

SIMULATION AND OPTIMIZATION OF AZEOTROPIC DISTILLATION PROCESS ETHANOL-WATER STREAM USING CHEMCAD AND MINITAB 15 SIMULIMI DHE OPTIMALIZIMI I PROCESIT TE DISTILIMIT AXEOTROPIK TE PËRZIERJES ETANOL-UJ ME NDIHMËN E SOFTWAREVE CHEMCAD DHE MINITAB

AFRIM DUSHI

Universiteti i Prishtinës, FXM, Kosovë

Email: afrimd@gmail.com

AKTET IV, 2: 194-199, 2011

PERMBLEDHJE

Atëhere kur mungon mundësia e eksperimentimeve në përmasa industriale, për simulimin si dhe optimizimin e parametrave ndikues apo përgjigjeve të dëshiruara aplikohen software profesionalë. Aplikimi i softwar-it CHEMCAD 6.1 për simulimin e procesit të distilimit axeotropik të përfitimit të alkoolit të pastër nga përzierja etanol-ujë si dhe softwar-it MINITAB 15 për modelin matematikor dhe optimizimin e parametrave të procesit. Simulimi i procesit bëhet duke llogaritur sasinë (Y1) dhe pastërtinë e etanolit (Y2) si përgjigje, kurse sasia e toluenit (X1), temperatura e toluenit (X2) dhe temperatura e përzierjes etanol-ujë (X3) janë parametrat ndikues. Për organizimin e eksperimenteve është përdorur plani i plotë faktorial i rendit të dytë (FFD). Ndikimi i sasisë së toluenit është më i shprehur se rritja e temperaturës së përbërësve hyrës në sistem, sepse përbërja etanol-ujë në avull është i barabartë me përbërjen në lëng. Distilimi axeotropik me pjata është zgjidhje adekuate e ndarjes. Modeli matematikor i dizajnit të plotë faktorial të rendit të dytë jep ekuacion konfidencial për optimizimin e parametrave.

Fjalët kyçe: Simulim, distilim, axeotropik, dizajnim, Chemcad, Minitab

SUMMARY

Then, when lacking the possibility of experiments on industrial scale, for simulation and optimization of parameters affecting the desired responses applied or professional software. The goals of the thesis is applying Software CHEMCAD 6.1 per simulation azeotropic distillation process to obtain clean ethanol by mixing ethanol - water and software MINITAB 15 for the mathematical model and optimization of procedural parameters. Simulation of the process is done by calculating the quantity (Y1) and the purity of ethanol (Y2) as the response and the quantity of toluen (X1), toluen temperature (X2) and the temperature ethanol-water mixture (X3) are influential parameters for designing of experiments is the use of full factorial design of the second order (FFD). Influence of the amount of toluen is more expressed as the increase in temperature in the system because the content of composition of Et-water in vapor is equal to the composition of Et-water in liquid. Distillation of azeotropic with column of treis is adequate choice for separation. Mathematical model of full factorial design of second-order equation gives confidence for optimization of parameters.

Key words: Simulation, distillation, azeotropic, design, Chemcad, Minitab.

HYRJE

Atëhere kur mungon mundësia e eksperimentimeve në përmasa industriale në industrinë kimike, për simulimin si dhe optimizimin e parametrave ndikues apo përgjigjeve të dëshiruara, aplikohen software

profesionalë. Simulimi paraqet imitimin e gjërave reale, përkatësisht, imitimin e një impianti dhe përdoret për të treguar ndikimin e mundshëm të faktorëve të ndryshëm në rrjedhën e përgjithshme të një procesi. Simulimi kompjuterik paraqet përpjekjen për të modeluar një situatë

reale ose hipotetike përmes kompjuterit në mënyrë që të studiohet se si funksionon sistemi. Duke i ndryshuar parametrat e gjendjes mund të parashikohet sjellja e një sistemi të zgjedhur për shqyrtim.

Në vazhdim, me ndihmën e Softwar-it MINITAB, është bërë modelimi matematikor i rezultateve të marra nga simulimi. Në këtë rast është shfrytëzuar dizajnimi eksperimental i modelit të plotë factorial. Ndërsa, optimalizimi i procesit të distilimit është zhvilluar me anë të metodës së funksioneve të dëshirueshme.

Kështu, qëllimi i këtij punimi është aplikimi i softwar-it CHEMCAD 6.1 për simulimin e proceseve kimike dhe softwar-it MINITAB 15 për modelin matematikor dhe optimalizimin e parametrave të procesit.

