk slår modellen for variabel holdup når simulert tid legges til grunn, dette underbygger bare at modellen for variabelt holdup, regulert ved PI-regulering i midten av kolonnen, ikke er optimal.

5 KONKLUSJON

Tidsforbruket ved simulering av lukket batch destillasjon viser at de analytiske uttrykkene for konstant holdup og variabel holdup med konstant sammensetning, vil komme innenfor det akseptable avviket mellom simulert og beregnet tid på mindre eller lik 10 %, når antall trinn i kolonnen settes lik $N = k \times N_{min}$. Dette forholdet er for de undersøkte renhetene gitt i tabell 5-1 og tabell 5-2 for henholdsvis konstant og variabel holdup.

Tabell: 5-1 Beregnet forhold N over N_{min} for ulike renheter, hvor tidsforbruket ved simuleringen er 10% større enn beregnet fra det analytiske uttrykket for konstant holdup

Sammensetning av lett komponent i topp x_D	$k = N/N_{min}$
0,999	1,10
0,99	1,21
0,95	1,44
0,90	1,71
0,80	2,50

Tabell: 5-2 Beregnet forhold N over N_{min} for ulike renheter, hvor tidsforbruket ved simuleringen er 10% større enn beregnet fra det analytiske uttrykket for variabel holdup, med konstant sammensetning i topp

Sammensetning av lett komponent i topp x_D	$k = N/N_{min}$
0,99	1,21
0,95	1,44
0,90	1,57

For å oppnå et akseptabelt tidsestimat med de analytiske uttrykkene viser resultatene i tabell 5-1 og tabell 5-2 at man trenger å bruke færre trinn over N_{min} etterhvert som kravet til renhet øker.

Simuleringene viser at en lukket batch kolonne bør opereres med variabel holdup, regulert med PI-regulator med måling i midten av kolonnen, hvis en ser på tidsforbruket for å nå gitte sammensetninger i topp- og bunn-produkt.

Resultatet for den undersøkte renheten, x_D = 0,99, viser at batch-destillasjon vil slå kontinuerlig destillasjon med hensyn på tidsforbruket, når $N \rightarrow N_{min}$ og den relative flyktigheten er lav.

Ved endring av relativ flyktighet, forsterkningen i regulatoren og integraltiden, viser simuleringene at tidsforbruket går ned med økning i relativ flyktighet, og at forholdet mellom forsterkning og integraltid også vil ha innvirkning på tidsforbruket for å nå en viss renhet.

Modellen for konstant optimalisert holdup stemmer godt overens med resultatene til Hasebe. Når det gjelder modellen for variabel holdup har vi tildels store avvik i resultatene. Disse uoverstemmelsene kan komme av at regulatoren som benyttes ikke er optimal.

Trondheim 17.12.98

Ketil Eik Per Furu

6 LITTERATURLISTE

[1] McCabe, W.L., J.C. Smith,P. Harriott , ”Unit Operations of Chemical Engineering”, 5th.ed., McGraw-Hill Book Co., USA, 1993

[2] Skogestad, S., ”Dynamics and Controll of Distillation Columns”, Trans. IChemE., Vol. 75, Part A, (1997)

[3] Treybal, R.E., ”A Simple Method of Batch Distillation”, Chem. Eng., 95-98, (1970)

[4] Skogestad, S., ”Notat med analytiske uttrykk for tidsforbruk ved destillasjon”,(1998)

[5] Hasebe, S.,M. Noda, I. Hashimoto, ”Optimal Operation Policy for Multi-Effect Batch Distillation System”, Computers chem. Engng., Vol. 21, 1221-1226, (1997)

[6] Skogestad, S., B. Wittgens, R. Litto, E. Sørensen, “Multivessel Batch Distillation”, AIChE Journal, Vol. 43, No. 4, 971-978, (1997)

[7] www.chembio.ntnu.no/user/skoge/book/matlab_m/cola/cola.html

[8] Seborg D. E., Edgar T. F., Mellichamp D. A., ”Process Dynamics and Control”, John Wiley & Sons, USA, 1989.

7 SYMBOLLISTE

Symbol	Enhet	Beskrivelse
B	kmol/h	Bunnprodukt
D	kmol/h	Destillat
F	kmol/h	Fødestrøm
k		Forhold mellom antall trinn i kolonen og minimum antall trinn
K_c		Forsterkning
L	kmol/h	Væskestrøm
M	kmol	Mengde væske
M_v	kmol	Mengde væske som har fordampet
MB	kmol	Holdup i kokeren
MD	kmol	Holdup i kondensatoren
MK	kmol	Holdup på trinn n i kolonnen
M_v	kmol/h	Totalt fordampet væske
N		Antall trinn i kolonnen
q_F		Væskefraksjon
S		Separasjonsfaktor
t		Antall ganger føden har fordampet
V	kmol/h	Væskestrøm
XDs		Settpunkt i toppen av kolonnen
XFs		Settpunkt i midten av kolonen
x_i		Molbrøk væske for komponent i
y_i		Molbrøk damp komponent i
z_F		Fødesammensettning
α		Relativ flyktighet
τ_I	s	Integraltid

