

SLOVENSKÁ TECHNICKÁ UNIVERZITA V BRATISLAVE
FAKULTA CHEMICKEJ A POTRAVINÁRSKEJ TECHNOLOGIE

MODELOVANIE A RIADENIE PROCESOV S VYUŽITÍM
SOFTVÉRU UNISIM DESIGN

DIPLOMOVÁ PRÁCA

FCHPT-5414-49743

SLOVENSKÁ TECHNICKÁ UNIVERZITA V BRATISLAVE
FAKULTA CHEMICKEJ A POTRAVINÁRSKEJ TECHNOLOGIE

MODELOVANIE A RIADENIE PROCESOV S VYUŽITÍM
SOFTVÉRU UNISIM DESIGN

DIPLOMOVÁ PRÁCA

FCHPT-5414-49743

Študijný program: I-AICHP Automatizácia a informatizácia v chémii a potravinárstve

Číslo a názov študijného odboru: 5.2.14 Automatizácia

Školiace pracovisko: OIRP ÚIAM FCHPT

Vedúci záverečnej práce/školiťel': Ing. Jana Závacká, PhD.

Bratislava 2012

Bc. Martin Cmarik



ZADANIE DIPLOMOVEJ PRÁCE

Študent: **Bc. Martin Cmarik**
ID študenta: 49743
Študijný program: automatizácia a informatizácia v chémii a potravinárstve
Študijný odbor: 5.2.14 automatizácia
Vedúca práce: Ing. Jana Závacká, PhD.

Názov práce: **Modelovanie a riadenie procesov s využitím softvéru UniSim Design**

Špecifikácia zadania:

- oboznámenie sa so softvérom UniSim Design
- tvorba funkčných modelov vybraných chemickotechnologických procesov pomocou softvéru UniSim Design
- riadenie vytvorených modelov pomocou navrhnutých regulátorov

Rozsah práce: 40

Riešenie zadania práce od: 13. 02. 2012

Dátum odovzdania práce: 19. 05. 2012


Bc. Martin Cmarik
študent




prof. Ing. Miroslav Fikar, DrSc.
vedúci pracoviska


prof. Ing. Miroslav Fikar, DrSc.
garant študijného programu

Pod'akovanie

Chcem sa pod'akovať vedúcej diplomovej práce Ing. Jane Závackej, PhD. za všetky cenné rady, pripomienky a odborné vedenie pri písaní mojej diplomovej práce.

Prehlásenie

Čestne prehlasujem, že som diplomovú prácu vypracoval samostatne podľa pokynov vedúcej diplomovej práce, s použitím literatúry, ktorú uvádzam v osobitnom zozname. Ďalej prehlasujem, že súhlasím s využitím diplomovej práce ústavom.

V Bratislave, 19. mája 2012

.....

Martin Cmarik

Abstrakt

Cieľom diplomovej práce bolo poukázať na možnosť a využitie softvéru UniSim Design pri modelovaní a riadení technologických procesov. Práca zahŕňa prístup k problematike výroby n – Heptánu a Toluénu v rámci separačných procesov. Vytvorením modelov dvoch rektifikačných kolón, čerpadiel, ohrievača, chladičov, zmiešavača a vyrovnávacích nádrží a ich korektným prepojením bolo možné následne pristúpiť k ich riadeniu. Na základe zistenia dynamiky procesu boli navrhnuté PI a PID regulátory, ktoré uriadili celý separačný proces v reálnych kontúrach. Inými slovami povedané, implementácia regulačných obvodov zabezpečila čistotu separovaných látok na pozadí stabilnej separačnej funkcie kolón.

Abstract

The aim of diploma thesis was to highlight the option and use UniSim Design software for modeling and process control. The work involves the approach to the production of n - Heptane and Toluene in the separation processes. By creating models of two rectifiers, pumps, heater, coolers, buffer tanks and mixer and with the correct connection, it can then proceed to their control. Based on the findings of the dynamics of the process have been proposed PI and PID controllers, which control entire separation process in real contours. In other words, implementation of control loops to ensure the purity of separated substances in the background of a stable function of the separation columns.

Obsah

Zoznam obrázkov	8
Zoznam tabuliek	10
Zoznam symbolov a skratiek	11
Úvod ..	12
1 TEORETICKÁ ČASŤ	13
1.1 Softvér UniSim Design	13
1.2 Extrakčná rektifikácia	16
1.3 Technologická schéma	19
2 EXPERIMENTÁLNA ČASŤ - PRÁCA V SOFTVÉRI UNISIM	
 DESIGN R390	23
2.1 Konfigurácia schémy pre separáciu	23
2.1.1 Konfigurácia prúdu zmesi do 1. kolóny	23
2.1.2 Konfigurácia 1. rektifikačnej kolóny	25
2.1.3 Konfigurácia prúdu zmesi do 2. kolóny.	29
2.1.4 Konfigurácia 2. rektifikačnej kolóny	32
2.1.5 Konfigurácia recirkulácie Fenolu	35
2.2 Porovnanie syntéz regulátorov	39
2.3 Riadenie 1. kolóny	46
2.3.1 Riadenie zádrže kvapaliny v kondenzátore pomocou refluxu.....	47
2.3.2 Riadenie teploty na hlave kolóny pomocou refluxu	51
2.3.3 Riadenie tlaku na hlave kolóny pomocou destilátu.....	53
2.3.4. Riadenie zádrže kvapaliny vo varáku pomocou prietoku zvyšku	60
2.4 Riadenie 2. kolóny	62
2.4.1 Riadenie teploty na hlave kolóny pomocou refluxu.....	62
2.4.2 Riadenie zádrže kvapaliny vo varáku pomocou zvyšku.....	63
2.5 Kompletizácia schémy.....	65
3 Záver	68
Zoznam použitej literatúry	70
Prílohy	71

Zoznam obrázkov

Obr. 1	Schéma procesného riešenia	14
Obr. 2	Prúdová schéma n – tej etáže	17
Obr. 3	T – x,y diagram rovnovážneho zloženia kvapaliny a pary n-Heptánu a Toluénu pri tlaku 101,3 kPa	19
Obr. 4	Technologická schéma separácie n-Heptánu a Toluénu	20
Obr. 5	Schéma konfigurácie vstupného prúdu pre 1. kolónu	24
Obr. 6	Konfigurácia čerpadla P – 101	24
Obr. 7	Konfigurácia ohrievača E – 100	25
Obr. 8	Konfigurácia zapojenia prúdov a tlakov pre kolónu T -100	26
Obr. 9	Definovanie špecifikácii pre kolónu T – 100	27
Obr. 10	Parametre etáži v kolóne T – 100	27
Obr. 11	Záznam hodnôt prúdov pre kolónu T – 100	28
Obr. 12	Záznam hodnôt zloženia prúdov pre kolónu T – 100	28
Obr. 13	Schéma výsledného zapojenia kolóny T – 100	29
Obr. 14	Konfigurácia parametrov nádrže V – 100	30
Obr. 15	Záznam hodnôt prúdov pre nádrž V – 100	31
Obr. 16	Schéma výslednej konfigurácie vstupného prúdu pre 2. kolónu	32
Obr. 17	Konfigurácia zapojenia prúdov a tlakov pre kolónu T – 101	33
Obr. 18	Definovanie špecifikácii pre kolónu T – 101	33
Obr. 19	Parametre etáži v kolóne T – 101	34
Obr. 20	Záznam hodnôt prúdov pre kolónu T – 101	34
Obr. 21	Záznam hodnôt zloženia prúdov pre kolónu T – 101	35
Obr. 22	Schéma výsledného zapojenia kolóny T – 101.	35
Obr. 23	Záznam hodnôt prúdov pre zmiešavač MIX – 100	36
Obr. 24	Konfigurácia zapojenia prúdov pre operátor recyklu RCY – 1	37
Obr. 25	Záznam hodnôt prúdov pre operátor recyklu RCY – 1.	38
Obr. 26	Schéma výsledného zapojenia technologickej schémy	39
Obr. 27	Konfigurovanie parametrov pre Autotuner a IMC Design	40
Obr. 28	Schéma ohrievača E – 100	40
Obr. 29	Zmena tlaku na hlave kolóny pri zmene otvorenia ventilu pre prúd destilátu	41
Obr. 30	Vykreslenie troch PCH a priemernej PCH	42
Obr. 31	Overenie identifikácie prenosu	42
Obr. 32	Bloková simulačná schéma riadenia s vyhodnotením IAE	43

Obr. 33 Schéma riadenia ohrievača E – 100 s regulátorom IC – 100.....	44
Obr. 34 Porovnanie riadenia teploty v ohrievači prostredníctvom navrhnutého PID regulátora, Autotunera a IMC Design.....	45
Obr. 35 Konfigurovanie parametrov pre spínač DIG – 1	46
Obr. 36 Schéma riadenia zádrže kondenzátora kolóny T – 100	47
Obr. 37 Zmena zádrže kvapaliny v kondenzátore pri meniacom sa refluxnom toku	48
Obr. 38 Vykreslenie troch PCH a priemernej PCH	48
Obr. 39 Overenie identifikácie prenosu	49
Obr. 40 Riadenie zádrže kvapaliny v kondenzátore refluxom Riverovým – Morariho PI regulátorom	50
Obr. 41 Riadenie zádrže kvapaliny v kondenzátore refluxom pomocou Autotunera.....	51
Obr. 42 Schéma riadenia teploty na hlave kolóny T – 100.....	52
Obr. 43 Riadenie teploty na hlave kolóny refluxom pomocou Autotunera.....	53
Obr. 44 Schéma riadenia tlaku na hlave kolóny T – 100.....	53
Obr. 45 Zmena tlaku na hlave kolóny pri zmene otvorenia ventilu pre prúd destilátu	54
Obr. 46 Vykreslenie troch PCH a priemernej PCH.	54
Obr. 47 Overenie identifikácie prenosu	55
Obr. 48 Riadenie tlaku na hlave kolóny zmenou otvorenia ventilu PI regulátorom navrhnutým Metódou požadovaného modelu.....	56
Obr. 49 Riadenie tlaku na hlave kolóny zmenou otvorenia ventilu PI Autotunerom.	57
Obr. 50 Schéma výsledného zapojenia hlavného a pomocného regulátora.....	58
Obr. 51 Schéma kaskády riadenia tlaku na hlave kolóny T – 100.....	58
Obr. 52 Vplyv poruchy molového toku Fenolu na riadenie tlaku na hlave kolóny.....	59
Obr. 53 Vplyv poruchy teploty Fenolu na riadenie tlaku na hlave kolóny.....	60
Obr. 54 Schéma riadenia zádrže kvapaliny vo varáku pre kolónu T – 100.....	60
Obr. 55 Schéma výsledného zapojenia hlavného a pomocného regulátora.....	58
Obr. 55 Porovnanie riadenia zádrže kvapaliny vo varáku zmenou otvorenia ventilu prostredníctvom PI a PID Autotunera	61
Obr. 56 Schéma riadenia teploty na hlave kolóny refluxom.	62
Obr. 57 Riadenie teploty na hlave kolóny refluxom pomocou PI regulátora z Autotunera.....	63
Obr. 58 Schéma riadenia zádrže kvapaliny vo varáku pre kolónu T – 101.....	64
Obr. 59 Riadenie teploty na hlave kolóny refluxom pomocou PI regulátora z Autotunera.....	65
Obr. 60 Výsledná schéma separácie zmesi s riadením	66

Zoznam tabuliek

Tab. 1	Vybrané balíky rovníc – <i>Fluid Packages</i> pre daný systém	15
Tab. 2	Vstupné parametre prúdov	23
Tab. 3	Zložky navrhnutých regulátorov pre IC – 100 a kvantifikácia IAE	43
Tab. 4	Zložky navrhnutých regulátorov pre LRC – 3 a kvantifikácia IAE	49
Tab. 5	Zložky navrhnutých regulátorov pre PRC – 1 a kvantifikácia IAE	55
Tab. 6	Zložky použitých regulátorov v schéme	67

Zoznam symbolov a skratiek

D	dopravné oneskorenie
IAE	integrálne kritérium kvality (integral absolute value of error)
PCH	prechodová charakteristika
PI	proporcionálno – integračný
PID	proporcionálno – integračno – derivačný
T	časová konštanta
Td	derivačná zložka regulátora
Ti	integračná zložka regulátora
SP	žiadaná hodnota
Z	zosilnenie
Zr	proporcionálna zložka regulátora

Úvod

Pri modelovaní prevádzok výroby je dôležité poznať riadené objekty a zabezpečiť kontinuálnu výrobu a kvalitu vyrábaných produktov. Na korektné riadenie akéhokoľvek objektu je potrebné poznať jeho správanie. Simulačné prostredie UniSim Designu uľahčuje riešenie práve v modelovaní a riadení prevádzok.

Prvá fáza práce opisuje prístup k problematike separácie a poukazuje na riešenia v modelovaní technologickej schémy a jej konfigurácii. Primárnymi objektmi správnej konfigurácie sú extrakčno – rektifikačná a rektifikačná kolóna, ktoré sú poprepájané s inými funkčnými operátormi s cieľom zabezpečiť správne fyzikálno – chemické parametre pre funkčnosť kolón.