MATERIALI DHE METODAT

Detyra projektuese është të projektohet procesi i distilimit të përzierjes azeotrope etanol-ujë në raport 93.5:6.5 për të fituar alkoolin absolut prej 99.95%. Në këtë raport përqendrimit e etanolit dhe ujit janë të njëjta si në fazën e lënget ashtu dhe në fazën e avullit, ndaj dhe, përfitimi i këtij alkooli është proces i ndërlikuar.

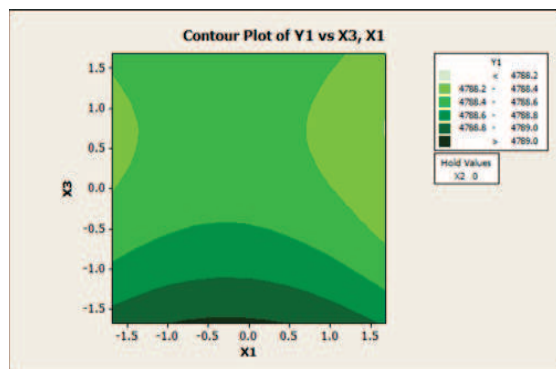


Figura 1. Varësia Y1 nga X1 dhe x2

Programi kompjuterik CHEMCAD

Sot, duke hasur në shumë sfida, kompanitë e industrisë kimik të përpunimit kërkojnë vegla më të mira për të rritur prodhimtarinë dhe avancuar zgjidhjet në projektimin e proceseve. CHEMCAD është vegël e shkëlqyer për të mundur një gjë të tillë. CHEMCAD është në gjendje të bëj

modelimin Kontinual, shazhor dhe gjysmë-shazhor të proceseve, dhe mund të simuloj proceset statike dhe dinamike.

Ne figurën 1 është paraqit dritarja kryesore e programit CHEMCAD dhe formimi i skemës teknologjike të paraparë me detyrë projektuese, ndërsa ne figurën 2 dhe 3 shihet dritarja e plotësimit të të dhënave mbi rrjedhjen furnizuese, respektivisht, karakteristikat e kolonës.

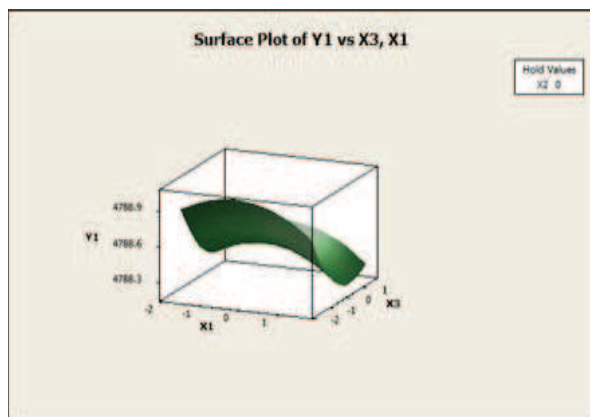


Figura 2. Diagrama 3D e varësisë Y1 nga x1 dhe X2

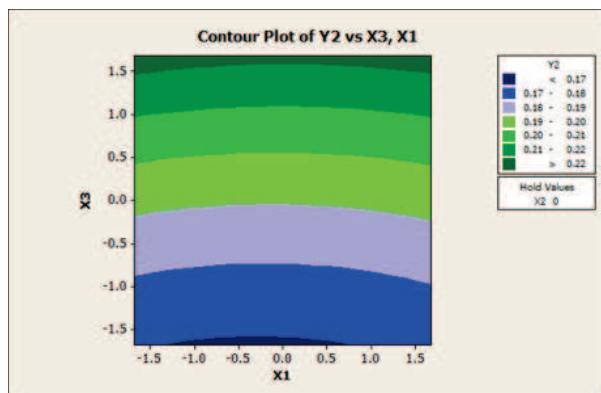


Figura 3. Varësia Y2 nga x1 dhe X2

Figura 4 paraqet skemën e kolonës me emërtimet e pjesëve përbërës. Numrat në katror tregojnë rrymat dhe karakteristikat e tyre, ndërsa numri në rreth tregon pajisjen (kolonën) dhe karakteristikat e tij.