BILAG A UTSKRIFT AV PROGRAMMET FOR SIMULERING AV KOLONNE

```
% Fil dist4.m
% Programmet simulerer en kontinuerlig kolonne med variabel holdup i koker
% og kondensator
% Ved simulering av lukket batch-destillasjon settes F=0, D=0 og B=0
% Programmet gir ut sammensetning på hvert trinn og holdup i koker og
% kondensator ved hvert tidsintervall
% Case 1: Konstant holdup, KC=0
% Kall i matlab for konstant holdup, case 1:
% zf=0.5;[t,x]=ode15s('dist4',[0 10],[zf*ones(1,22) 5 5 0])
% Case 2: PI-regulering topp
% Case 3: PI-regulering midt
% Case 4: P-regulering midt
% Kall i matlab for variabel holdup, case 2, 3 og 4.
% zf=0.5;[t,x]=ode15s('dist4',[0 10],[zf*ones(1,22) 0.01 9.99 0])

function xdot = dist4(t,x)

% Konstant relativ flyktighet
alfa = 2;

% Antall trinn
NT=22;

% Foedetrinn
NF=11;

% Oevrige data

F=0;         % Foedestroem (kmol/h)
qF= 0;       % Vaeskefraksjon
zF=0.5;      % Foedesammensetning
V=10;        % Dampstroem (kmol/h)
%LT=10;      % Væskestroem (kmol/h), case 1
D=0;         % Destillat (kmol/h)
B=0;         % Bunnprodukt (kmol/h)
MD=x(NT+1); % Holdup kondesator (kmol)
MB=x(NT+2); % Holdup koker (kmol)
MK=0.0005;  % Holdup kolonne (kmol)

% Settpunkt for regulatorene
```

```
XDs=0.95;   % Settpunkt for PI-topp
XFs=0.5;    % Settpunkt for PI- og P-midt

% P-regulering
KC=100;               % Forsterkning
%KC = 0;
%L0 = 10;             % Vaeskestroem (kmol/h)
err = x(NT)-XDs;      % Proporsjonalfeil topp, Case 2
%err=x(NF)-XFs;       % Proporsjonalfeil midt, Case 3,4
%LT=L0-KC*err;        % Case 4

% PI-regulering
L0I=0;                             % Vaeskestroem (kmol/h)
taui=0.05;                         % Integraltid
interr = x(NT+3);                  % Integralfeil
LT = L0I - KC*err - KC/taui*interr;  % Case 2,3

if LT < 0
   LT  = 0.001;
   err = 0;     % Skrur av integrasjonen for aa motvirke windup
end

% Damp-vaeske likevekt
i=1:NT-1;
y(i)=alfa*x(i)./(1+(alfa-1)*x(i));

% Dampstroem
i=1:NT-1;
V(i)=V*ones(1,NT-1);
i=NF:NT-1;
V(i)=V(i)+(1-qF)*F;

% Vaeskestroem
i=2:NT;
L(i)=LT*ones(1,NT-1);
i=2:NF;
L(i)=L(i)+qF;

% Total kondensator
y(NT)=x(NT);

% Holdup i kolonnen
i=2:NT-1;
M(i)=MK*ones(1,NT-2);
```

```
% Holdup i kokeren
MBdot=L(2)-V(1)-B;

% Holdup i kondensatoren
MDdot=V(NT-1)-L(NT)-D;

% Dynamiske ligninger (komponentbalanser)

% Kokeren
Mxdot(1)  = L(2)*x(2)-V(1)*y(1)-B*x(1);
xdot(1)=(Mxdot(1)-x(1)*MBdot)/MB;

% Kolonnen
i=2:NF-1;
xdot(i)=(L(i+1).*x(i+1)' - L(i).*x(i)' + V(i-1).*y(i-1) - V(i).*y(i))./
M(i);
i=NF+1:NT-1;
xdot(i)=(L(i+1).*x(i+1)' - L(i).*x(i)' + V(i-1).*y(i-1) - V(i).*y(i))./
M(i);

% Fødetrinn
xdot(NF) =(L(NF+1)*x(NF+1)+V(NF-1)*y(NF-1)-L(NF)*x(NF)-V(NF)*y(NF)+F*zF)/
MK;

% Kondensatoren
Mxdot(NT)  = V(NT-1)*y(NT-1)-L(NT)*x(NT)-D*x(NT);
xdot(NT)=(Mxdot(NT)-x(NT)*MDdot)/MD;

% Holdup
xdot(NT+1)=MDdot; % Holdup kondensator
xdot(NT+2)=MBdot; % Holdup koker

%Integrator i regulatoren
xdot(NT+3)=err;

% Funksjonen må returnere en kolonnevektor (inneholder trinn 1 til NT, MD,
MB og err)

xdot=xdot(:);
```