Primárnym cieľom je zabezpečiť čistotu získavaných produktov separácie na pozadí stabilnej separačnej funkcie kolón. Cieľom je teda dosiahnutie 99% molového zlomku pre separovaný n – Heptán v prvej kolóne a 70% molového zlomku pre separovaný Toluén v druhej kolóne. Optimálnou syntézou PI a PID regulátorov, nachádzajúcich sa v druhej kapitole, je možné dosiahnuť tento cieľ. Na základe analýzy dynamiky jednotlivých procesov je možné navrhnúť konkrétny regulátor a simulačne v prostredí Matlab – Simulink vyhodnotiť integrálne kritérium kvality regulácie. Navrhnutý regulátor je následne implementovaný do riadenia v prostredí UniSim Design. Program taktiež umožňuje návrh regulátorov pomocou nástrojov Autotuner a IMC Design.

1 TEORETICKÁ ČASŤ

1.1 Softvér UniSim Design

Program UniSim Design ponúka interaktívne modelovanie procesov, ktoré umožňuje inžinierom vytvárať v rovnovážnom a dynamickom stave modely pri projektovaní zariadení, riešení problémov a monitorovaní výkonu. Využíva sa taktiež pri podnikateľskom plánovaní a v neposlednom rade pri školení obsluhy. UniSim Design umožňuje v rovnovážnom stave simulácie ropy, zemného plynu, rafinácie a taktiež simulácie iných chemických procesov [1].

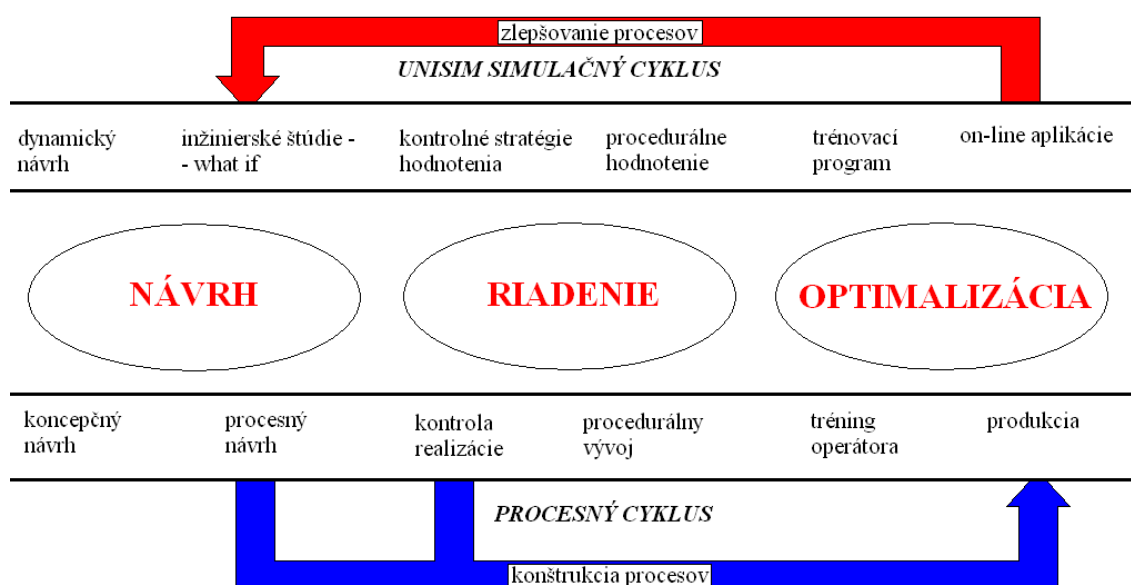
Jeho využiteľnosť sa uplatňuje v praxi aj tým, že je navrhnutý pre integráciu s inými systémami riadenia ako napríklad Yokagawa, Siemens a Emerson. Chemickí inžinieri sú schopní s týmto programom pružne modelovať s ohľadom na bezpečnosť a požadovaný zisk pri riadení. Sú schopní vidieť realizované zásahy skôr, ako by sa ukázali v reálnych podmienkach, kde by ich zmena bola nesmierne náročná. Okrem spomínaných benefitov, do značnej miery UniSim Design znižuje náklady na inicializáciu priemyselnej prevádzky, tým, že sa vyhodnotia čiastočné procesy s následnou optimalizáciou a odstránia sa vplyvy porúch ešte v rannej fáze.

Fundamentálne výhody

- využitie ‘what – if’ scenára a analýzy citlivosti na určenie optimálneho návrhu pre operačné a výrobné ciele
- zabezpečenie, aby procesné riadenie bolo správne realizované s danou špecifikáciou
- vyhodnotenie vplyvov zmien a porúch na procesnú bezpečnosť, spoľahlivosť a zisk
- monitorovanie výkonu zariadenia oproti daným očakávaniam
- zlepšenie procesného riadenia, funkčnosti a bezpečnosti pomocou dynamických simulačných modelov [2]

Pri použití spomínaného softvéru sa treba riadiť výberom balíka rovníc – *Fluid Packages*, ktoré charakterizujú zvolený proces. Tento výber je kľúčový a jeho nesprávna voľba zapríčiní v ďalších špecifikáciách jednotlivých komponentov nesprávne simulačné výsledky, alebo ukončenie ďalšieho postupu v modelovaní procesu. Databáza komponentov predstavuje prvky a chemické zlúčeniny, ktoré je možné si zvoliť pre daný proces. Podobne databáza operátorov v simulačnom okne umožňuje variabilne namodelovať technologický proces. Práve široké spektrum prvkov, chemických zlúčenín a operátorov, ktoré charakterizujú daný operačný proces, zaraďuje UniSim Design medzi popredné programy na modelovanie a riadenie v priemysle.

Schéma, ktorá znázorňuje vývoj od návrhu procesu až po samotnú produkciu s využitím tohto softvéru je znázornená na obrázku 1.



Obr. 1: Schéma procesného riešenia [3]

Použitie balíkov rovníc – *Fluid Package*

Pri modelovaní procesu sa často stretávame s problematikou správnej definície balíka rovníc, pomocou ktorých program kalkuluje prietokové a termodynamické charakteristiky zložiek a zmesí. V tabuľke 1 sú uvedené jednotlivé balíky rovníc, ktoré sú typizujúce pre určitý okruh chemickotechnologických procesov [4].

Tab. 1: Vybrané balíky rovníc – *Fluid Packages* pre daný systém

Typ systému	Doporučená metóda
Trietylén glykol dehydratácia	Peng - Robinson
Kyslá voda	Peng - Robinson, Sour Peng – Robinson
Kryogénne spracovanie zemného plynu	Peng – Robinson, Peng – Robinson Stryjek – Vera
Separácia vzduchu	Peng – Robinson, Peng – Robinson Stryjek – Vera
Vákuové veže	Peng – Robinson, Braun K10, Esso K
Etylénové veže	Lee Kesler Plocker
H ₂ systémy	Peng – Robinson, Zudkevitch Joffee alebo Grayson - Streed
Systémy nádrží	Steam Package, Chao – Seader alebo Grayson - Streed
Inhibícia hydrátov	Peng - Robinson
Chemické systémy	Activity Models, Peng – Robinson Stryjek – Vera
HF alkylácia	Peng – Robinson Stryjek – Vera, Non – Random – Two - Liquid
Trietylén glykol dehydratácia s aromátmi	Peng – Robinson
Uhl'ovodíkové systémy, kde je dôležitá ich rozpustnosť v H ₂ O	Kabadi Danner
Voda	ASME Steam

Peng – Robinson

Tento model je ideálny pre výpočty a simulácie uhl'ovodíkových systémov. Nie je vhodný pre vysoko neideálne systémy.

Peng – Robinson Stryjek – Vera

Pri tomto modeli sa jedná o rozšírenú modifikáciu Peng – Robinson metódy. Využitie tejto metódy poskytuje lepšiu čistotu zložiek, rovnako aj flexibilné miešanie.

Soave – Redlich – Kwong

Táto metóda poskytuje porovnateľné výsledky ako Peng – Robinson, ale jej rozsah je obmedzený a nie je spoľahlivá pre neideálne systémy.

Braun K10

Tento model sa využíva pre systémy s ťažkými uhl'ovodíkmi práve pri nízkych tlakoch. Využíva Braunovú tlakovú konvergenciu s hodnotou $K = 68,95$ kPa.

Kabadi – Danner

Jedná sa o modifikáciu metódy SRK s vylepšením rovnováhy para – kvapalina – kvapalina pre vodno – uhl'ovodíkové systémy.

Lee – Kesler – Plocker

Presne opisuje metódu pre nepolárne látky a zmesi. Využíva sa pre plynnú a kvapalnú fázu.

Zudkevitch – Joffee

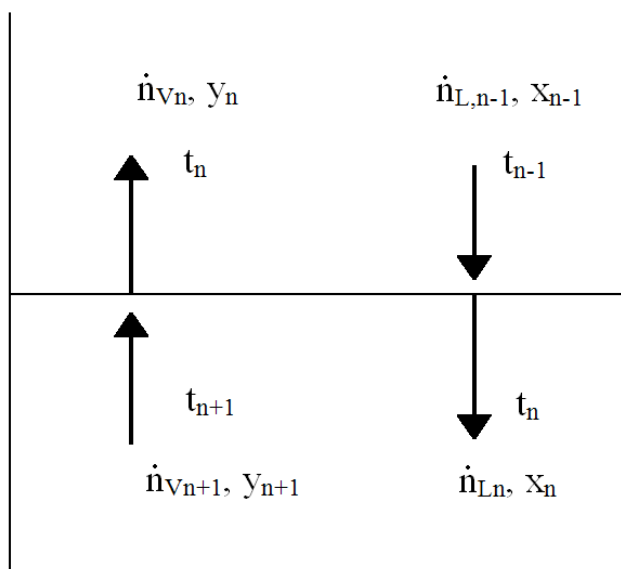
Je modifikáciou Redl Kwong stavovej rovnice, kde generuje tlaky pár zložiek s predikciou podľa Antoinovej rovnice. Lepšie predpovedá rovnováhu pre systém para – kvapalina a pre uhl'ovodíkové systémy, ktoré obsahujú vodík.

1.2 Extrakčná rektifikácia

Samotný prístup separácie zahŕňa problematiku separácie zložiek zmesi v rektifikačnej kolóne. Rektifikácia z hľadiska separácie predstavuje dôležitý proces

založený na odlišnom bode varu delených zložiek zmesi. Ak sú teploty varu týchto zložiek veľmi podobné, predstavujú azeotropickú zmes. V tomto bode treba uvažovať nad vhodným extrakčným činidlom, ktorého prítomnosť v rektifikačnej kolóne dokáže úspešne inicializovať proces separácie. Pri extrakčnej rektifikácii sa pridáva látka s teplotou väčšou ako teplota varu delených zložiek n – Heptánu ($t_{v\ n - \text{Heptán}} = 98,5\text{ }^{\circ}\text{C}$) a Toluénu ($t_{v\ \text{Toluén}} = 110,7\text{ }^{\circ}\text{C}$), v tomto prípade Fenol ($t_{v\ \text{Fenol}} = 181,9\text{ }^{\circ}\text{C}$).

Pri separácii je dôležitá rovnováha. Ak uvažujeme všeobecnú n – tú etáž, ktorá je znázornená na obrázku 2, tak para prichádzajúca z nižšej, $n + 1$ etáže, má teplotu t_{n+1} , molový zlomok zložky y_{n+1} a tok látkového množstva $\dot{n}_{V,n+1}$. Z vyššej etáže priteká spätný tok kvapaliny $\dot{n}_{L,n-1}$ s teplotou t_{n-1} a s molovým zlomkom zložky y_n a x_n pri rovnovážnej teplote t_n . Výmena látky medzi fázami je spôsobená tým, že para prechádza cez zádrž kvapaliny na etáži, ktorá je v dôsledku spätného toku z $n - 1$ etáže bohatšia o prchavejšiu zložku ako zodpovedá rovnováhe medzi kvapalinou a parou. Kontakt pary a kvapaliny tak súvisí s prestupom látky a tepla zároveň. Para sa obohacuje a kvapalina sa ochudobňuje o prchavejšiu zložku. Teploty fáz sa na teoretickej etáži vyrovnávajú, čo korešponduje s podmienkami rovnovážneho stavu [5].