Bazuar në kushtet e dhëna është projektuar simulimi i procesit të distilimit duke shqyrtuar faktorë ndikues si dhe përgjigjet:

- Sasia e toluenit (faktori X_1)
- Temperatura e toluenit (faktori X_2)
- Temperatura e përzierjes etanol-ujë (faktori X_3)

Përgjigjet

- Sasia e etanolit në rrjedhjen e poshtme (Y_1)
- Sasia e ujit në rrjedhjen e poshtme (Y_2),

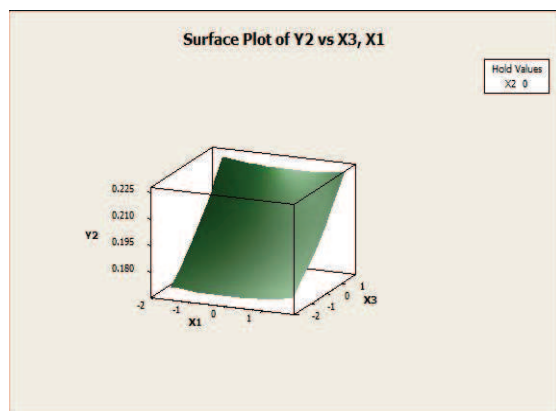


Figura 4. Diagrama 3D e varësisë y_2 nga x_1 dhe x_2

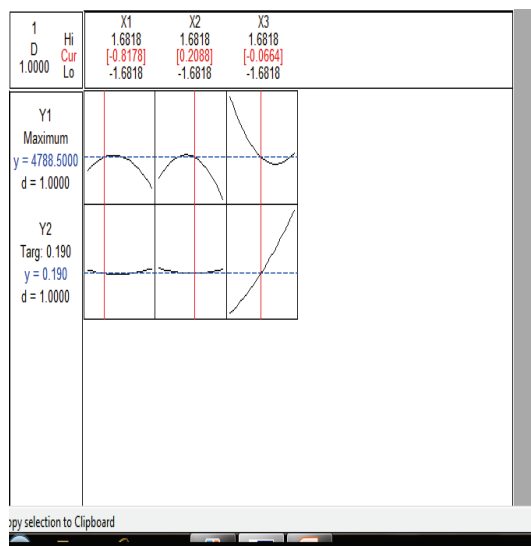


Figura 5. Paraqitja grafike e funksioneve të dëshirueshmërisë

Fak.	Nivelet e variacionit					Interv var.
x	-1.68	-1	0	1.0	1.680	Δx
x1	7.98	9.0	10.5	12.0	13.02	1.50
x2	66.60	70.0	75.0	80.0	83.40	5.00
x3	33.20	40.0	50.0	60	66.80	10.00

Tabela 1. Nivelet e variacionit të faktoreve

Në tabelën 1 janë dhënë vlerat dhe nivelet e faktorëve ndikues. Për optimalizimin e procesit, përkatësisht, zgjidhjen e kompromisit të faktorëve ndikues në vlerën e dëshiruar të përgjigjes është shfrytëzuar dizajni i plotë faktorial dhe metoda e funksioneve të dëshirueshme.

X1	X2	X3	Y1	Y2
1	-1	-1	4788.76	0.1790
-1	-1	1	4788.26	0.2103
-1.68	0.0	0.0	4788.51	0.1927
1	1	-1	4788.67	0.1791
0.0	-1.68	0.0	4788.33	0.1931
1.68	0.0	0.0	4788.13	0.1928
0.0	0.0	-1.68	4788.76	0.1688
0.0	0.0	0.0	4788.54	0.1920
0.0	0.0	0.0	4788.54	0.1920
0.0	1.68	0.0	4788.15	0.1925
1	-1	1	4788.21	0.2105
0.0	0.0	1.68	4788.83	0.2215
-1	-1	-1	4788.72	0.1780
-1	1	1	4788.12	0.2098
1	1	1	4788.19	0.2102
0.0	0.0	0.0	4788.52	0.1900
0.0	0.0	0.0	4788.50	0.1910
-1	1	-1	4788.67	0.1780
0.0	0.0	0.0	4788.50	0.1890
0.0	0.0	0.0	4788.50	0.1899

Tabela 2. Matrica e eksperimenteve

Për të gjetur funksionin $Y_1 = f(X_1, X_2, X_3)$ dhe $Y_2 = f(X_1, X_2, X_3)$ përdorim matricën e dizajnit të plotë faktorial sipas tabelës 2.

Pas plotësimit të të dhënave të rrjedhjes së furnizimit (fig. 2) dhe plotësimit të parametrave të kolonës (fig. 3) klikohet komanda "Run" (fig. 1) për llogaritje.