BILAG B UTLEDNING AV ANALYTISK UTTRYKK FOR TIDSFORBRUKET VED VARIABELT HOLDUP

Massebalansen for kokeren med pinch i bunnen av kolonnen som fører til at $x_{B+1} = x_B$ er gitt ved

$$\frac{d}{dt}(MBx_B) = Vy_B - Lx_{B+1} = Vy_B - Lx_B \qquad \textbf{(B-1)}$$

Holdup i kokeren er gitt ved

$$\frac{d}{dt}MB = V - L \qquad \textbf{(B-2)}$$

Ved å partiell derivere ligning (B-1) og kombinere dette med ligning (B-2) får en

$$MB\frac{dx_B}{dt} + x_B(V - L) = Vy_B - Lx_B \qquad \textbf{(B-3)}$$

som kan forenkles til ligning (B-4)

$$\frac{MB}{V}\frac{dx_B}{dt} = y_B - x_B \qquad \textbf{(B-4)}$$

Totalbalanse for holdup for en komponent er

$$MBx_B + MDx_D = MB_0x_{B0} \qquad \textbf{(B-5)}$$

hvor MB_0 er initiell holdup [kmol] i kokeren og x_{B0} er initiell molbrøk i kokeren, og totalbalansen for holdupen til kolonnen er

$$MD = MB_0 - MB \qquad \textbf{(B-6)}$$

Kombinerer en ligning (B-5) og ligning (B-6) gir dette

$$\frac{MB}{MB_0} = \frac{x_D - x_{B0}}{x_D - x_B} \tag{B-7}$$

Ved å kombinere ligning (B-4) og ligning (B-7) får en følgende sammenheng for endring av molbrøken i kokeren, x_B.

$$-\frac{MB_0}{V}\frac{dx_B}{dt} = \frac{(y_B - x_B)}{(x_D - x_{B0})}(x_D - x_B) \tag{B-8}$$

Dampsammensetningen for en binær blanding er gitt av ligning (B-9),

$$y_B = \frac{\alpha x_B}{1 + x_B(\alpha - 1)} \tag{B-9}$$

der α er relativ flyktighet. Dette settes inn i ligning (B-8) og dette gir diff. ligningen

$$-\frac{V}{MB_0}dt = \frac{(x_D - x_{B0})(1 + (\alpha - 1)x_B)}{(x_D - x_B)(1 - x_B)x_B}dx_B \tag{B-10}$$

Ved å løse ligning (B-10) gir dette integralet hvor $z = x_{B0}$

$$\frac{Vt}{MB_0} = \frac{(x_D - z)}{(\alpha - 1)}\int_{x_B}^{z}\frac{1 + (\alpha - 1)x_B}{x_B(1 - x_B)(x_D - x_B)}dx_B \tag{B-11}$$

BILAG C UTSKRIFT AV PROGRAMMET BATCH.M

```
%Programmet for analytisk beregning av tidsforbruk med konstant
%sammensetning i topp (uendelig antall trinn)

function[out]=batch(x)

%Start av programmet i Matlab
%xb er sammensening i bunnen, zf er fødesammensetningen og al er relativ
%flyktighet

%global xb zf al
%xb = 0.1; zf = 0.5; al = 2;
%intb = quad('batch',xb,zf)

global xb zf al
xd = 1-xb;
ko = (xd-zf)/(al-1);
k1 = ko*(1 + (al-1)*x);
k2 = x.*(1-x).*(xd-x);

out = k1./k2;
```

BILAG D NYE RESULTATER FRA HASEBE

Alle data er hentet fra Hasebe [5].

Kolonnedata er gitt i tabell D-1.

Tabell D-1 : Kolonnedata

Dampstrøm (konstant)	V = 10 kmol/h
Væskestrøm ved variabel holdup	L = 0 kmol/h
Væskestrøm ved konstant holdup	L = 10 kmol/h
Holdup pr. trinn i kolonnen (konstant)	MK = 0,03 kmol
Relativ flyktighet	$\alpha = 3,0$
Antall trinn (med koker og kondensator)	12
Regulator	PI-regulering i midten av kolonnen
Forsterkning	$K_C = 50$
Integraltid	$\tau_I = 0,05$

Forsøksbetingelser og startbetingelser er gitt i tabell D-2.

Tabell D-2 : Forsøksbetingelser og startbetingelser

Forsøk	$z_{F,lett}$	$x_{D,lett}/x_{D,tung}$	$MB_{konstant}$	$MB_{variabel,start}$
0	0,5	0,99/0,99	5,03	9,90
1	0,3	0,99/0,99	7,13	9,90
2	0,7	0,99/0,99	2,93	9,90
3	0,5	0,99/0,80	6,35	9,90
4	0,5	0,80/0,99	3,66	3,00

Tabell D-3 er nye resultater fra Hasebe og tilsvarer tabell 3 i [5].