Obr. 2: Prúdové schéma n – tej etáže [5]

Pomery na etáži možno opísať materiálovou bilanciou látkových množstiev (1) a bilanciou látkových množstiev zložky (2).

$$\dot{n}_{L,n-1} + \dot{n}_{V,n+1} = \dot{n}_{L,n} + \dot{n}_{V,n} \quad (1)$$

$$\dot{n}_{L,n-1}x_{n-1} + \dot{n}_{V,n+1}y_{n+1} = \dot{n}_{L,n}x_n + \dot{n}_{V,n}y_n \quad (2)$$

Entalpickú bilanciu n – tej etáže možno opísať pomocou vzťahu (3), kde $\Delta h_{V,n}$ je molové výparné teplo, stredná molová tepelná kapacita kvapaliny c_p^l , pary c_p^g , zmiešavacie teplo $\dot{S}$ a tepelné straty $\dot{Q}_{str}$. S ohľadom na to, že zjavné teplo kvapaliny a pary, zmiešavacie teplo a tepelné straty sa navzájom často kompenzujú, rovnicu entalpie potom možno vyjadriť vzťahom v tvare (4) [5].

$$\dot{n}_{L,n-1}c_{P,n-1}^l(t_{n-1} - t_n) + \dot{n}_{V,n+1}[\Delta h_{V,n+1} + c_{P,n+1}^g(t_{n+1} - t_n)] + \dot{S} = \dot{n}_{V,n}\Delta h_n + \dot{Q}_{str} \quad (3)$$

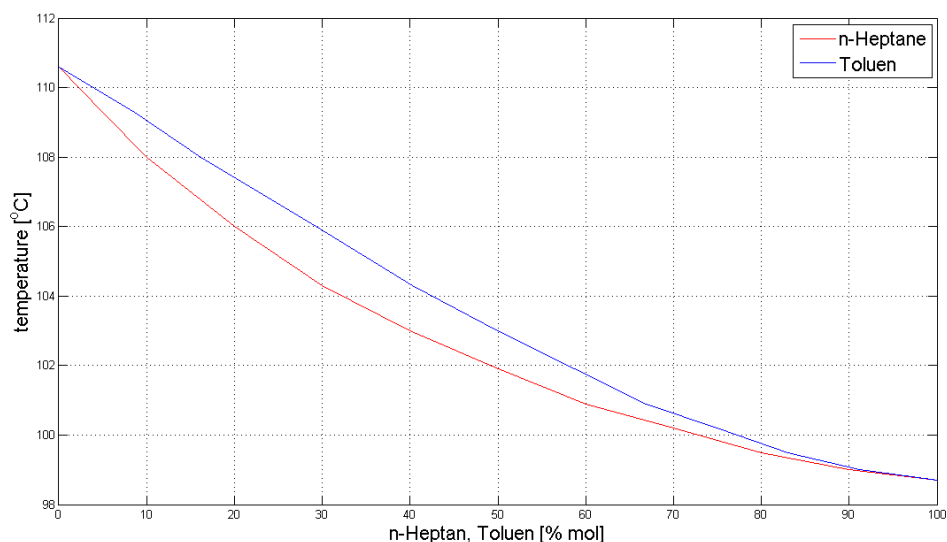
$$\dot{n}_{V,n+1}\Delta h_{V,n+1} = \dot{n}_{V,n}\Delta h_n \quad (4)$$

V literatúre [5] sa uvádza, že od voľby pracovných podmienok závisí úspešnosť separácie. Premenné, ako tlak, teplota, spotreba pomocnej látky a refluxný pomer sú navzájom závislé. Tlak a teplota v kolóne sú priamoúmerné závislé a zväčšujú sa s rastúcou spotrebou Fenolu, pretože ten je privádzaný pri vyššej teplote, ako teplota oddeľovaných zložiek. Rastúca teplota nepriaznivo vplýva na selektivitu pomocnej látky, teda Fenolu. Tlak v kolóne je potrebné udržiavať v maximálne miernom tlaku, najmä aby sa zabránilo vzniku dvoch kvapalných fáz. Všeobecne treba brať do úvahy, že s rastom spotreby pomocnej látky sa zvyšuje jej molový zlomok a tým aj selektivita. Ale zvyšovanie molového zlomku pomocnej látky sa prejavuje vo vyšších teplotách varu, čo na selektivitu vplýva negatívne. Nástreč Fenolu sa realizuje v blízkosti hlavy kolóny.

Účinnosť separácie spočíva vo vytváraní vodíkových mostíkov s jednou so zložiek, čím sa zníži jej parciálny tlak. Pomocná látka, teda Fenol, prakticky celá prejde

do zvyšku. Fenol ovplyvňuje relatívnu prchavosť zložiek a nevytvára azeotropickú zmes so zložkami.

Z rovnovážnej závislosti $t - x, y$, ktorá je znázornená na obrázku 3 vyplýva, že obidve krivky (krivka závislosti percentuálneho molového zloženia n – Heptánu od teploty a krivka závislosti percentuálneho molového zloženia Toluénu od teploty) sú relatívne blízko seba.

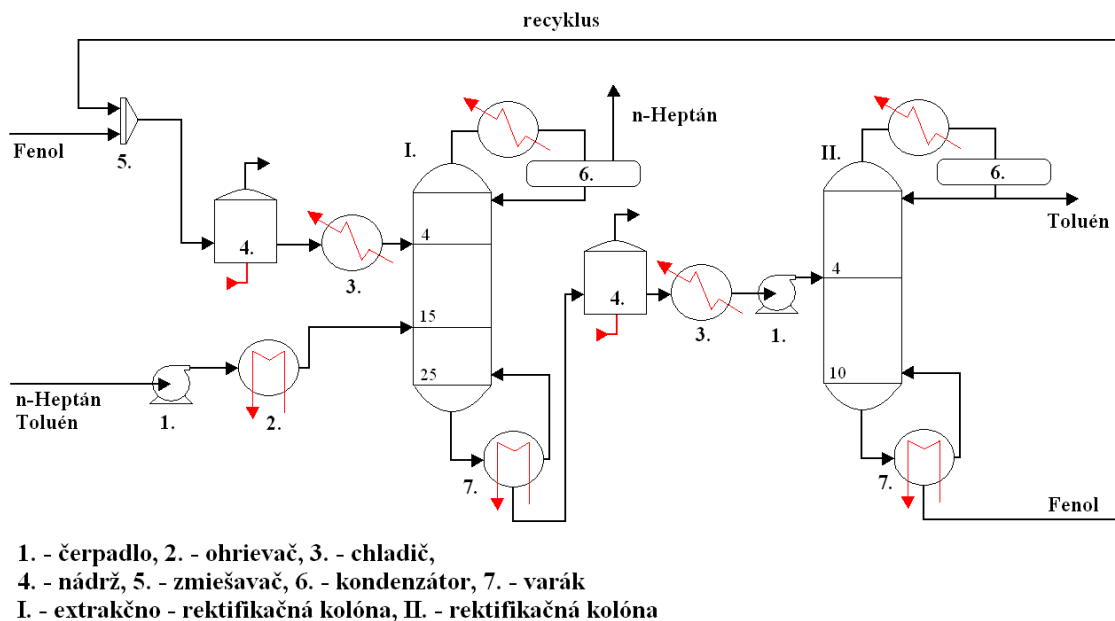


Obr. 3: $T - x, y$ diagram rovnovážneho zloženia kvapaliny a pary n – Heptánu a Toluénu pri tlaku 101,3 kPa

Pri separácii je vhodné, aby boli krivky čím ďalej od seba, potom je separácia kvalitnejšia, čo sa týka kvalitatívneho hľadiska. Ináč povedané, komplikovanosťou separácie tejto zmesi je relatívne blízka teplota varu zložiek zmesi. Pridaním fenolu sa zníži parciálny tlak jednej zo zložiek, čím možno úspešne separovať aj túto zmes, ktorá by za normálnej rektifikácie nebola úspešná.

1.3 Technologická schéma

Technologická schéma na obrázku 4 reprezentuje prístup k modelovaniu problematiky separácie n-Heptánu a Toluénu.



Obr. 4: Technologická schéma separácie n-Heptánu a Toluénu

Vstup do čerpadla reprezentuje zmes 50% n – Heptánu a 50% Toluénu. Ohrev tejto vstupujúcej zmesi je zabezpečený v ohrievači. Následne zmes ohriata na bod varu vstupuje do kolóny, kde je spolu s ňou privádzaný aj Fenol. V prvej kolóne dochádza k separácii n – Heptánu, pričom do zvyšku prejde podstatná časť Fenolu a Toluénu. Kolóna pracuje s kondenzátorom, ktorý všetok kvapalný destilát vracia späť do kolóny – totálny reflux. Odoberaný destilát odchádza v podobe plynnej fázy a zvyšok, ktorý sa získa, je vstupom do druhej kolóny, kde dochádza k separácii Toluénu.

Význam vyrovnávacej nádrže

Prepojenie týchto dvoch kolón je zabezpečené vyrovnávacou nádržou (obrázok 4), ktorá plní akumuláciu a čiastočne aj separačnú funkciu. Význam tejto nádrže je elementárny pre správny chod druhej kolóny, pretože každý výkyv molového toku vstupujúcej zmesi má vplyv na priebeh separácie. Jej separačná funkcia je použitá pre ďalšiu výrobu. Odchádzajúce pary sa môžu využiť pre paralelný proces spracovania zmesi n – Heptán, Toluén a Fenol s rovnakým pomerovým zastúpením. Ak dôjde k postupnému zaplaveniu tejto nádrže až po stanovený horný limit, tak spínač otvorí ventil na vypustenie parnej zmesi z nádrže. Použitie spínača ponúka investične nenáročné riešenie v prístupe k regulácii, kde nie je nutné až v takej časovej intenzite

regulovať výšku hladiny, nakoľko objemovo je táto nádrž dimenzovaná na 100 m³. Vo všeobecnosti sa akumulčné nádrže používajú v procesoch, kde je nutné zabezpečiť kontinuálny prísun vstupného prúdu do zariadenia.

Odchádzajúci prúd z nádrže sa ďalej upravuje v chladiči na požadovanú teplotu a zapojené čerpadlo mu dodáva tlak, aby nevstupoval na etáž druhej kolóny v podtlaku a príliš vysokej teplote. Absencia týchto činiteľov by spôsobila inú mieru separácie.

Druhá rektifikačná kolóna pracuje s totálnym kondenzátorom, bez možnosti odberania parnej fázy. Ináč povedané, časť destilátu sa odoberá a časť sa vracia späť do kolóny v podobe refluxného toku. Destilát z druhej kolóny tvorí z hlavnej časti Toluén a zvyšok je tvorený Fenolom ktorý sa použije ako extrakčné činidlo pre prvú kolónu. Táto recirkulácia Fenolu ho umožňuje regenerovať a tým pádom ušetriť čerstvý Fenol. Samozrejme pri nedostatočnom množstve regenerovaného Fenolu, je zabezpečený aj prívod čerstvého. Tieto prúdy sa zmiešavajú, pretože recirkulačný prúd obsahuje nepatrné množstvo Toluénu a čerstvý je stopercentný. Keďže recirkulačný prúd nemá konštantný molový tok, je opäť využitá analogická vyrovnávací nádrž. Extrakčný prúd je potom ešte upravený na požadovanú teplotu a pomocou operátora recyklu sa privádza na etáž prvej kolóny.

Operátor recyklu charakterizuje zapojenie, kde z vystupujúceho prúdu sa stáva vstupujúci. Umožňuje zanechať pôvodnú charakteristiku prúdu a povoliť jeho zmenu pri simulačnom móde. Bez tejto možnosti by softvér UniSim Design nevedel korektne nakonfigurovať vstup do prvej kolóny, pretože by ho nepoznal. Na zistenie správnej charakteristiky by totiž potreboval vypočítať výstup, ktorý je funkciou vstupu a teda by sa donekonečna cyklil v konvergencii jednotlivých kolón.

Samotná separácia je do značnej miery ovplyvnená charakteristikou extrakčnej a rektifikačnej kolóny a úspešnou reguláciou vstupných prúdov, pretože práve od nich závisí, nakoľko jednotlivé kolóny budú fungovať správne, so správnymi materiálovými a energetickými bilanciami. Zlyhaním korektnosti bilancií dochádza k ukončeniu simulácie a teda úspešná výroba produktov nie je realizovateľná. Predísť sa tomu dá

voľbou jednotlivých ventilov, ktoré sú schopné predchádzať spätnému, respektíve zápornému toku.

Ciele riadenia separácie

Primárnym cieľom je dosiahnutie čistoty separovaných zložiek. V prípade *n* – Heptánu to predstavuje aspoň 99% čistota a v prípade Toluénu aspoň 60 až 70%, v závislosti od kvality riadenia. Následne riadenie procesu rektifikácie je založené na správnosti výberu, ktorým prúdom sa bude aká veličina riadiť. Elementárne sa jedná o riadenie materiálových a energetických bilancií s primárnym cieľom zabezpečenia čistoty *n* – Heptánu a Toluénu pri danom molovom toku, ktorý je ohraničený v reálnych hraniciach, to znamená, že ľubovoľne nemôže dochádzať k zmene molového toku, pretože opäť by to viedlo k narušeniu bilancií a tým pádom k prerušeniu výroby. Sekundárny cieľ riadenia je udržať simuláciu v správnej charakteristike, ináč povedané udržať rovnováhu. Implementáciou spínačov a hlavne PI regulátorov s použitím jednoduchých a uzavretých regulačných obvodov sa dá relatívne uspokojivo uradiť daný systém. V prípade ak nastanú poruchy, ako napríklad zmeny molových tokov vstupných prúdov, zmeny veľkosti dodávaného tepla, jednotlivé regulačné obvody už nedokážu uregulovať systém v reálnych kontúrach. Tým pádom končí simulácia neúspešne.

