

ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΗ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΚΑΙ ΕΚΤΙΜΗΣΗ ΠΑΡΑΜΕΤΡΩΝ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ ΡΕΥΣΤΟΣΤΕΡΕΑΣ ΚΛΙΝΗΣ ΓΙΑ ΤΗΝ ΑΠΕΝΕΡΓΟΠΟΙΗΣΗ ΚΑΤΑΛΥΤΩΝ

Σ. Α. Παπαδοπούλου, Γ. Κοκολάκη, Ι. Αναστασίου
Τμήμα Αυτοματισμού - ΤΕΙ Θεσσαλονίκης, Τ.Θ. 14561, 54101, Θεσσαλονίκη

Σ. Βουτετάκης, Π. Σεφερλής
Ινστιτούτο Τεχνικής Χημικών Διεργασιών (ΙΤΧΗΔ)-ΕΚΕΤΑ, Τ.Θ. 361, 57001, Θέρμη-Θεσσαλονίκη

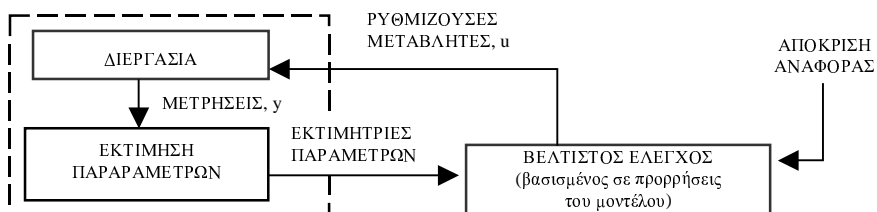
ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Για την αξιολόγηση των καταλυτών που χρησιμοποιούνται σε βιομηχανικές μονάδες καταλυτικής πυρόλυσης (FCC) απαιτείται η επεξεργασία δειγμάτων καταλύτη σε συνθήκες που προσομοιάζουν τη διεργασία απενεργοποίησής τους στη μονάδα κυκλικής απενεργοποίησης καταλυτών (CPS) του ΙΤΧΗΔ/ΕΚΕΤΑ. Σκοπός της παρούσας εργασίας είναι η ανάπτυξη ενός μαθηματικού μοντέλου καταναμημένων παραμέτρων, κατά την ακτινική και αξονική διεύθυνση, που να περιγράφει τη δυναμική συμπεριφορά της μεταφοράς θερμότητας με συναγωγή και αγωγή κατά τη θέρμανση και ψύξη της μονάδας. Η εκτίμηση των παραμέτρων του μοντέλου γίνεται με δυναμικά πειραματικά δεδομένα από την πιλοτική μονάδα με τη μέθοδο της μέγιστης πιθανοφάνειας (maximum likelihood).

ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Η σωστή λειτουργία της μονάδας για την παραγωγή καταλυτών με προκαθορισμένη ποιότητα εξαρτάται απόλυτα από τον ακριβή έλεγχο της θερμοκρασίας μέσα στον αντιδραστήρα για τους εξής λόγους:

- Η θερμοκρασία πρέπει κατά το στάδιο της προθέρμανσης να ακολουθεί προκαθορισμένες βηματικές μεταβολές.
- Υπάρχουν μεγάλοι μεταβαλλόμενοι νεκροί χρόνοι λόγω του εύρους λειτουργίας.
- Στο τελικό στάδιο της θέρμανσης δεν πρέπει να έχουμε πάνω από 2% υπέρβαση της θερμοκρασίας για να μην καταστραφεί ο καταλύτης.



Σχήμα 1. Βέλτιστος έλεγχος υποστηριζόμενος από δυναμικό μαθηματικό μοντέλο.

Για την ανάπτυξη ενός αξιόπιστου συστήματος βέλτιστου ελέγχου (Σχήμα 1) [1] απαιτείται ένα δυναμικό μαθηματικό μοντέλο που θα αναπαριστά τη συμπεριφορά της ασυνεχούς και

κατανεμημένης διεργασίας. Το μοντέλο κατάστασης περιλαμβάνει πραγματικές παραμέτρους με φυσική υπόσταση. Η αξιολόγηση και ταυτοποίηση του μοντέλου προϋποθέτει την εκτίμηση των παραμέτρων του με χρήση των μετρούμενων μεταβλητών που λαμβάνονται από τη μονάδα.

ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΤΗΣ ΜΟΝΑΔΑΣ

Η μονάδα κυκλικής απενεργοποίησης καταλυτών καταλυτικής πυρόλυσης με προπυλένιο χρησιμοποιείται για την προετοιμασία των καταλυτών FCC προς αξιολόγηση. Αποτελείται από κυλινδρικό αντιδραστήρα ρευστοστερεάς κλίνης, που θερμαίνεται από τέσσερις ηλεκτρικές αντιστάσεις τοποθετημένες σε πυρίμαχο υλικό κυκλικά του αντιδραστήρα. Η μονάδα καλύπτεται από μονωτικό υλικό για τη μείωση των απωλειών ενέργειας. Η διαδικασία της απενεργοποίησης είναι ασυνεχής και περιλαμβάνει εναλλασσόμενα στάδια αναγωγής και οξειδωσης με αντίστοιχες ενδόθερμες και εξώθερμες αντιδράσεις. Η αναγωγή επιτυγχάνεται μέσω ρεύματος που περιέχει ατμό και προπυλένιο, ενώ για την οξειδωση και καύση του κωκ απαιτείται διοξείδιο του θείου, αέρας και ατμός. Ανάμεσα στα στάδια τροφοδοτείται ρεύμα αζώτου. Η απενεργοποίηση του καταλύτη επιτυγχάνεται με υδροθερμική διάσπαση ενώ ταυτόχρονα εναποτίθενται σ' αυτόν τα μέταλλα με τα οποία είναι εμποτισμένος. Αφού γίνει η εισαγωγή του καταλύτη στον αντιδραστήρα, ο φούρνος θερμαίνεται κατά στάδια μέχρι να φτάσει στην επιθυμητή θερμοκρασία (780°C). Η διαδικασία της θέρμανσης πρέπει να είναι ακριβής και να εκτελείται με προκαθορισμένο και συνεχή τρόπο. Αυτό κρίνεται απαραίτητο να συμβαίνει καθώς, ακόμα και μικρές σχετικά μεταβολές στη θερμοκρασία μπορούν να δώσουν μη αποδεκτές ιδιότητες στον επεξεργασμένο καταλύτη. Στο τέλος της διαδικασίας, μετά από ~22 ώρες, ο καταλύτης πρέπει να έχει τις ακριβείς μακροσκοπικές ιδιότητες, που ταιριάζουν περίπου σ' αυτόν της βιομηχανικής διαδικασίας.

ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΗ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ

Το μαθηματικό μοντέλο προσομοιώνει μία ασυνεχή δυναμική διεργασία με μεγάλες θερμοκρασιακές μεταβολές (200°C-780°C), καθώς η δυναμική του συστήματος μεταβάλλεται λόγω της κυκλικής αλλαγής των συνθηκών από ενδόθερμες σε εξώθερμες. Το μοντέλο χωρίζεται σε πέντε ζώνες κατά μήκος του αντιδραστήρα κατ' αντιστοιχία με τις ζώνες θέρμανσης. Σε κάθε ζώνη αναπτύσσονται οι εξισώσεις μεταφοράς θερμότητας για κάθε διαδοχικό στρώμα στην ακτινική διεύθυνση της μονάδας (εσωτερικό αντιδραστήρα, τοίχωμα αντιδραστήρα, διάκενο ανάμεσα στο τοίχωμα και την αντίσταση, ηλεκτρική αντίσταση, μονωτής, εξωτερικό μεταλλικό κάλυμμα). Η μεταφορά θερμότητας γίνεται με τους μηχανισμούς της αγωγής και συναγωγής σε κάθε ζώνη θέρμανσης ως προς την αξονική, z και ακτινική διεύθυνση, r. Οι αρχικές τιμές για τις παραμέτρους του μοντέλου ορίστηκαν από τη βιβλιογραφία σε αντιστοιχία με τα συγκεκριμένα υλικά και τις λειτουργικές συνθήκες. Λαμβάνοντας υπόψη τα διαφορετικά γεωμετρικά χαρακτηριστικά για κάθε ζώνη η εξίσωση μεταφοράς θερμότητας στην περιοχή της ψευδο-ομογενούς ρευστοστερεάς κλίνης του καταλύτη [2] δίνεται από:

$$\rho C p_{cat} \frac{\partial T}{\partial t} + (\rho C p_{cat} U_z) \frac{\partial T}{\partial z} = k_{cat} \left[\frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \left(\frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) \right) \right] \quad (1)$$

$$-k_{cat} \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{L=L_b} = h_u [T_u(r) - T(L_b, r)] \quad \text{για } L=L_b \quad (1.1)$$