Tabell D-3 : Nye resultater fra Hasebe

Forsøk	C-policy		V-policy	
	MB[kmol]	**P.I.**[kmol/h]	MB[kmol]	P.I.[kmol/h]
0	50,3	15,9	49,5	25,5
1	71,3	23,7	70,7	27,6
2	29,3	13,2	28,6	26,0
3	63,5	21,9	62,3	52,3
4	36,6	41,0	37,2	44,9

BILAG E BEREGNINGSEKSEMPEL

Beregning av tidsforbruket, gitt ved antall ganger føden har fordampet, ved konstant holdup og symmetrisk blanding. Som eksempel er det her tatt verdier fra beregning av $t_{beregnet}$ i tabell F-2:

$$\frac{M_v}{M} = \frac{z_F}{\alpha - 1}\left[\left(\ln\frac{x_D}{z_F}\right) + \alpha\ln\frac{1 - z_F}{1 - x_D}\right] = \frac{0,5}{2 - 1}\left[\left(\ln\frac{0,99}{0,5}\right) + 2\ln\frac{1 - 0,5}{1 - 0,99}\right] = 4,25 \quad \textbf{(E-1)}$$

Beregning av tidsforbruket, gitt ved antall ganger føden har fordampet, ved variabelt holdup og konstant sammensetning:

$$\frac{Vt}{MB_0} = \frac{x_D - x_{B0}}{x_D - x_B}\int_{x_B}^{x_{B0}} \frac{1 + x_B(\alpha - 1)}{x_B(1 - x_B)(x_D - x_B)}dx_B \quad \textbf{(E-2)}$$

Integralet løses i Matlab med programmet batch.m, bilag C.

Beregning av tidsforbruket, gitt ved antall ganger føden har fordampet, ved kontinuerlig destillasjon. Som eksempel er det her tatt verdier fra tabell H-1, bilag H, for α_1 og $x_B = 0,01$:

$$\left(\frac{V}{F}\right)_{min} = \frac{1}{\alpha - 1}\left(\frac{z_F - x_B}{y_D - x_B}\cdot\frac{x_D}{z_F} - \left(\alpha\cdot\frac{z_F - x_B}{y_D - x_B}\cdot\frac{1 - x_D}{1 - z_F}\right)\right) + \frac{z_F - x_B}{y_D - x_B} = 2,44 \quad \textbf{(E-3)}$$

Til å beregne tiden det tar å oppnå en bestemt renhet ble det benyttet lineær interpolasjon ut fra rådata fra simuleringen. Som eksempel er det her tatt verdier fra forsøket for sammenligningen mellom analytisk uttrykk for konstant sammensetning i toppen og PI-regulering i toppen av kolonnen for $x_D = 0,99$ for N = 16:

Tabell E-1 : Verdier som skal interpoleres når renheten i bunnen er hastighetsbestemmende

x_B	t
0,0104	3,6295
0,0092	3,7254

$$t_{\text{simulert}} = t_h - \left[\frac{(t_h - t_l)}{(x_h - x_l)} \times (x_h - x_s)\right] \quad \textbf{(E-4)}$$

$$= 3,7254 - \left[\frac{(3,7254 - 3,6295)}{(0,0104 - 0,0092)} \times (0,0104 - 0,0092)\right] = 3,66$$

BILAG F BEREGNEDE K-VERDIER FOR KONSTANT HOLDUP

I tabell F-1 er sammenhengen mellom antall trinn og tid gitt for x_D = 0,999. N_{min} ble her beregnet til å være 20, og beregnet tid fra ligning (2-13) er 6,56. Akseptabel avvik fra beregnet tidsforbruk settes til 10 %, dvs. $t_{akseptabel}$ = 7,22.

Tabell F-1 : Resultater for x_D = 0,999, N_{min} = 20 og $t_{beregnet}$= 6,56

N, antall trinn	$t_{simulert}$
21	8,33
22	7,09
23	6,84
24	6,70

Vi ser at ved allerede N = 22 har vi passert akseptabel verdi for tiden. Det gir følgende k:

$$k = \frac{22}{20} = 1,10 \tag{F-1}$$

I tabell F-2 er sammenhengen mellom antall trinn og tid gitt for x_D = 0,99. N_{min} ble her beregnet til å være 14, og beregnet tid fra ligning (2-13) er 4,25. Akseptabel avvik fra beregnet tidsforbruk settes til 10 %, dvs. $t_{akseptabel}$ = 4.68.

Tabell F-2 : Resultater for x_D = 0,99, N_{min} = 14 og $t_{beregnet}$= 4,25

N, antall trinn	$t_{simulert}$
15	5,22
16	4,70
17	4,47
18	4,38

Vi ser at ved N = 17 har vi passert akseptabel verdi for tiden. Det gir følgende k:

$$k = \frac{17}{14} = 1,21 \qquad \textbf{(F-2)}$$

I tabell F-3 er sammenhengen mellom antall trinn og tid gitt for x_D = 0,95. N_{min} ble her beregnet til å være 9, og beregnet tid fra ligning (2-13) er 2,62. Akseptabel avvik fra beregnet tidsforbruk settes til 10 %, dvs. $t_{akseptabel}$ = 2,89.

Tabell F-3 : Resultater for x_D = 0,95, N_{min} = og $t_{beregnet}$= 2,62

N, antall trinn	$t_{simulert}$
12	3,09
13	2,81
14	2,70

Vi ser at ved N = 12 har vi passert akseptabel verdi for tiden. Det gir følgende k:

$$k = \frac{13}{9} = 1,44 \qquad \textbf{(F-3)}$$

I tabell F-4 er sammenhengen mellom antall trinn og tid gitt for x_D = 0,90. N_{min} ble her beregnet til å være 7, og beregnet tid fra ligning (2-13) er 1,90. Akseptabel avvik fra beregnet tidsforbruk settes til 10 %, dvs. $t_{akseptabel}$ = 2,09.