Poruchy

Problémy pri riadení sú spôsobené primárne veľkými interakciami medzi premennými procesu. Poruchy, ktoré vznikajú, nie je možné uradiť, pretože mnohé nie sú merateľné, respektíve komplikovane sa identifikujú.

Elementárnu kapitolu porúch predstavujú minimálne zmeny vstupných prúdov do kolón. Aj napriek implementácii vyrovnávacích nádrží môže dochádzať k týmto poruchám, najmä ak dôjde k ich zaplneniu. Tým, že sa naplnia na maximálnu hodnotu svojho kapacitného objemu, ďalej už neplnia svoju akumulačnú funkciu. Všeobecne stačí výskyt akejkoľvek poruchy, ktorá tak spôsobuje veľké nelinearity v oblasti riadenia. Sekundárne, veľké dopravné oneskorenia a zotrvačnosť procesu spôsobujú komplikácie v oblasti riadenia procesu s cieľom dosiahnuť kvalitu separácie.

2 EXPERIMENTÁLNA ČASŤ - PRÁCA V SOFTVÉRI UNISIM DESIGN R390

2.1 Konfigurácia schémy pre separáciu

Po spustení programu UniSim Design R390 som zadefinoval balík rovníc Fluid Pkgs – Peng Robinson. Prúd Fenolu a zmesi n – Heptánu a Toluénu som definoval podľa tabuľky 2. Pre kompletný výpočet parametrov jednotlivých prúdov bolo postačujúce zadefinovať len uvedené hodnoty, ostatné určujúce údaje si program dopočítal na základe už uvedených.

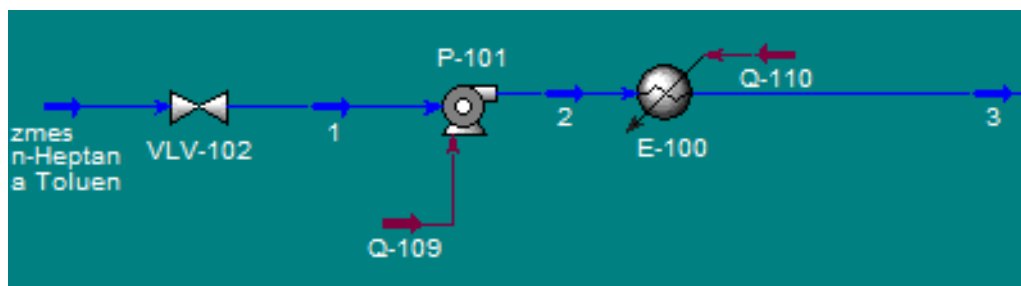
Tab. 2: Vstupné parametre prúdov

Parametre prúdu	Vstupné prúdy	
	n – Heptán a Toluén	Fenol
Para / Fáza frakcie	0	0
Teplota [°C]	30	120
Tlak [kPa]	144,7	171
Molový tok [kgmol/h]	100	500
Molový zlomok n - Heptánu	0,5	0
Molový zlomok Fenolu	0	1
Molový zlomok vody	0	0
Molový zlomok Toluénu	0,5	0

2.1.1 Konfigurácia prúdu zmesi do 1. kolóny

Privádzanú zmes n – Heptánu a Toluénu do kolóny bolo potrebné ohriať na požadovanú teplotu 93 °C a zabezpečiť, aby bola privádzaná do kolóny pri

požadovanom tlaku 125 kPa. Požadovaná teplota a tlak boli určené ako optimálne hodnoty pre danú separáciu. Správnou konfiguráciou čerpadla P – 101 a ohrievača E – 100, bolo možné splniť tento cieľ. Schéma, ktorá zobrazuje zapojenie vstupného prúdu zmesi n – Heptánu a Toluénu s čerpadlom a ohrievačom je na obrázku 5.



Obr. 5: Schéma konfigurácie vstupného prúdu pre 1. kolónu

Na obrázku 6 je zobrazený záznam hodnôt pre konfiguráciu čerpadla. Na výstupnom prúde 2 je s modrým zvýraznená požadovaná hodnota tlaku.

P-101

Worksheet

Conditions

Properties

Composition

PF Specs

Name	1	2	Q-109
Vapour	0,0000	0,0000	<empty>
Temperature [C]	10,00	10,01	<empty>
Pressure [kPa]	115,0	125,0	<empty>
Molar Flow [kgmole/h]	100,2	100,2	<empty>
Mass Flow [kg/h]	9634	9634	<empty>
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	12,61	12,61	<empty>
Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-1,077e+005	-1,077e+005	<empty>
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	-6,880	-6,879	<empty>
Heat Flow [kJ/h]	-1,079e+007	-1,079e+007	166,3

Design

Rating

Worksheet

Performance

Dynamics

Delete

OK

☒ On

☐ Ignored

Obr. 6: Konfigurácia čerpadla P – 101

Priama definícia týchto tlakov nie je záväzná. Inými slovami, ak sa zadefinujú rozdielne tlaky, od tých definovaných, program UniSim Design ich dokáže potom konvergovať k iným. Závisí to od výpočtu statickej simulácie, od tlakových diferencií ventilov, ktoré sa nachádzajú na vstupných prúdoch do ohrievača.

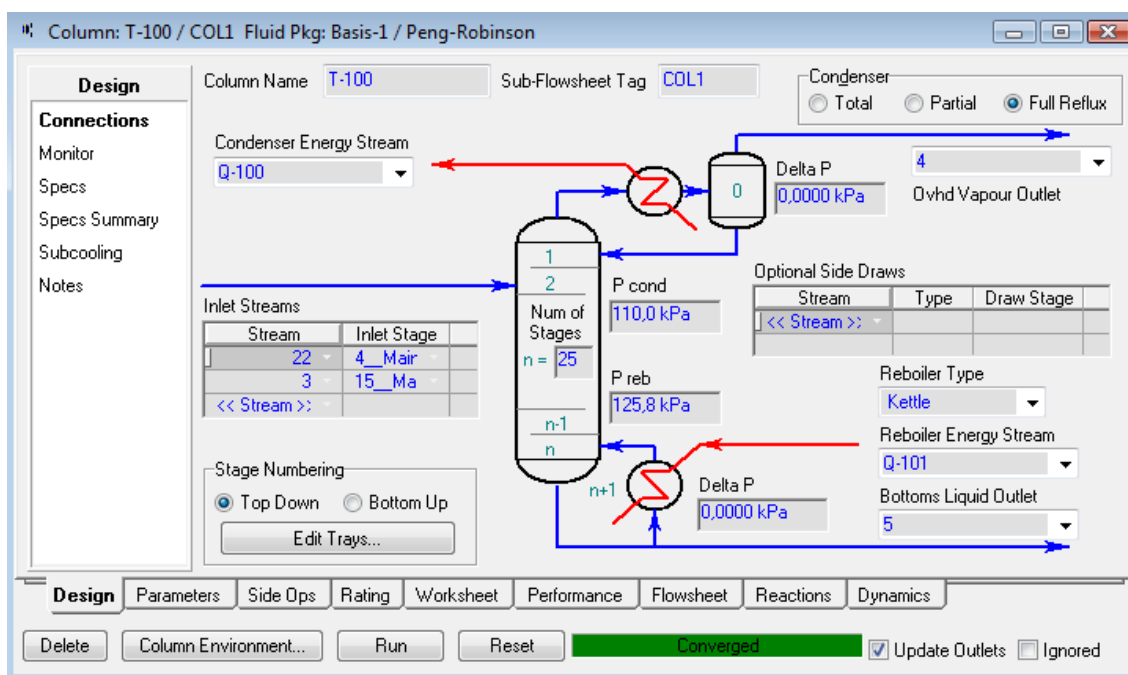
Parametre ohrievača E – 100 sú znázornené na obrázku 7. Pre vystupujúci prúd ohriatej zmesi 3 je s modrým zvýraznená výstupná teplota, ktorá je záväzná pre ďalšie výpočty, ktoré sa týkajú priamej konfigurácie špecifikácii kolóny T – 100.

	2	3	Q-110
Name			
Vapour	0,0000	0,0000	<empty>
Temperature [C]	10,01	93,00	<empty>
Pressure [kPa]	125,0	120,0	<empty>
Molar Flow [kgmole/h]	100,2	100,2	<empty>
Mass Flow [kg/h]	9634	9634	<empty>
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	12,61	12,61	<empty>
Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-1,077e+005	-9,184e+004	<empty>
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	-6,879	41,98	<empty>
Heat Flow [kJ/h]	-1,079e+007	-9,200e+006	1,587e+006

Obr. 7: Konfigurácia ohrievača E – 100

2.1.2 Konfigurácia 1. rektifikačnej kolóny

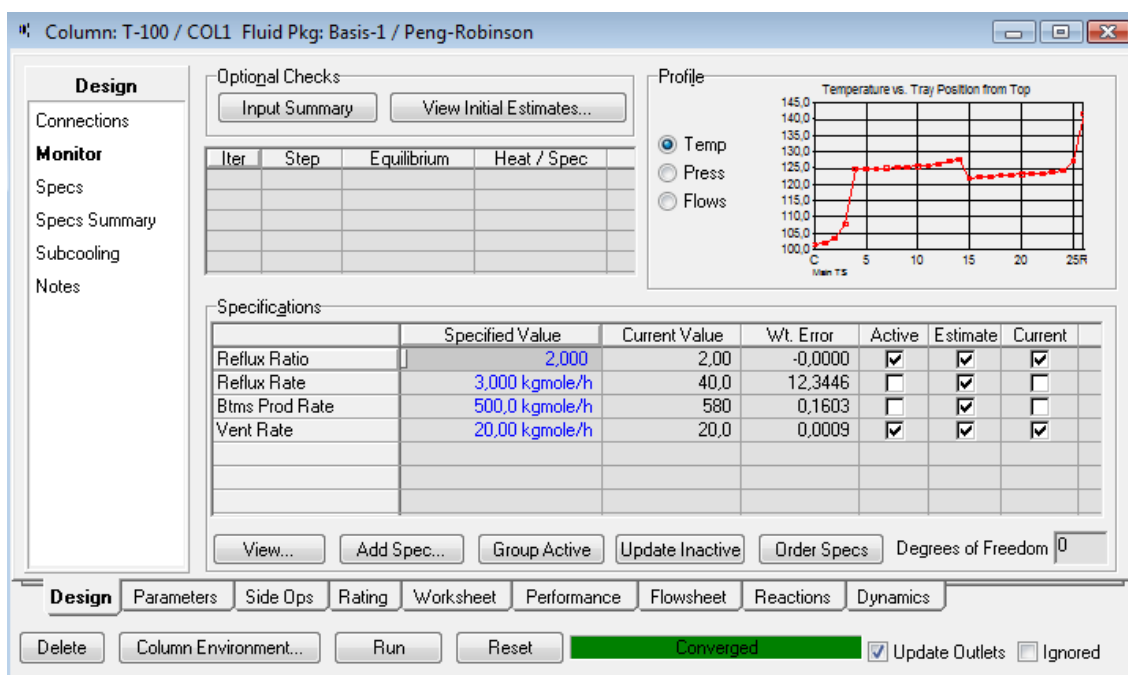
Konfigurácia prvej rektifikačnej kolóny, ktorá je zároveň aj extrakčnou, je delená na časti. Prvá časť, ktorá je zobrazená na obrázku 8, obsahuje definície tlakov na hlave a na dne kolóny, počet etáží a polohu nástrekových etáží. V ďalšom kroku sú to straty tlakov v kondenzátore a varáku, typ kondenzátora. Ostatné parametre už program dopočítal sám. Pri danom stupni voľnosti, bolo potrebné ešte definovať refluxný pomer, prípadne molový tok destilátu a zvyšku.