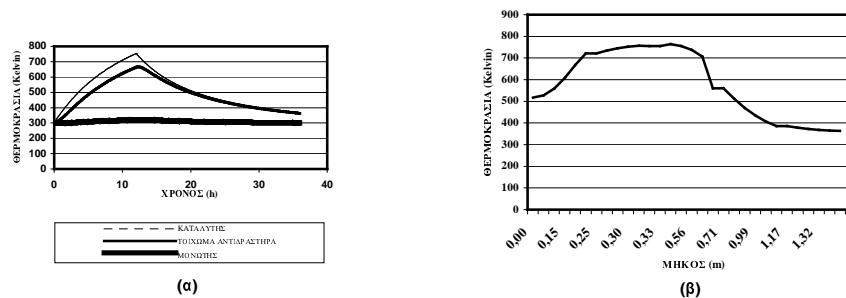
$$-k_{cat} \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{L=L_a} = h_l [T(L_a, r) - T_l(r)] \quad \text{για } L=L_a \quad (1.2)$$

$$-k_{cat} \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{R=R_a} = 0 \quad \text{για } R=R_a \quad (1.3)$$

$$-k_{cat} \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{R=R_b} = h_{cat} [T(z, R_b) - T_b(z)] \quad \text{για } R=R_b \quad (1.4)$$

Όπου T αντιστοιχεί στη θερμοκρασία, k στη θερμική αγωγιμότητα, h στο συντελεστή μεταφοράς θερμότητας, R στην ακτινική και L στην αξονική απόσταση αντίστοιχα. Οι δείκτες u και l αντιστοιχούν στις θερμοκρασίες των παρακείμενων ζωνών στην αξονική διεύθυνση και a και b αντιστοιχούν στα όρια του κάθε στρώματος.

Στο Σχήμα 2 δίνονται τα αποτελέσματα προσομοίωσης στο gPROMS [3] που αντιστοιχούν σε διαδικασία θέρμανσης και ψύξης της μονάδας. Η διακριτοποίηση των μερικών διαφορικών εξισώσεων γίνεται με αντίστροφες πεπερασμένες διαφορές και ορθογώνια ταξίθεσία σε πεπερασμένα στοιχεία στην αξονική και ακτινική διεύθυνση αντίστοιχα.



Σχήμα 2. (α) Θερμοκρασιακή μεταβολή καταλύτη, τοιχώματος αντιδραστήρα, μονωτή και (β) αξονική μεταβολή θερμοκρασίας του καταλύτη.

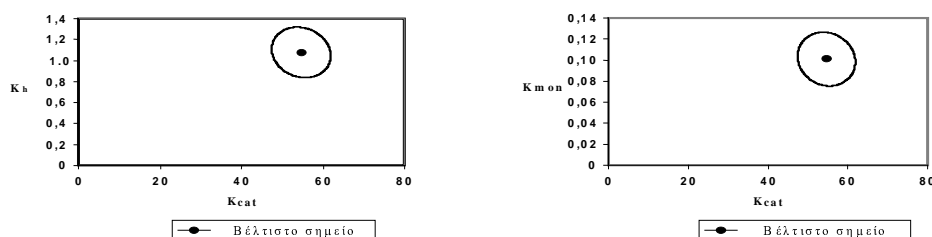
ΕΚΤΙΜΗΣΗ ΠΑΡΑΜΕΤΡΩΝ

Για την αξιολόγηση της αξιοπιστίας του μοντέλου προχωρήσαμε στην εκτίμηση κρίσιμων παραμέτρων του. Οι εκτιμώμενες παράμετροι επιλέχθηκαν τόσο με βάση την ευαισθησία του μοντέλου ως προς αυτές αλλά και τη θέση των διαθέσιμων μετρήσεων. Η εκτίμησή τους έγινε με τη μέθοδο της μέγιστης πιθανοφάνειας [4]. Η μεταβλητότητα των μετρήσεων θεωρήθηκε σταθερή και γνωστή. Χρησιμοποιήθηκαν δυναμικά πειραματικά δεδομένα από τρία πειράματα με διαφορετικές αρχικές και λειτουργικές συνθήκες (Πείραμα 1: Θέρμανση – Ψύξη σε μία ζώνη, Πείραμα 2: Θέρμανση σε μια ζώνη, Πείραμα 3: Θέρμανση – Ψύξη – Θέρμανση – Ψύξη, σε τέσσερις ζώνες). Οι παράμετροι που εκτιμήθηκαν είναι η θερμική αγωγιμότητα του καταλύτη, k_{cat} , του τοιχώματος, k_{tube} , της αντίστασης, k_h , και του μονωτή, k_{mon} , καθώς και η θερμοχωρητικότητα του πυρίμαχου υλικού της αντίστασης. Οι τιμές των παραμέτρων δίνονται στον Πίνακα 1. Στο Σχήμα 3 παρουσιάζονται τα ελλειψοειδή των κοινών διαστημάτων εμπιστοσύνης των παραμέτρων ενώ στο Σχήμα 4 γίνεται σύγκριση των πειραματικών και προσομοιωμένων αποτελεσμάτων με ικανοποιητική σύγκλιση. Τα σφάλματα οφείλονται στην αβεβαιότητα της πραγματικής θέσης των θερμοστοιχείων εντός του αντιδραστήρα, στα σφάλματα μέτρησης καθώς και στην παραδοχή των σταθερών φυσικών ιδιοτήτων κατά τη