Tabell F-4 : Resultater for x_D = 0,90, N_{min} = 7 og $t_{beregnet}$= 1,90

N, antall trinn	$t_{simulert}$
8	3,21
9	2,54
10	2,27
11	2,14
12	2,05
13	1,97
14	1,97

Vi ser at ved N = 12 har vi passert akseptabel verdi for tiden. Det gir følgende k:

$$k = \frac{12}{7} = 1,71 \qquad \textbf{(F-4)}$$

I tabell F-5 er sammenhengen mellom antall trinn og tid gitt for x_D = 0,80. N_{min} ble her beregnet til å være 4, og beregnet tid fra ligning (2-13) er 1,15. Akseptabel avvik fra beregnet tidsforbruk settes til 10 %, dvs. $t_{akseptabel}$ = 1,27.

Tabell F-5 : Resultater for x_D = 0,80, N_{min} = 4 og $t_{beregnet}$= 1,15

N, antall trinn	$t_{simulert}$
6	1,83
8	1,39
9	1,32
10	1,27
11	1,23

Vi ser at ved N = 10 har vi passert akseptabel verdi for tiden. Det gir følgende k:

$$k = \frac{10}{4} = 2,5 \qquad \textbf{(F-5)}$$

BILAG G BEREGNEDE K-VERDIER FOR KONSTANT SAMMENSETNING I TOPPEN

Tiden det tar å oppnå en bestemt renhet ved PI-regulering i midten av kolonnen bestemmes av molbrøk i bunnen, dvs. at det tar lenger tid å oppnå f.eks. x_B =0,01 enn x_D = 0,99.

I tabell G-1 er sammenhengen mellom antall trinn og tid gitt for x_D = 0,99. N_{min} ble her beregnet til å være 14, og beregnet tid fra batch, se bilag C er 3,26. Akseptabel avvik fra beregnet tidsforbruk settes til 10 %, dvs. $t_{akseptabel}$ = 3,59.

Tabell G-1 : Resultater for x_D = 0,99, N_{min} = 14 og $t_{beregnet}$= 3,26

N, antall trinn	$t_{simulert}$
16	3,66
17	3,48
18	3,40

Vi ser at ved allerede N = 17 har vi passert akseptabel verdi for tiden. Det gir følgende k:

$$k = \frac{17}{14} = 1,21 \qquad \textbf{(G-1)}$$

I tabell G-2 er sammenhengen mellom antall trinn og tid gitt for x_D = 0,95. N_{min} ble her beregnet til å være 9, og beregnet tid fra batch, se bilag C er 2,34. Akseptabel avvik fra beregnet tidsforbruk settes til 10 %, dvs. $t_{akseptabel}$ = 2,57.

Tabell G-2 : Resultater for x_D = 0,95, N_{min} = 9 og $t_{beregnet}$= 2,34

N, antall trinn	$t_{simulert}$
12	2,60
13	2,49
14	2,43

Vi ser at ved allerede N = 13 har vi passert akseptabel verdi for tiden. Det gir følgende k:

$$k = \frac{13}{9} = 1,44 \tag{G-2}$$

I tabell G-3 er sammenhengen mellom antall trinn og tid gitt for x_D = 0,90. N_{min} ble her beregnet til å være 7, og beregnet tid fra batch, se bilag C er 1,87. Akseptabel avvik fra beregnet tidsforbruk settes til 10 %, dvs. $t_{akseptabel}$ = 2,06.

Tabell G-3 : Resultater for x_D = 0,90, N_{min} = 7 og $t_{beregnet}$= 1,87

N, antall trinn	$t_{simulert}$
9	2,24
10	2,07
11	1,98

Vi ser at ved allerede N = 11 har vi passert akseptabel verdi for tiden. Det gir følgende k:

$$k = \frac{11}{7} = 1,57 \tag{G-3}$$

BILAG H BEREGNINGER AV TIDSBRUK FOR BATCH- OG KONTINUERLIG DESTILLASJON FRA ANALYTISKE UTTRYKK

Tabell H-1 gir beregnet tidsforbruk for henholdsvis batch-destillasjon med konstant sammensetning i topp, og kontinuerlig destillasjon ved varierende relativ flyktighet. Her ble z_F holdt konstant lik 0,5, mens relativ flyktighet ble variert.

Tabell H-1 : Tidsbruken for hhv. batch- og kontinuerlig destillasjon, analytiske uttrykk, ved konstant z_F og varierende α

	Beregnet tidsforbruk fra analytisk uttrykk, konstant sammensetrning i topp, t_{batch}			**Beregnet tidsforbruk fra analytisk uttrykk, kontinuerlig destillasjon $t_{kontinuerlig}$**		
x_B = 1-x_D	$\alpha_1 = 1,5$	$\alpha_2 = 2,0$	$\alpha_3 = 2,5$	$\alpha_1 = 1,5$	$\alpha_2 = 2,0$	$\alpha_3 = 2,5$
0,01	6,04	3,26	2,34	2,44	1,46	1,14
0,05	4,22	2,34	1,72	2,21	1,31	1,02
0,1	3,31	1,87	1,39	1,93	1,13	0,87
0,2	2,21	1,27	0,96	1,37	0,78	0,59
0,3	1,40	0,82	0,63	0,84	0,46	0,34

Vi ser at kontinuerlig slår batch klart og tydelig i alle tilfellene.