Obr. 8: Konfigurácia zapojenia prúdov a tlakov pre kolónu T -100

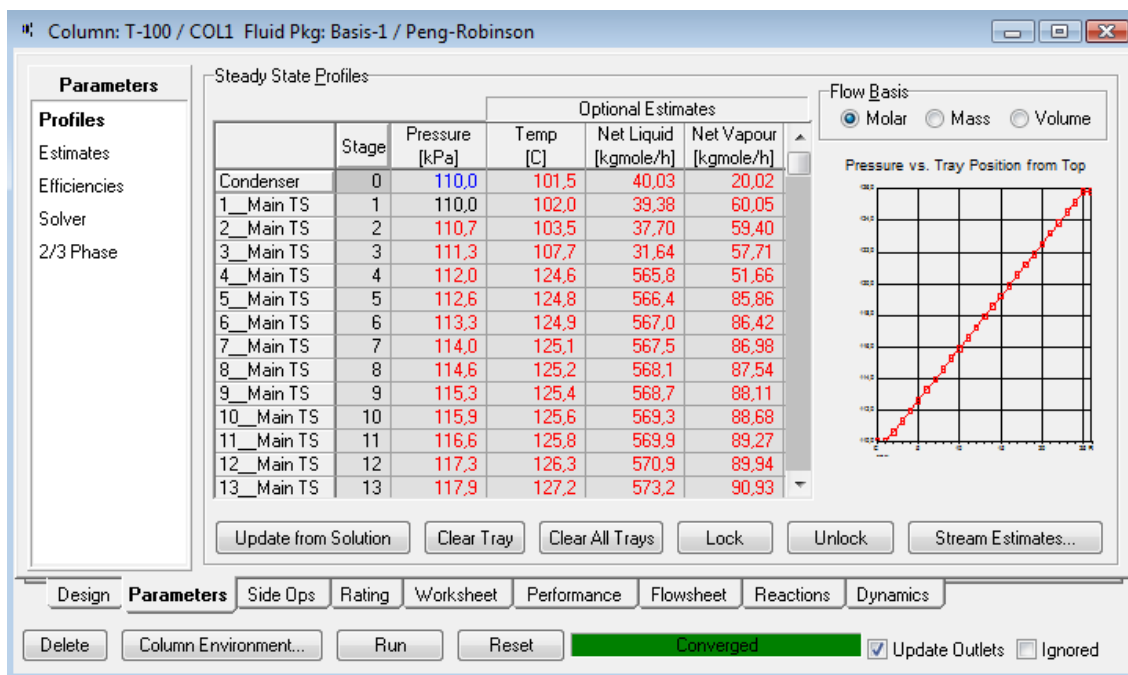
Aktívne špecifikácie boli molové toky destilátu, ktorý odchádzal v podobe parnej fázy z kondenzátora a zvyšku. Tieto špecifikácie, ktoré sú zobrazené na obrázku 9, boli určujúce pre správny chod kolóny. Ak by boli zadané viaceré špecifikácie, potom by došlo k prešpecifikovaniu zariadenia. Primárne sa však nastavujú obidve špecifikácie, a ak sa jedna potom deaktivuje, nie je to až tak dôležité, pretože program už má zadané iné parametre, pričom definovaná špecifikácia je zachovaná s miernou chybou, ktorá je prípustná a v dynamickom móde aj tak dôjde k jej zmene, ak sa bude meniť molový tok odoberaného destilátu. Obrázok 9 taktiež zobrazuje možnosť k nahliadnutiu teplotného, tlakového a prúdového profilu kolóny. Táto eventualita je veľmi užitočná pri zisťovaní potenciálnych chýb pri chode kolóny.

Je dôležité zdôrazniť, že tlak nastavený v kondenzátore musí korešpondovať s teplotou, pri ktorej n – Heptán ako produkt separácie je blízko teploty varu. Ak by bola táto teplota blízka aj teplote varu Toluénu, separácia by nebola úspešná.



Obr. 9: Definovanie špecifikácii pre kolónu T – 100

Okno parametrov pre jednotlivé etáže je zobrazené na obrázku 10. Uvedené zobrazenie ponúka jednoduchý prístup k okamžitému nahliadnutiu tlakov, teplôt a toku kvapaliny a pary na etážach, vrátane kondenzátora a varáka.



Obr. 10: Parametre etáži v kolóne T – 100

Obrázok 11 a 12 ponúka náhľad na vstupné a výstupné prúdy do kolóny a taktiež aj zobrazenie ich zloženia.

Column: T-100 / COL1 Fluid Pkg: Basis-1 / Peng-Robinson

Name	22	3	5	4	
Vapour	0,0000	0,0000	0,0000	1,0000	
Temperature [C]	120,0	93,00	142,0	101,5	
Pressure [kPa]	112,0	120,0	125,8	110,0	
Molar Flow [kgmole/h]	500,0	100,2	580,2	20,02	
Mass Flow [kg/h]	4,706e+004	9634	5,469e+004	2006	
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	44,56	12,61	54,26	2,918	
Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-1,349e+005	-9,184e+004	-1,191e+005	-1,741e+005	
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	-67,45	41,98	-39,16	237,1	
Heat Flow [kJ/h]	-6,747e+007	-9,200e+006	-6,907e+007	-3,486e+006	

Design Parameters Side Ops **Worksheet** Performance Flowsheet Reactions Dynamics

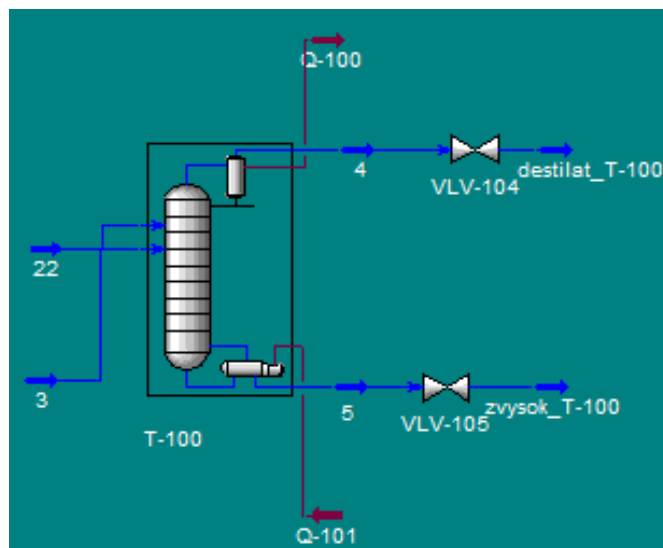
Delete Column Environment... Run Reset **Converged** ☒ Update Outlets ☐ Ignored

Obr. 11: Záznam hodnôt prúdov pre kolónu T – 100

[illegible]

Obr. 12: Záznam hodnôt zloženia prúdov pre kolónu T – 100

Výsledná zapojená schéma je zobrazená na obrázku 13.



Obr. 13: Schéma výsledného zapojenia kolóny T – 100

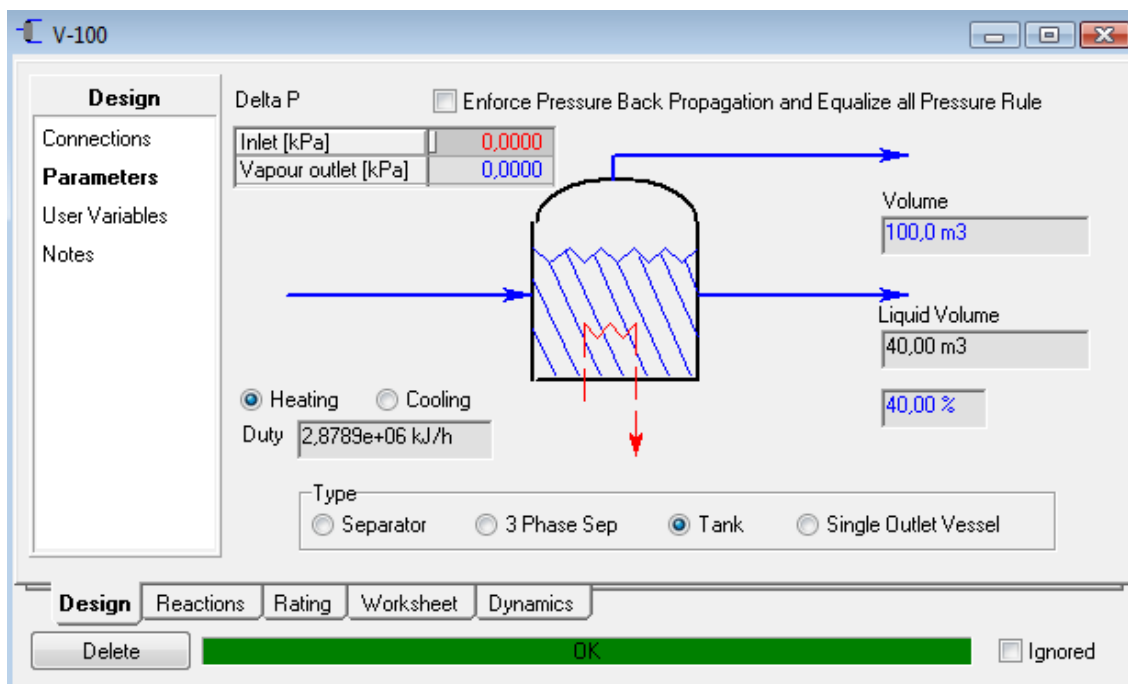
2.1.3 Konfigurácia prúdu zmesi do 2. kolóny

Konfigurácia prúdu zvyšku z prvej kolóny do druhej kolóny predstavovala jeho korekciu v oblasti teploty, tlaku a zabezpečenia konštantného molového toku. Uvedené ciele bolo možné dosiahnuť zapojením vyrovnávacej nádrže, chladiča a čerpadla.

Význam vyrovnávacej nádrže spočíval v tom, že dokázala naakumulovať prichádzajúcu zmes a tým pádom zabezpečila konštantný molový tok do druhej rektifikačnej kolóny. Táto vyrovnávacia nádrž zároveň plnila aj separačnú funkciu, kde ohrievala akumulovanú zmes a odchádzajúce pary z nej smerovali do ďalšej výroby spracovania zmesi n – Heptánu, Toluénu a Fenolu s približne rovnakým pomerovým zastúpením jednotlivých zložiek. Ventil na potrubí odchádzajúcej parnej fázy bol otvorený na 50% a v prípade zaplavenia nádrže, ho bolo možné spínačom otvoriť na 100%.

Obrázok 14 poukazuje na zapojenie vstupných a výstupných prúdov do nádrže, rovnako aj nastavenie objemovej kapacity nádrže. Objem nádrže bol koncipovaný na 100 m³ a inicializačný objem predstavoval 40 %. Inými slovami povedané, na začiatku

simulácie sa už v nádrži nachádzalo 40 m³ zmesi. Konfigurácia nádrže taktiež ponúkala voľbu ohrevu, respektíve chladenia.



Obr. 14: Konfigurácia parametrov nádrže V – 100

Pri danom zapojení vstupných a výstupných prúdov, bol využitý ohrev na požadovanú teplotu 155 °C odchádzajúceho prúdu. Požadovanú teplotu som určil ako optimálnu hodnotu pre správnu konfiguráciu prúdu 8, ktorý odchádzal z vyrovnávacej nádrže. Táto realizácia je zobrazená na obrázku 15. Odchádzajúci prúd 6 predstavoval parnú fázu, ktorá pokračovala do ďalšieho spracovania zmesi n – Heptánu, Toluénu a Fenolu.

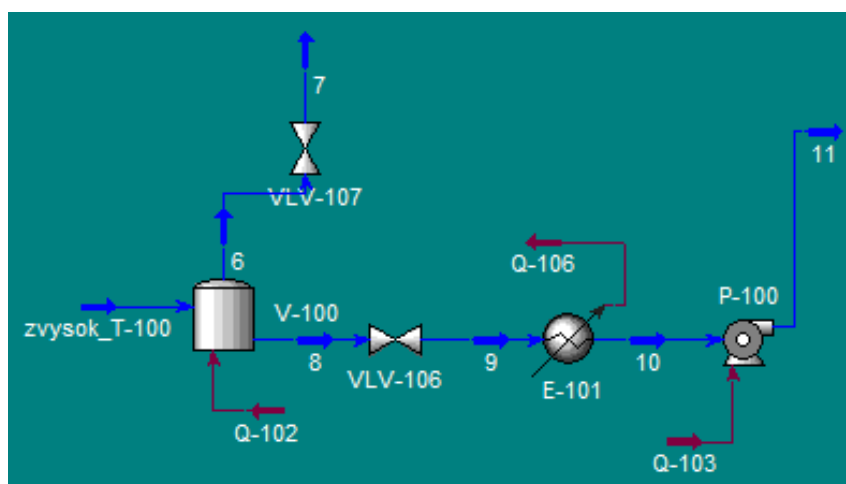
Name	zvysok_T-100	8	6
Vapour	0,0012	0,0000	1,0000
Temperature [C]	141,8	155,0	155,0
Pressure [kPa]	124,8	124,8	124,8
Molar Flow [kgmole/h]	580,2	536,9	43,29
Mass Flow [kg/h]	5,469e+004	5,053e+004	4153
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	54,26	49,26	5,002
Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-1,191e+005	-1,174e+005	-7,296e+004
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	-39,16	-40,74	138,1
Heat Flow [kJ/h]	-6,907e+007	-6,303e+007	-3,159e+006

Obr. 15: Záznam hodnôt prúdov pre nádrž V – 100

Význam zapojenia chladiča E – 101 (obrázok 16) spočíval v úprave teploty, aby zmes do druhej rektifikačnej kolóny vstupovala pri teplote 145 °C. Túto teplotu som určil ako optimálnu teplotu nástreku do kolóny. Chladič bol špecifikovaný výlučne pre teplotu výstupného prúdu zmesi, kde odvodené teplo bola premenná veličina a jeho konfigurácia bola podobná ako pre ohrievač E – 100.