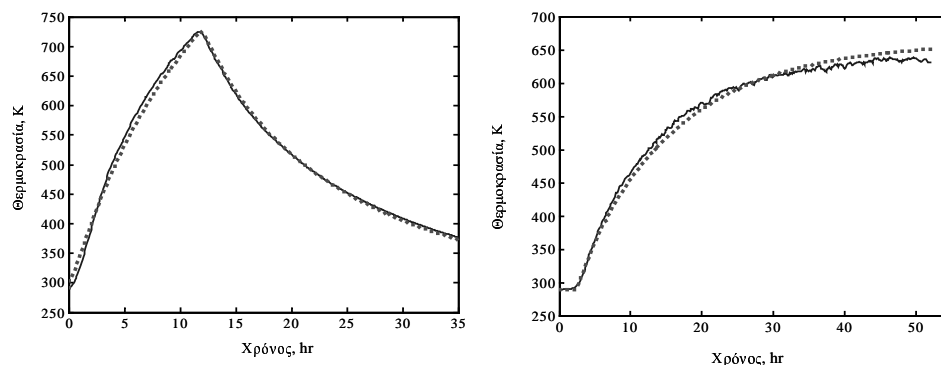
διάρκεια της λειτουργίας της μονάδας.

Πίνακας 1. Εκτιμήσεις τιμών παραμέτρων – Στατιστικά στοιχεία

Παράμετρος	Αρχική τιμή	Εκτίμηση	Διάστημα εμπιστοσύνης 95%	Τυπική απόκλιση
k_{cat}	3.54E+01	5.46E+01	5.99E-01	3.05E-01
k_{tube}	3.70E+02	2.55E+02	3.30E+00	1.68E+00
k_h	9.00E-01	1.08E+00	1.99E-02	1.02E-02
k_{mon}	1.80E-01	1.01E-01	2.11E-03	1.08E-03
ρC_p	4.45E+06	4.50E+06	1.05E+04	5.38E+03



Σχήμα 3. Κοινά διαστήματα εμπιστοσύνης ζευγών παραμέτρων (95% συντ. εμπιστοσύνης).



Σχήμα 4. Σύγκριση πειραματικών (συνεχείς καμπύλες) και προσομοιωμένων (διακεκομμένες καμπύλες) αποτελεσμάτων για τη θερμοκρασία στον καταλύτη.

ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Ολοκληρώθηκε με επιτυχία η ανάπτυξη του δυναμικού δισδιάστατου (r,z) μοντέλου του αντιδραστήρα ρευστοστερεάς κλίνης CPS προετοιμασίας καταλυτών, έγινε εκτίμηση των παραμέτρων και ταυτοποιήθηκε το μοντέλο με βάση δυναμικά πειραματικά δεδομένα της μονάδας. Το ταυτοποιημένο μοντέλο θα αποτελέσει τη βάση για την ανάπτυξη ενός μη γραμμικού βέλτιστου συστήματος ελέγχου της μονάδας.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] Marlin T.E., “Process Control”, McGraw Hill, N.Y. (1995).
- [2] Bird R.B., Stewart W.E., Lightfoot E.N., “Transport Phenomena”, Wiley Int. Ed., N.Y. (1960).
- [3] Process Systems Enterprise, gPROMS, Version 2.33, User’s Guide, 2004.
- [4] Stortelder W.J.H., “Parameter Estimation in Nonlinear Dynamical Systems”, Ph. D Thesis, University of Amsterdam (1998).