Tabell H-2 gir beregnet tidsforbruk for henholdsvis batch-destillasjon med konstant sammensetning i topp, og kontinuerlig destillasjon for varierende fødesammensetning. Her ble α holdt konstant tlik 2, mens fødesammensetning ble variert.

Tabell H-2 : Tidsbruken for hhv. batch- og kontinuerlig destillasjon, analytisk uttrykk, ved konstant α og varierende z_F

	Beregnet tidsforbruk fra analytisk uttrykk, konstant sammensetrning i topp, t_{batch}			Beregnet tidsforbruk fra analytisk uttrykk, kontinuerlig destillasjon $t_{kontinuerlig}$		
$x_B = 1\text{-}x_D$	$z_{F1} = 0{,}3$	$z_{F2} = 0{,}5$	$z_{F3} = 0{,}7$	$z_{F1} = 0{,}3$	$z_{F2} = 0{,}5$	$z_{F3} = 0{,}7$
0,01	3,20	3,26	2,98	1,26	1,46	1,64
0,05	1,97	2,34	2,31	1,09	1,31	1,42
0,1	1,36	1,87	1,89	0,88	1,13	1,15
0,2	0,61	1,27	1,19	0,45	0,78	0,59

BILAG I BEREGNEDE K-VERDIER FOR HVOR BATCH SLÅR KONTINUERLIG DESTILLASJON

I tabell I-1 gir resultater fra forsøk med relativ flyktighet lik 1,1. N_{min} ble her beregnet til å være 97.

Tabell I-1 : Resultater fra simulering av batch- og kontinuerlig destillasjon for x_D = 0,99 og α = 1,1

Ant. trinn, N	Simulert tidsforbruk ved kontinuerlig destillasjon, $t_{kontinuerlig}$	Simulert tidsforbruk ved batch-destillasjon, PI-regulering i midt, t_{batch}
114	34,54	33,86
115	33,05	32,48
116	31,67	32,58

Vi ser at ved $N \leq 115$ vil batch slå kontinuerlig destillasjon basert på tidsbruken det tar å oppnå en bestemt renhet. Ved mindre eller lik følgende k-verdi vil batch slå kontinuerlig destillasjon:

$$k = \frac{115}{97} = 1,19 \qquad \textbf{(I-1)}$$

I tabell I-2 gir resultater fra forsøk med relativ flyktighet lik 1,2. N_{min} ble her beregnet til å være 51.

Tabell I-2 : Resultater fra simulering av batch- og kontinuerlig destillasjon for x_D = 0,99 og α = 1,2

Ant. trinn, N	Simulert tidsforbruk ved kontinuerlig destillasjon, $t_{kontinuerlig}$	Simulert tidsforbruk ved batch-destillasjon, PI-regulering i midt, t_{batch}
61	16,15	15,57
62	15,02	15,59
63	14,13	15,20

Vi ser at ved $N \leq 61$ vil batch slå kontinuerlig destillasjon basert på tidsbruken det tar å oppnå en bestemt renhet. Ved mindre eller lik følgende k-verdi vil batch slå kontinuerlig destillasjon:

$$k = \frac{61}{51} = 1,20 \tag{I-2}$$

I tabell I-3 gir resultater fra forsøk med relativ flyktighet lik 1,5. N_{min} ble her beregnet til å være 23.

Tabell I-3 : Resultater fra simulering av batch- og kontinuerlig destillasjon for x_D = 0,99 og α = 1,5

Ant. trinn, N	Simulert tidsforbruk ved kontinuerlig destillasjon, $t_{kontinuerlig}$	Simulert tidsforbruk ved batch-destillasjon, PI-regulering i midt, t_{batch}
27	7,79	7,31
28	6,65	6,66
29	5,90	6,68

Vi ser at ved $N \leq 27$ vil batch slå kontinuerlig destillasjon basert på tidsbruken det tar å oppnå en bestemt renhet. Ved mindre eller lik følgende k-verdi vil batch slå kontinuerlig destillasjon:

$$k = \frac{27}{23} = 1,17 \tag{I-3}$$

I tabell I-4 gir resultater fra forsøk med relativ flyktighet lik 2,0. N_{min} ble her beregnet til å være 14.