Zapojené čerpadlo P – 100 (obrázok 16) zabezpečovalo zvýšenie tlaku pre vstupujúcu zmes do druhej rektifikačnej kolóny. Jeho konfigurácia bola podobná ako pri čerpadle P – 101 a určujúcim parametrom bol tlak na výstupe 131,7 kPa. Tento tlak som určil na základe tlaku, ktorý bol na etáži, na ktorú prúd 11 prichádzal.

Výsledná schéma zobrazujúca zapojenie a konfiguráciu vstupného prúdu pre druhú kolónu je na obrázku 16.

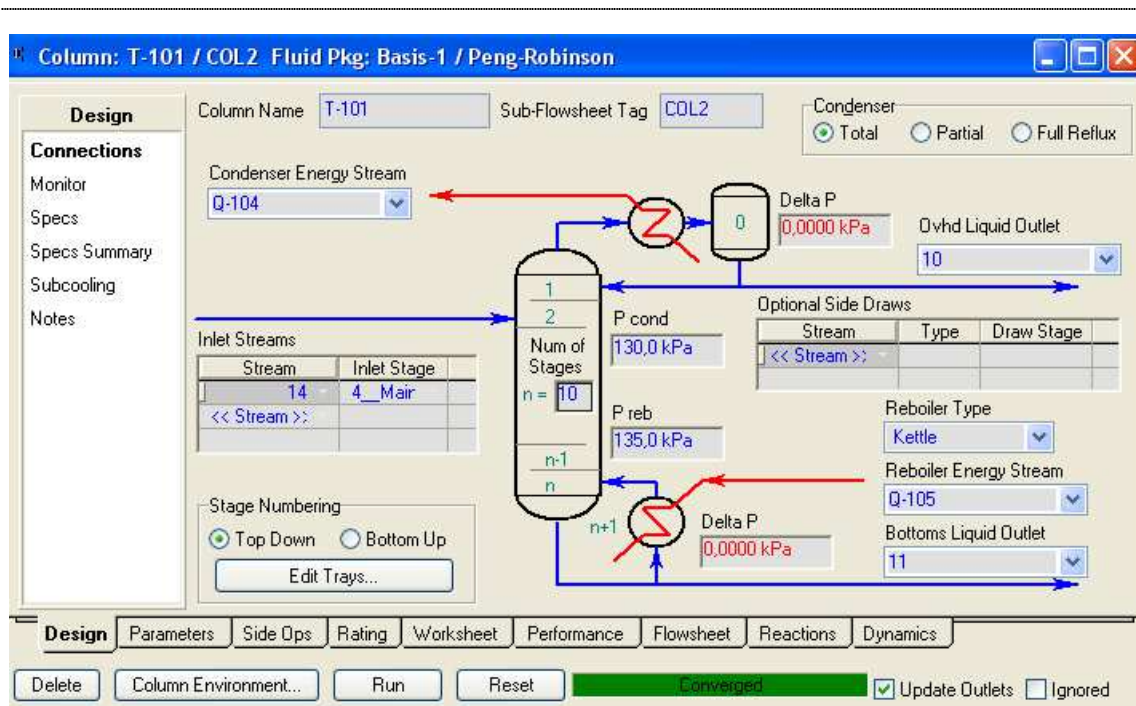


Obr. 16: Schéma výslednej konfigurácie vstupného prúdu pre 2. kolónu

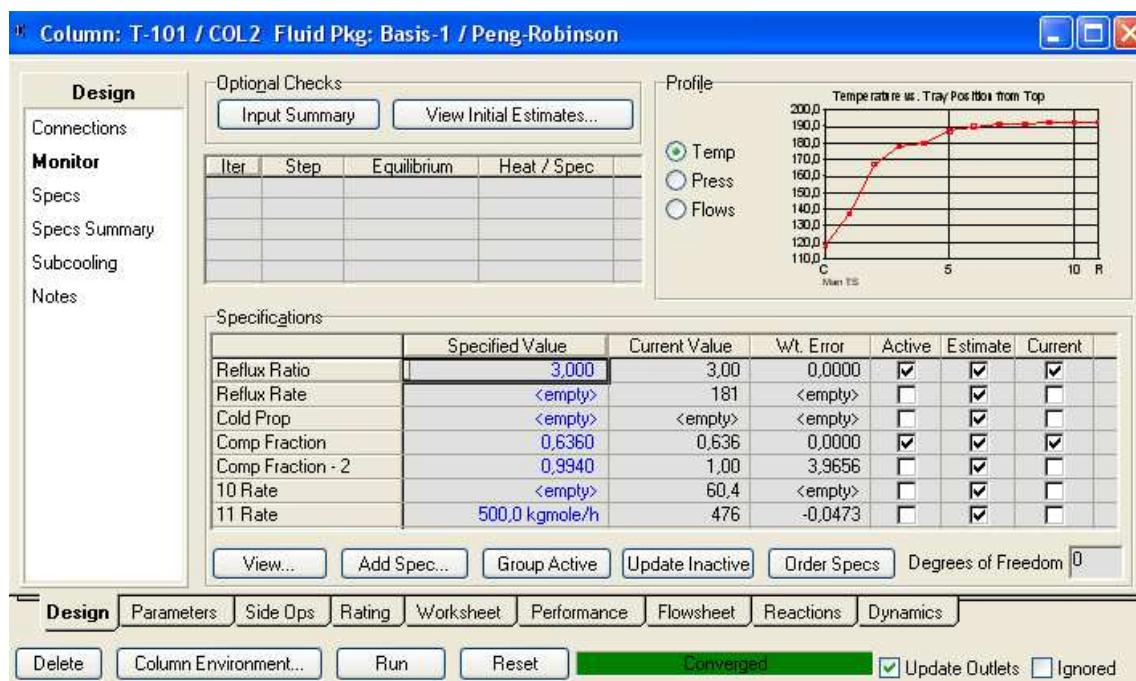
2.1.4 Konfigurácia 2. rektifikačnej kolóny

Konfigurácia druhej rektifikačnej kolóny T – 101 bola podobná ako pri T – 100, s tým rozdielom, že sa jednalo už o klasickú rektifikáciu. Podobne boli definované vstupné parametre a špecifikácie, ktoré sú zobrazené na obrázkoch 17 a 18. Aktívne špecifikácie boli refluxný pomer a molový zlomok Toluénu v destiláte. Profily kolóny sú zobrazené na obrázku 18. Kvantifikácia parametrov jednotlivých etáží je zobrazená na obrázku 19. Záznam hodnôt vstupujúcich a vystupujúcich prúdov v kolóne T – 101 je zobrazený na obrázku 20 a záznam zloženia týchto prúdov je na obrázku 21.

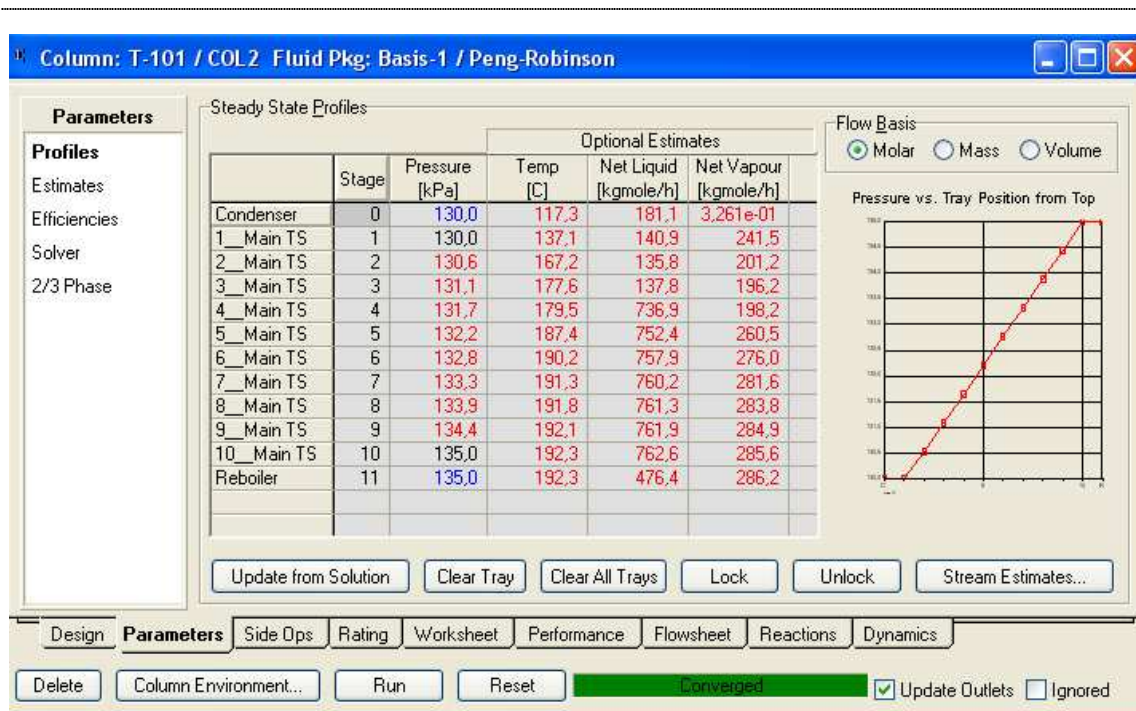
Potvrdením správnej činnosti kolóny bolo zeleným podfarbené zobrazenie *Converged*, čo znamenalo, že kolóna bola správne nastavená a pripravená na použitie v dynamickom režime.



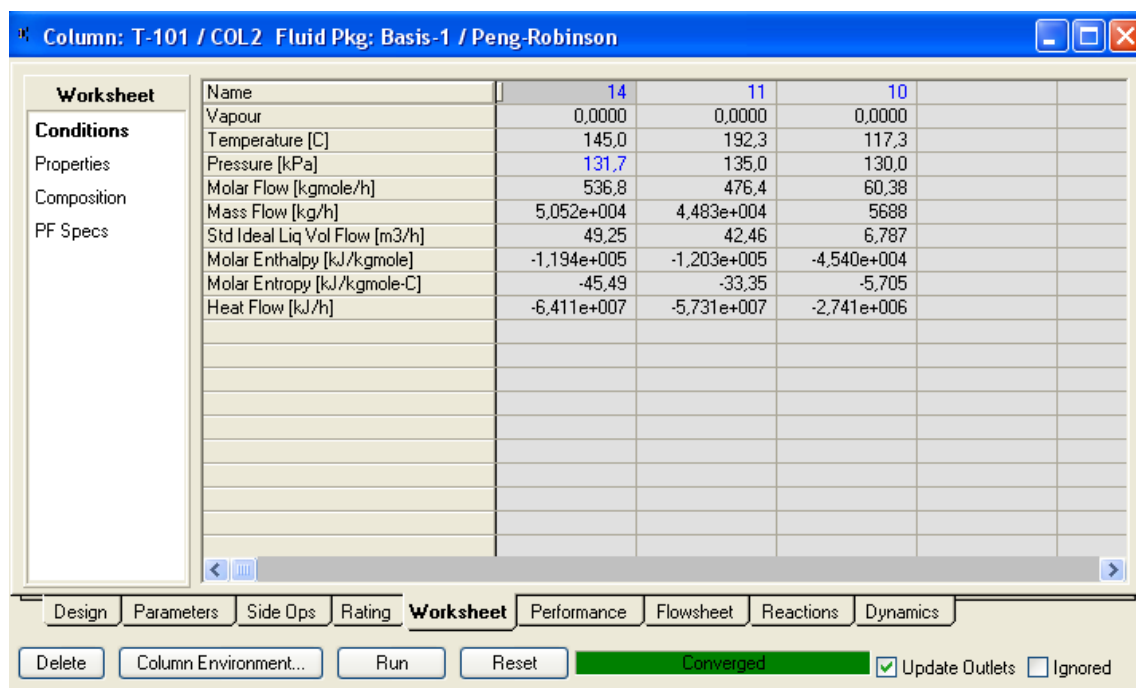
Obr. 17: Konfigurácia zapojenia prúdov a tlakov pre kolónu T – 101