Ky softwar siguron raporte të shumta, diagrame dhe tabela sipas kërkesës. Këtu do të shkëputen dy raporte që kanë të bëjnë me madhësitë e përgjigjeve. Në figurën 7 lexohet fraksioni i etanolit në distilat (Y_1) ndërsa në figurën 8 lexohen sasia e ujit (Y_2)

Në vazhdim do të sqarojmë metodën e optimalizimit meqë ajo është aplikuar në këtë rast, ndërsa metoda e dizajnit të eksperimenteve do të konsiderohet e njohur. Rruga për të realizuar funksionet e dëshirueshmerise kalon nëpër këto stadi:

1. Përcaktimi i metodës së planifikimit të eksperimenteve dhe modeli i përgjigjeve për secilën k përgjigjeje

2. Llogaritja e funksionit të dëshirueshmerise për secilën përgjigje individuale

Të maksimalizohet dëshirueshmeria e përgjithshme e funksionit D duke kontrolluar faktorët ndikues.

Funksioni i dëshirueshmërisë është njëra prej metodave që aplikohet më së tepërmi në industri për të optimizuar proceset me shumë përgjigjeje. Kjo bazohet në idenë se "cilësia" e produktit apo procesit i cili ka shumë përgjigje të cilësive karakteristike është komplet e papranueshme, nëse dhe vetëm njëra nga ato tregohet jashtë limitit të "dëshirës". Metoda në fjalë gjen kushtet operacionale x të cilat sigurojnë vlera të përgjigjeve që janë "më shumë të dëshiruara".

Për secilën përgjigje (zgjidhje) $Y_i(X)$, funksioni i dëshiruar $d_i(Y_i)$ jep shumën në mes të vlerave 0 dhe 1 të mundshme të Y_i , me $d_i(Y_i)=0$ duke paraqitur një vlerë tërësisht të padëshirueshme (përshtatshme) të Y_i dhe $d_i(Y_i)=1$ duke dhënë kështu një përgjigje plotësisht të përshtatshme apo ideale. Më pas përshtatshmeria individuale kombinohet me anë të mesatares gjeometrike e

cila e jep dëshirueshmërin e përgjithshme (të plotë) D :

$$D = (d_1(Y_1) \times d_2(Y_2) \times \dots \times d_k(Y_k))^{1/k} \quad 1$$

me simbolin k që nënkupton numrin e përgjigjeve (zgjidhjeve). Vlen të ceket se nëse një përgjigje Y_i është tërësisht e padëshirueshme ($d_i(Y_i)=0$), atëherë dëshirueshmeria e përgjithshme është baras me zero. Në praktikë vlera e përgjigjes \hat{Y} përdoret në vend të Y_i .

Varësisht nëse duhet që një përgjigje e veçantë Y_i të rritet, të zvogëlohet apo ti jepet një vlerë e planifikuar (synuar), atëherë mund të përdoren funksione tjera të dëshiruara $d_i(Y_i)$. Një kategori e përshtatshme e funksioneve të dëshiruara ishte propozuar nga Deringer dhe Suich në vitin 1980. Le të jenë L_i , U_i si dhe T_i vlera të ulëta, të larta si dhe të planifikuara (synuara) e që respektivisht të jenë të përshtatshme për përgjigjet (zgjidhjet) Y_i , me $L_i \leq T_i \leq U_i$.

Nëse një përgjigje i takon grupit "përgjigjja më e mirë e synuar" atëherë funksioni i dëshirueshmërisë individuale është:

$$d_i(\hat{Y}_i) = \begin{cases} 0 & \text{if } \hat{Y}_i(x) < L_i \\ \left(\frac{\hat{Y}_i(x) - L_i}{T_i - L_i} \right)^s & \text{if } L_i \leq \hat{Y}_i(x) \leq T_i \\ \left(\frac{\hat{Y}_i(x) - U_i}{T_i - U_i} \right)^t & \text{if } T_i \leq \hat{Y}_i(x) \leq U_i \\ 0 & \text{if } \hat{Y}_i(x) > U_i \end{cases}$$

2

me eksponentët s dhe t duke përcaktuar se sa është e rëndësishme që të arrihet vlera e synuar. Për $s = t = 1$, funksioni i dëshiruar rritet në mënyrë lineare ndaj T_i , për $s < 1, t < 1$, funksioni është konveks, ndërsa për $s > 1, t > 1$, funksioni është konkav.

Nëse një përgjigje do të duhej që të maksimalizohet më mirë, atëherë dëshirueshmëria individuale përcaktohet si vijon

$$d_i(\hat{Y}_i) = \begin{cases} 0 & \text{if } \hat{Y}_i(x) < L_i \\ \left(\frac{\hat{Y}_i(x) - L_i}{T_i - L_i} \right)^s & \text{if } L_i \leq \hat{Y}_i(x) \leq T_i \\ 1.0 & \text{if } \hat{Y}_i(x) > T_i \end{cases}$$

3

T_i në këtë rast është paraqitur si një vlerë e mjaftë e madhe (mjaftueshme) për zgjidhje.