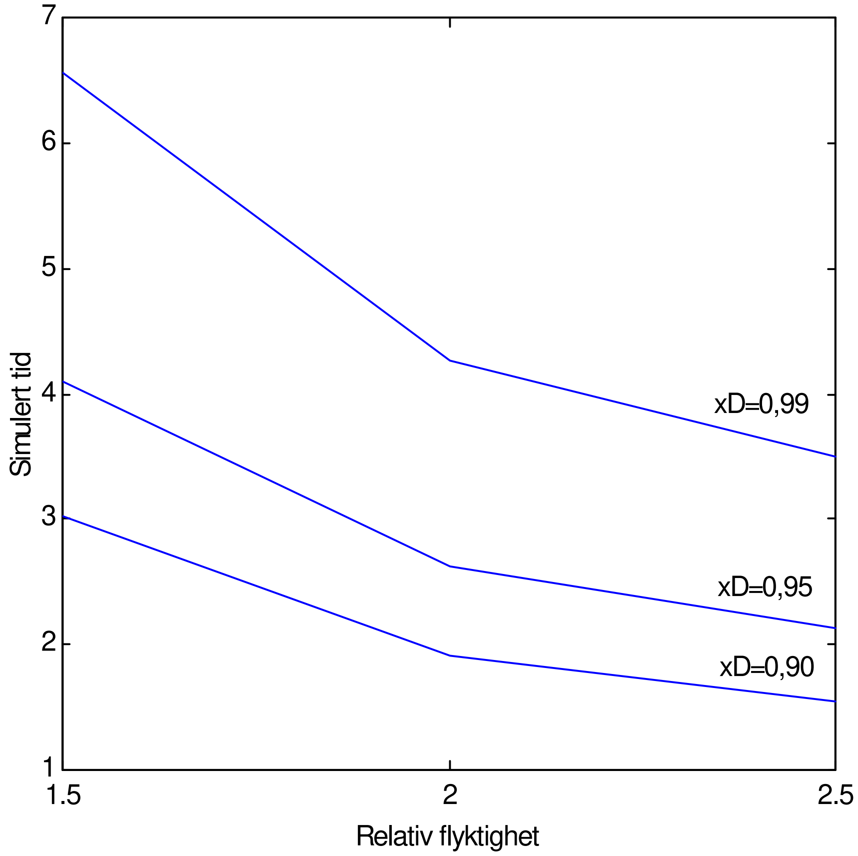
Tabell I-4 : Resultater fra simulering av batch- og kontinuerlig destillasjon for x_D = 0,99 og α = 2,0

Ant. trinn, N	Simulert tidsforbruk ved kontinuerlig destillasjon, $t_{kontinuerlig}$	Simulert tidsforbruk ved batch-destillasjon, PI-regulering i midt, t_{batch}
16	4,33	4,08
17	3,51	4,11
18	2,90	4,14

Vi ser at ved $N \leq 16$ vil batch slå kontinuerlig destillasjon basert på tidsbruken det tar å oppnå en bestemt renhet. Ved mindre eller lik følgende k-verdi vil batch slå kontinuerlig destillasjon:

$$k = \frac{16}{14} = 1,14 \qquad \textbf{(I-4)}$$

BILAG J PLOT AV TRENDKURVER VED ENDRING AV RELATIV FLYKTIGHET



Figur J-1:Trendkurver for varierende relativ flyktighet

BILAG K TRENDER VED VARIASJON AV RELATIV FLYKTIGHET

Tabell K-1 gir resultatet fra forsøkene som viser virkningen av α–endring ved konstant holdup.

Tabell K-1 : Resultat fra α–endring ved konstant holdup

Sammensetning i topp, x_D	Simulert tidsforbruk, $t_{simulert}$		
	α_1 = 1,5	α_2 = 2,0	α_3 = 2,5
0,99	6,56	4,27	3,50
0,95	4,10	2,63	2,13
0,90	3,02	1,91	1,54

Tabell K-2 gir resultatet fra forsøkene som viser virkningen av α–endring ved P-regulering i midten av kolonnen.

Tabell K-2 : Resultat fra α–endring ved P-regulering i midten av kolonnen

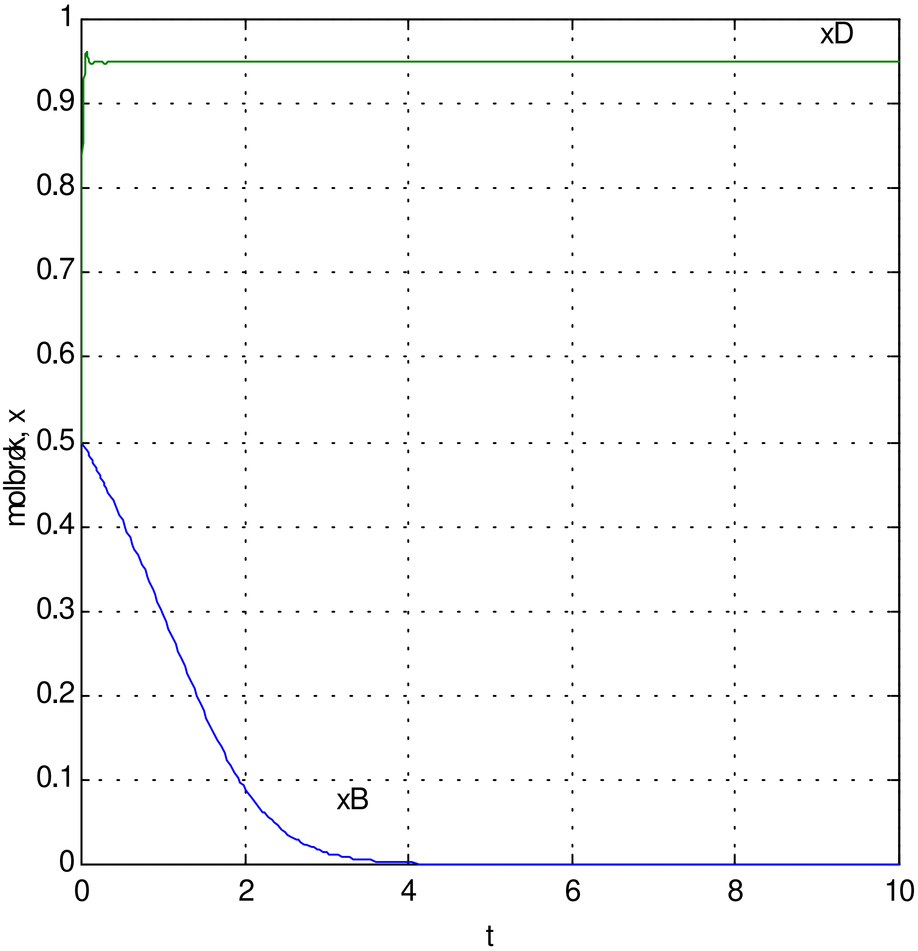
Sammensetning i topp, x_D	Simulert tidsforbruk, $t_{simulert}$		
	α_1 = 1,5	α_2 = 2,0	α_3 = 2,5
0,99	6,10	3,30	2,36
0,95	4,38	2,43	1,78
0,90	3,53	1,99	1,48