Obr. 18: Definovanie špecifikácii pre kolónu T – 101

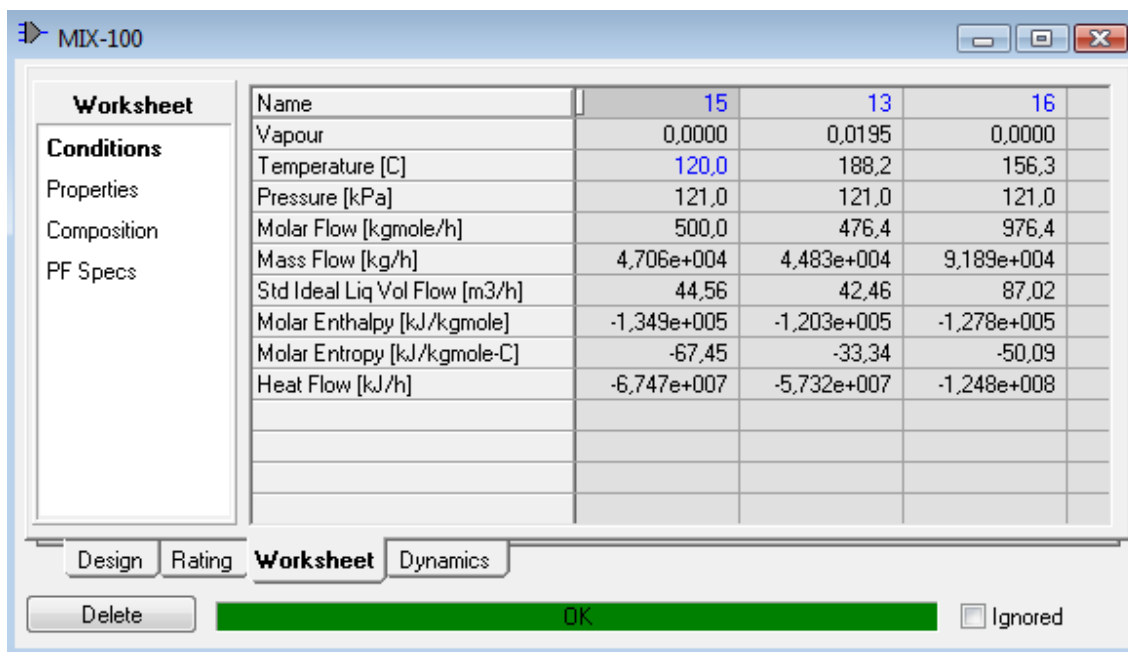


Obr. 19: Parametre etáži v kolóne T – 101



Obr. 20: Záznam hodnôt prúdov pre kolónu T – 101

Fenolu a zmiešať ho s čerstvým, ak by nebolo dosiahnuté jeho požadované množstvo. Záznam hodnôt pre zmiešavač MIX – 100, ktorý je zobrazený na obrázku 23, zmiešaval čerstvý 100% Fenol s použitým, ktorý bol skoro 99%, pretože obsahoval nepatrný molový zlomok Toluénu, ktorý prešiel do zvyšku.



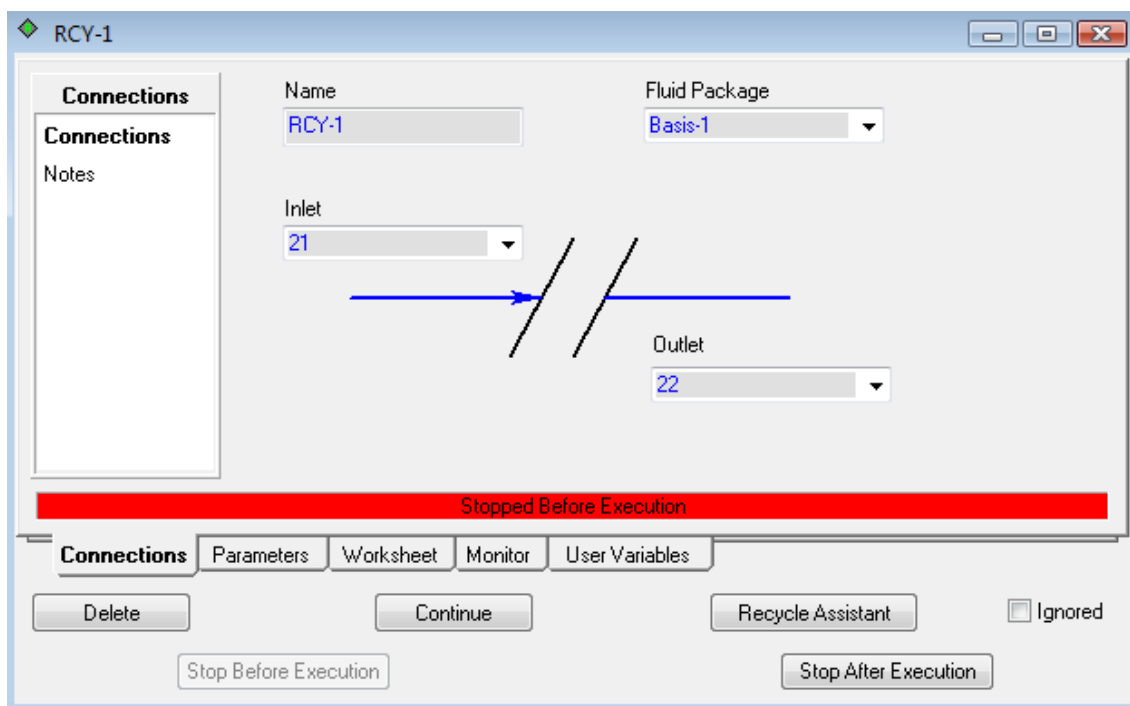
	15	13	16
Vapour	0,0000	0,0195	0,0000
Temperature [C]	120,0	188,2	156,3
Pressure [kPa]	121,0	121,0	121,0
Molar Flow [kgmole/h]	500,0	476,4	976,4
Mass Flow [kg/h]	4,706e+004	4,483e+004	9,189e+004
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	44,56	42,46	87,02
Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-1,349e+005	-1,203e+005	-1,278e+005
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	-67,45	-33,34	-50,09
Heat Flow [kJ/h]	-6,747e+007	-5,732e+007	-1,248e+008

Obr. 23: Záznam hodnôt prúdov pre zmiešavač MIX – 100

Zmiešaný prúd bolo potrebné priviesť do vyrovnávacej nádrže, pretože ináč by spôsobil veľké nelinearity v činnosti prvej kolóny, do ktorej práve vstupoval. Konfigurácia vyrovnávacej nádrže V – 101 (obrázok 26) bola podobne realizovaná ako predchádzajúca V – 100. Akurát s tým rozdielom, že parná fáza, ktorá z tejto nádrže odchádzala, bola teplota 170 °C. Túto teplotu som určil ako optimálnu pre separovanie Toluénu, pričom jeho teplota varu predstavuje 110,7 °C a teplota Fenolu 181,9 °C. Teda moja zvolená teplota bola menšia ako bola teplota varu Fenolu. Primárne bol ventil na potrubí odchádzajúcej parnej fázy zatvorený a slúžil výlučne na čiastočné uvoľnenie objemu. Nádrž bola koncipovaná na 100 m³ a jej inicializačná objemová kapacita začínala na hodnote 40 m³.

Odchádzajúci prúd z nádrže sa následne upravoval v chladiči E – 102 na požadovanú teplotu 120 °C. Jeho zapojenie bolo podobné ako pri zapojení chladiča E – 100. Požadovanú teplotu som zvolil ako optimálnu pre vstup prúdu do kolóny.

Principiálnym operátorom bol operátor recykla, ozn. . Práve tento operátor umožňoval prevádzkovať recirkuláciu. Na obrázku 24 je znázornené zapojenie vstupného zmiešaného prúdu a výstupného prúdu, ktorý vstupoval do prvej kolóny. Voľba *Stop Before Execution* umožňovala zastaviť zmenu prúdov, aby nedochádzalo k ovplyvneniu charakteristiky vstupného prúdu do kolóny.



Obr. 24: Konfigurácia zapojenia prúdov pre operátor recyklu RCY – 1

Bolo potrebné si uvedomiť, že v statickom móde pri modelovaní mal zmiešavaný prúd súčet molového toku čerstvého a recirkulovaného Fenolu, celkovo 976,4 kgmol/h. Predstavovalo to hodnotu väčšiu ako bola hodnota 500 kgmol/h, ktorá pôvodne vstupovala do kolóny. Názorne je to zobrazené na obrázku 25.

Name	21	22	
Vapour	0,0000	0,0000	
Temperature [C]	120,0	120,0	
Pressure [kPa]	112,0	112,0	
Molar Flow [kgmole/h]	976,4	500,0	
Mass Flow [kg/h]	9,189e+004	4,706e+004	
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	87,02	44,56	
Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-1,349e+005	-1,349e+005	
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	-67,45	-67,45	
Heat Flow [kJ/h]	-1,318e+008	-6,747e+007	

Stopped Before Execution

Connections Parameters **Worksheet** Monitor User Variables

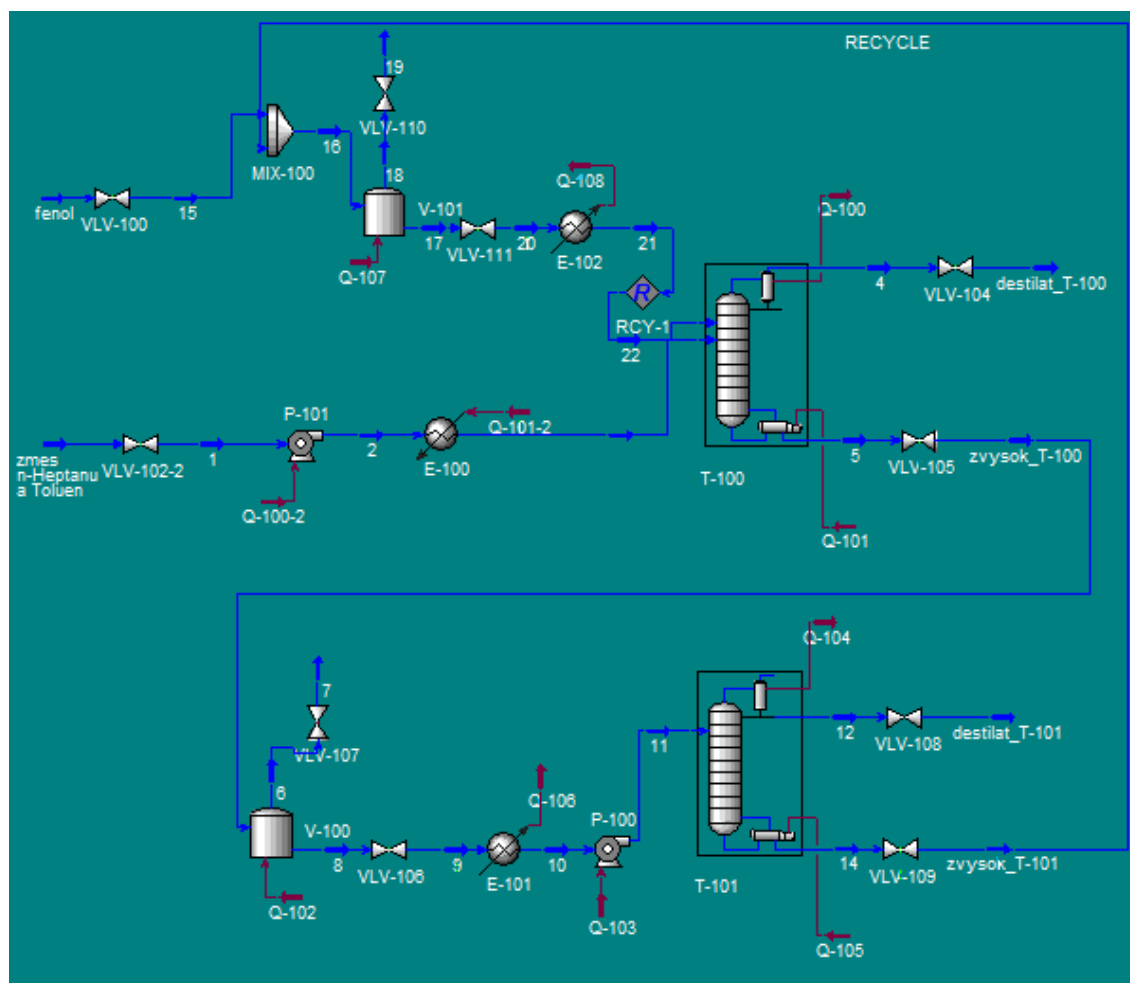
Delete Continue Recycle Assistant ☐ Ignored

Stop Before Execution Stop After Execution

Obr. 25: Záznam hodnôt prúdov pre operátor recyklu RCY – 1

Z obrázka 25 je možné analyzovať, že zmiešavaný prúd mal molový tok 976,4 kgmol/h a prúd privádzaný do kolóny len 500 kgmol/h. V statickom móde bola táto neekvivalentnosť možná jedine s využitím operátora recykla. Na vstupe do kolóny bol potrebný molový tok 500 kgmol/h, ale privádzaný zmiešavaný prúd mal molový tok 976,4 kgmol/h. Tento prúd bol tvorený regenerovaným prúdom z druhej kolóny (zvysok_T – 101) – 476,4 kgmol/h (obrázok 26) a čerstvým prúdom Fenolu. Ak by som do kolóny umožnil vstup prúdu, ktorý mal molový tok 976,4 kgmol/h, tak by sa opäť navýšil privádzaný zmiešavaný prúd. Pri výpočtových iteráciách pre kolónu by dochádzalo k neustálemu navýšeniu molového toku a tým pádom by správne nastavenie kolóny nebolo možné. Pri prechode do dynamického módu dochádzalo následne k zmene, kedy oba spomínané prúdy mali rovnaký molový tok. V statickom móde by takto nebolo možné uvažovať a práve tu mal svoje nezastupiteľné uplatnenie operátor recykla.