Në fund, nëse dëshirojmë që të minimizojmë një përgjigje, atëherë do të mund të përdornim

$$d_i(\hat{Y}_i) = \begin{cases} 1.0 & \text{if } \hat{Y}_i(\mathbf{x}) < T_i \\ \left(\frac{\hat{Y}_i(\mathbf{x}) - U_i}{T_i - U_i}\right)^s & \text{if } T_i \leq \hat{Y}_i(\mathbf{x}) \leq U_i \\ 0 & \text{if } \hat{Y}_i(\mathbf{x}) > U_i \end{cases}$$

4

ku T_i do të thotë se kemi një vlerë mjaft të vogël për përgjigjen.

REZULTATET DHE DISKUTIMI

Duke shfrytëzuar të dhënat nga tabela 2 fitojmë koeficientët e funksionit matematikor për Y_1 .

Welcome to Minitab, press F1 for help.

Central Composite Design

Factors: 3 Replicates: 1

Base runs: 20 Total runs: 20

Base blocks: 1 Total blocks: 1

Alpha: 1.68179

Response Surface Regression: Y_1 versus X_1 , X_2 , X_3

The analysis was done using coded units.

Estimated Regression Coefficients for Y_1

Term	Coef
Constant	4788.5156
X_1	-0.0432
X_2	-0.0430
X_3	-0.1410
$X_1 * X_1$	-0.0683
$X_2 * X_2$	-0.0966
$X_3 * X_3$	0.0981
$X_1 * X_2$	0.0095
$X_1 * X_3$	-0.0039
$X_2 * X_3$	-0.0030

E njëjta gjë fitohet dhe për vlerën Y_2 .

Response Surface Regression: Y_2 versus X_1 , X_2 , X_3

The analysis was done using coded units.

Estimated Regression Coefficients for Y_2

Term	Coef
Constant	0.1906
X_1	0.0002
X_2	-0.0001
X_3	0.0158
$X_1 * X_1$	0.0009

$X_2 * X_2$ 0.0009

$X_3 * X_3$ 0.0017

$X_1 * X_2$ 0.0000

$X_1 * X_3$ -0.0002

$X_2 * X_3$ -0.0001

Përcaktimi funksionit të dëshirueshmerise i përgjigjes dhe vlerat optimale të faktorëve ndikues

Response Optimization

Parameters

Goal	Lower	Target	Upper	Weight
Import				
Y_1		Maximum	4788.20	4788.50
4788.50	1	1		
Y_2		Target	0.18	0.19
1	1			0.21

Global Solution

X_1 = -0.81785

X_2 = 0.20882

X_3 = -0.06644

Predicted Responses

Y_1 = 4788.50, desirability = 1.00000

Y_2 = 0.19, desirability = 1.00000

Composite Desirability = 1.00000

PËRFUNDIMI

Në bazë të rezultateve të fituara nga simulimi i procesit të ndarjes me distilim të përzjerjes etanol-uj si dhe përpunimit matematikor të tyre mund të konstatojmë:

1. Tre faktorët e shqyrtuar kanë ndikim të ndryshueshëm në vlerën e fraksionit të etanolit në rrjedhjen e poshtme.

2. Vlerat optimale të faktorëve ndikues

$X_1=9.27$ kg/h; $X_2=76.05$ oC; dhe $X_3=49.34$ oC

japin vlera të funksioneve të dëshirueshmërisë individuale si vijon:

Sipas formulës (2) Y_1 vlera $d_1=1$

Sipas formulës (4) Y_2 vlera $d_2=1$

3. Dëshirueshmëria e kompozitit llogaritet sipas formulës (1) dhe arrin vlerën $D=1$ që do të thotë se në tërësi realizohen vlerat e dëshirueshmërisë.

LITERATURA

1. "Albright's chemical engineering handbook", editor Lyle Albright, 2009 CRC Press by Taylor & Francis Group, LLC.
2. Sh. Kelmendi, I. Zeqiri, "Metodat matematikore në inxhinieri", Mitrovicë, 2006
3. APV Americas, Engineered Systems, "Distillation Handbook 4th Ed", 2007
4. CHEMCAD Version 6 User Guide, 2008
5. "Distillation Columns in CHEMCAD 6.1", rev. 050107
6. W. McCabe, J.C. Smith, P. Harriott "Unit Operations Of Chemical Engineering 5th Ed", McGraw-Hill 1993.
7. CHEMCAD 6.1
8. MINITAB 14.