Tabell K-3 gir resultatet fra forsøkene som viser virkningen av α–endring ved PI-regulering i toppen av kolonnen.

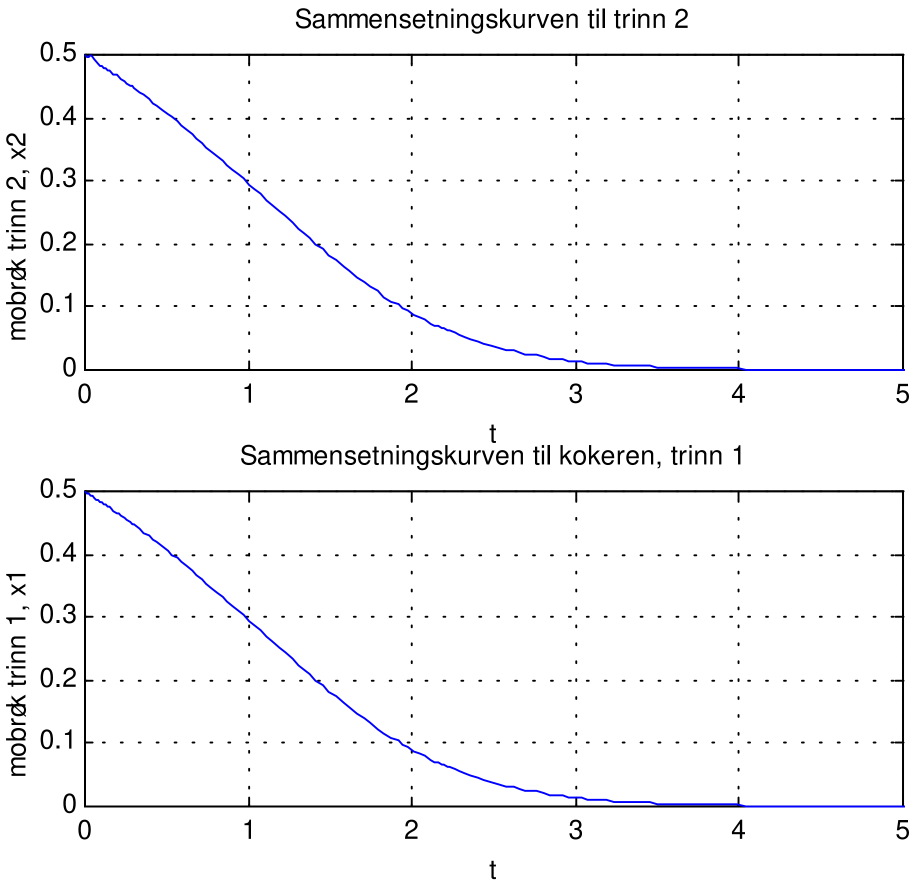
Tabell K-3 : Resultat fra α–endring ved PI-regulering i toppen av kolonnen

Sammensetning i topp, x_D	Simulert tidsforbruk, $t_{simulert}$		
	α_1 = 1,5	α_2 = 2,0	α_3 = 2,5
0,99	6,04	3,26	2,34
0,95	4,23	2,34	1,71
0,90	3,32	1,87	1,38

BILAG L PLOTT AV SIMULERING MED VARIABEL HOLDUP MED PI-REGULERING TOPP



Figur L-1:Plott av sammensetning av molbrøk i koker og kondensator med PI-regulering topp med forsterkning 20 og integraltid 0,01 , antall trinn 22 og relativ flyktighet 2



Figur L-2:Plott av sammensetningskurver på trinn 1 og trinn 2 ved variabel holdup med PI-regulering topp med fortsterkning 20 og integraltid 0.01, antall trinn 22 og relativ flyktighet 2.