

Diss. ETH No. 11210

Synthesis and Design of Distillation Systems Considering Complex Columns and Nonsharp Splits for the General Separation Problem

A dissertation submitted to the
SWISS FEDERAL INSTITUTE OF TECHNOLOGY
ZURICH

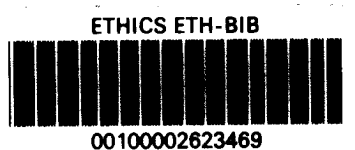
for the degree of
Doctor of Technical Sciences

presented by
ZHENGYU HU
M.S. Beijing University of Chemical Technology
born November 19, 1963
citizen of China

accepted on the recommendation of
Prof. Dr. M. Morari, examiner
(in succession of the late Prof. Dr. D.W.T. Rippin)
Prof. Dr. Ph. Rudolf von Rohr, co-examiner



1995



Abstract

The general separation problem, which is to transform several feed mixtures into several product mixtures, has proved to be one of the most challenging problems in process synthesis and design. In this work, a systematic approach is presented to synthesize optimum distillation systems for the problem by considering simultaneously both simple and complex columns and both sharp and nonsharp splits. The approach describes a superstructure of design alternatives as a mixed-integer nonlinear programming (MINLP) problem. The design and operating parameters of each column, such as the reflux ratio, column pressure and feed tray location, can be optimized simultaneously with the selection of the distillation configuration.

The proposed synthesis methodology consists of: (a) a systematic procedure for developing superstructure representations for distillation system configurations, (b) two alternative procedures for shortcut process modeling and economic evaluation, (c) a mixed-integer nonlinear programming (MINLP) formulation of the problem, (d) a solution technique of the formulation, and (e) a heuristic method for the synthesis of initial sharp separation schemes.

Based on binary tree and AND/OR graph representations, appropriate superstructures for the general or any restricted separation problem are generated systematically which are capable of embedding a wide range of useful distillation configurations and include options for redundant columns and operations of stream bypassing, splitting and mixing. One of the two shortcut column models derived corresponds to the Fenske-Underwood-Gilliland design procedure for simple columns, while the other represents a new description of distillation columns which permits arbitrary combinations of a theoretical

model for various types of equilibrium stages and a group model for counter-current sections with any number of adiabatic equilibrium stages. The solution technique of the formulated MINLP problem is based upon Generalized Benders Decomposition and can exploit the special structure of the MINLP. The heuristic method offers a simple and effective means of synthesizing the initial separation schemes which feature a minimum number of simple sharp separators and may include operations of stream bypassing, splitting and mixing for multicomponent products. In the overall synthesis methodology, this method has served as an efficient initialization procedure for the MINLP optimization step.

The generality and effectiveness of the synthesis methodology has been demonstrated by application to a number of examples involving single and multiple feeds and pure and mixed products. This work represents a crucial step toward the development of an automated synthesis tool for the general separation problem based on ordinary distillation and all its special cases. All the constituent procedures of the overall synthesis methodology can be automated and integrated for the steps of the generation of superstructure representations and the formulation, initialization and solution of the MINLP optimization problem.

Zusammenfassung

Das generelle Trennproblem, welches darin besteht, mehrere Eingangsströme in mehrere Ausgangsströme umzuwandeln, ist eines der anspruchvollsten Probleme in Prozesssynthese und Prozessdesign. In dieser Arbeit wird ein systematischer Zugang präsentiert, um optimale Destillationssysteme darzustellen, welche gleichzeitig einfache und komplexe Kolonnen und scharfe (vollständige) und unscharfe Trennungen enthalten können. Der Zugang beschreibt eine Superstruktur von Entwurfsalternativen als gemischt-ganzzahliges nichtlineares Programmierungsproblem (MINLP von mixed-integer nonlinear programming). Die Entwurfs- und Betriebsparameter für jede Kolonne, wie das Rücklaufverhältnis, der Kolonnendruck und die Position des Zufuhrbodens, können gleichzeitig mit der Wahl der Anlagenkonfiguration optimiert werden.

Die vorgeschlagene Methode besteht aus: (a) einer systematischen Prozedur, um die Superstruktur des Destillationssystems zu repräsentieren; (b) zwei alternativen Prozeduren, um den Prozess vereinfacht zu modellieren und dessen Wirtschaftlichkeit beurteilen; (c) einer gemischt-ganzzahligen Formulierung des Problems; (d) einem Lösungsansatz für das Problem; und (e) einer heuristischen Methode für die Synthese der anfänglichen scharfen Separations-schemata.

Passende Superstrukturen, welche weite Bereiche von nützlichen Destillationskonfigurationen umfassen, werden systematisch erzeugt, basierend auf binären Bäumen und UND/ODER grafischen Darstellungen. Eines der abgeleiteten, vereinfachten Kolonnenmodelle entspricht der Fenske-Underwood-Gilliland Entwurfsvorschrift für einfache Kolonnen, während das

andere eine neue Beschreibung von Destillationskolonnen darstellt, welches beliebige Kombinationen von verschiedenen theoretischen Modellen für verschiedene Typen von Gleichgewichten mit einer Gruppe von Modellen für Gegenstromsektionen mit einer beliebigen Nummer von adiabatischen Gleichgewichtspunkten ermöglicht. Der Lösungsansatz für das so formulierte MINLP-Problem basiert auf der "Generalized Benders Decomposition" und nützt die spezielle Struktur dieser MINLP-Probleme aus. Die heuristische Methode bietet ein einfaches und effizientes Mittel, um die Anfangstrennschemata darzustellen, die eine minimale Anzahl von einfachen scharfen Trennstufen und der Möglichkeit Ströme zu teilen und zu mischen, generieren. In der Anwendung half diese Methode die MINLP effizient zu initialisieren.

Die Anwendbarkeit und die Effizienz der vorgeschlagenen Methode wurde an verschiedenen Beispielen gezeigt, welche reine oder gemischte Produkte aus einem oder mehreren Eduktströmen erzeugen. Diese Arbeit stellt einen bedeutenden Schritt hin zum einem automatisierten Synthesewerkzeug sowohl für das generelle Trennproblem als auch für alle Sonderfälle dar. Alle verwendeten Prozeduren können automatisiert und integriert werden.