Na obrázku 26 je zobrazené výsledné zapojenie schémy s recirkuláciou.



Obr. 26: Schéma výsledného zapojenia technologickej schémy

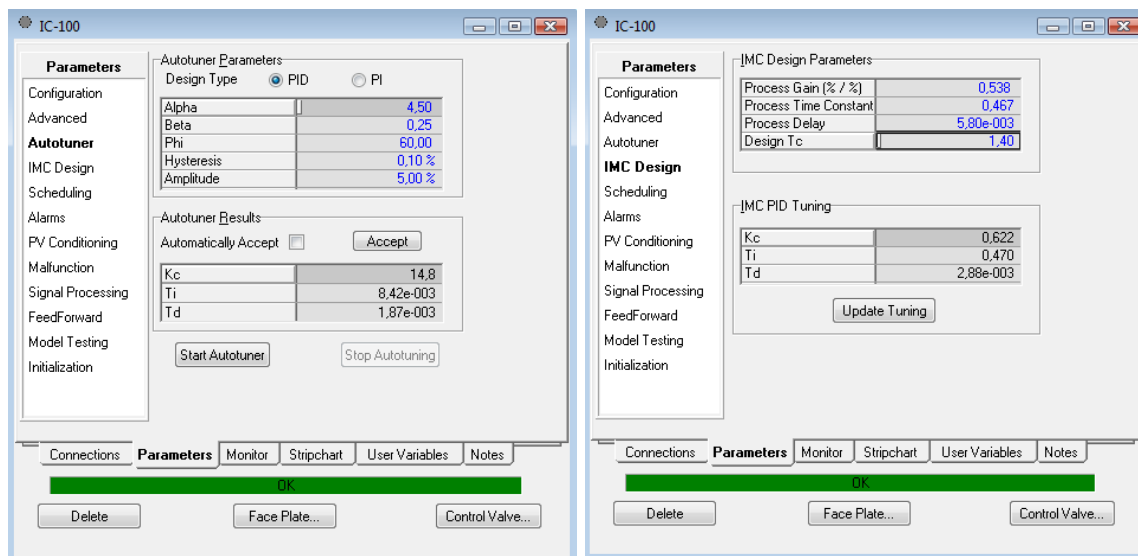
2.2 Porovnanie syntéz regulátorov

V tejto časti som sa venoval analýze výberu syntézy regulátorov. Možnosti, ako navrhnuť regulátor, smerovali k vlastnej identifikácii procesu alebo k prístupu syntézy pomocou UniSim Designu. Ten ponúkal voľbu Autotunera a IMC Designu, ktoré sú zobrazené na obrázku 27.

Autotuner predstavoval sofistikovaný spôsob, ako rýchlo navrhnuť PI respektíve PID regulátor. Program po spustení *Start Autotuner* sám vykonal niekoľko skokových zmien riadiacej veličiny a na základe toho navrhol regulátor. Pred jeho spustením bolo

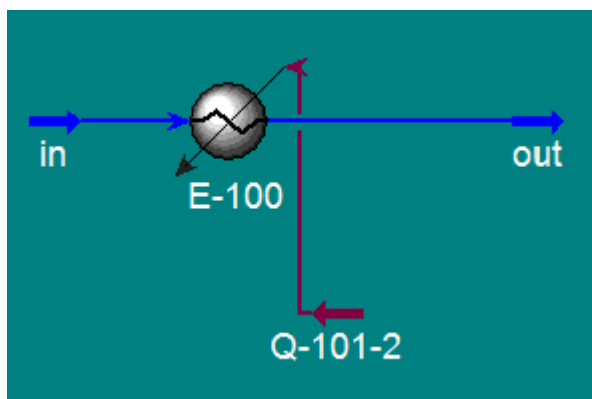
možné ešte zadefinovať parametre, ktoré sú zvýraznené modrým podfarbením na obrázku 27.

Nástroj IMC Design predstavoval spôsob návrhu regulátora na základe poznaného prenosu. Pri zadanom zosilnení, časovej konštantne, dopravnom oneskorení a návrhu hodnoty T_c , ktorá predstavovala zvyčajne trojnásobok časovej konštanty, dokázal IMC Design spoľahlivo navrhnuť PID regulátor.



Obr. 27: Konfigurovanie parametrov pre Autotuner a IMC Design

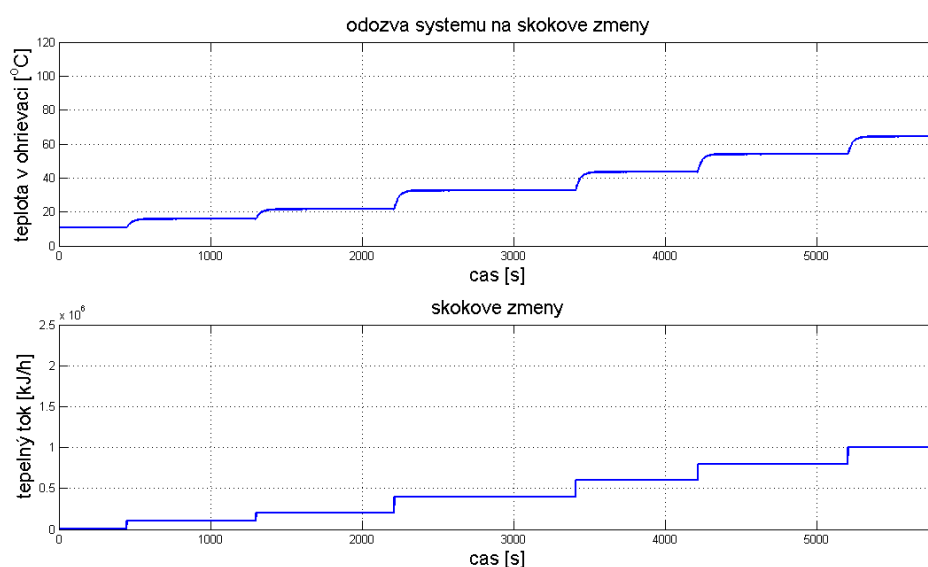
Ako príklad na porovnanie regulátorov som si vybral ohrievač E – 100 (obrázok 28), ktorý slúžil na ohrev prúdu zmesi, ktorá potom vstupovala do kolóny T – 100. Simulačná schéma, pomocou ktorej som vykonával porovnávanie sa nachádza v prílohe pod názvom: ohrievac.usc. Syntéze regulátora a následnému riadeniu predchádzalo vykonanie skokových zmien tepelného toku $Q - 101 - 2$, pre ohrievač E – 100.



Obr. 28: Schéma ohrievača E – 100

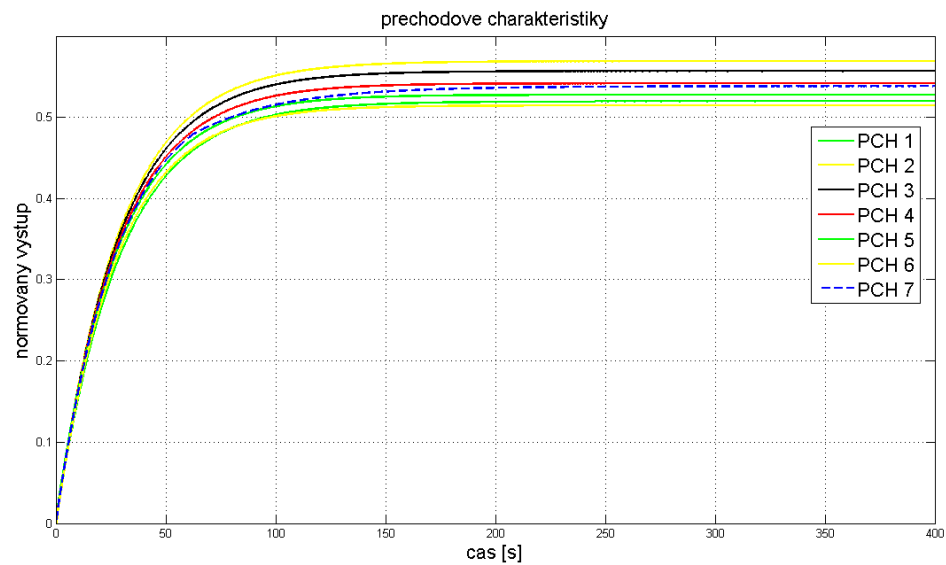
Riadiacou veličinou bolo v mojom prípade množstvo tepla privádzaného prostredníctvom tepelného toku a riadenou veličinou bola teplota na výstupe z ohrievača. Na základe zistenia prechodových charakteristík a identifikácie normovanej prechodovej charakteristiky som získal prenos, pomocou ktorého som navrhol PID regulátor.

Skokové zmeny tepelného toku som vykonal od 0 kJ/h, ktoré predstavovalo 0% otvorenie ventilu, po 1 000 000 kJ/h, ktoré predstavovalo 100% otvorenie ventilu. Názorne je to zobrazené na obrázku 29.

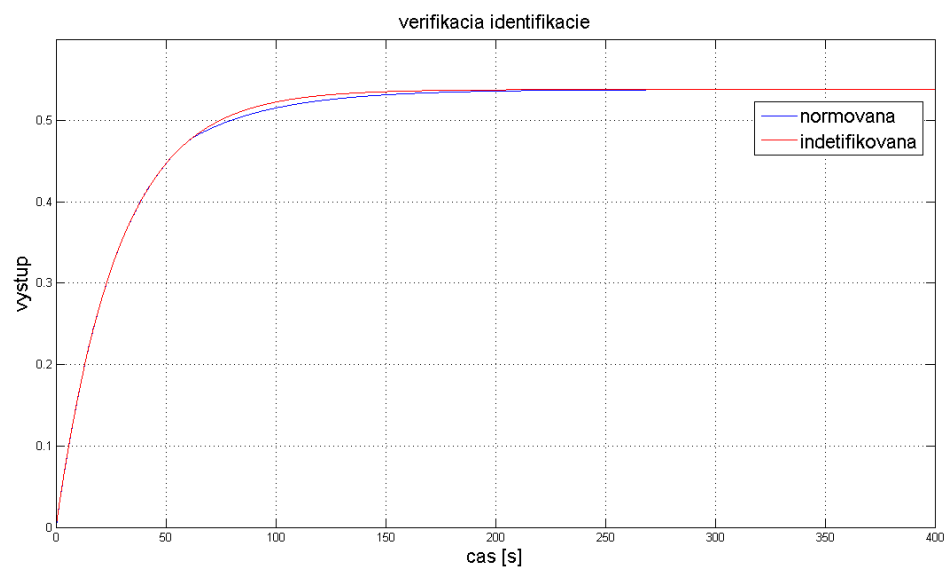


Obr. 29: Zmena tlaku na hlave kolóny pri zmene otvorenia ventilu pre prúd destilátu

Po zistení prechodových charakteristík – PCH a určení priemernej PCH, ktoré sú zobrazené na obrázku 30, nasledovala identifikácia prenosu 1. rádom, ktorá je spolu s verifikáciou zobrazená na obrázku 31.



Obr. 30: Vykreslenie troch PCH a priemernej PCH



Obr. 31: Overenie identifikácie prenosu

Na základe úspešnej verifikácie identifikovanej a normovanej PCH som získal prenos v tvare (5).

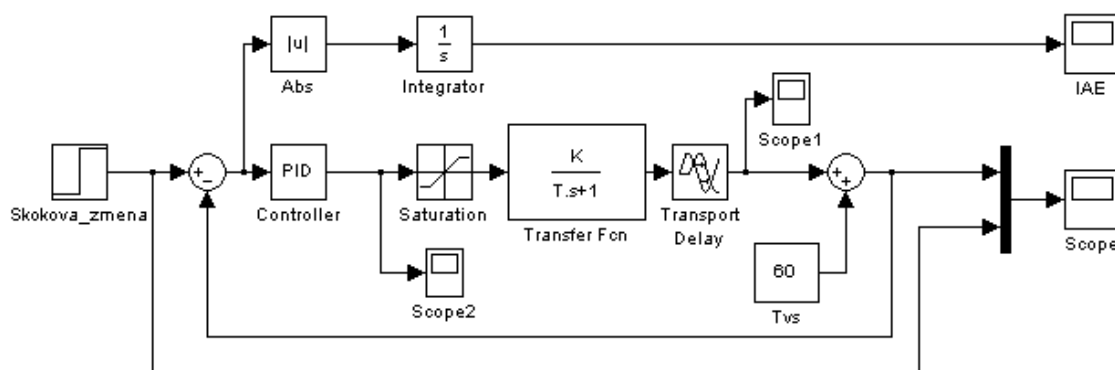
$$G(s) = \frac{Z}{Ts + 1} e^{-Ds} = \frac{0,5382}{28,2031s + 1} e^{-0,0058s} \quad (5)$$

Na syntézu regulátorov som použil program PIDTOOL [6]. Navrhnuté proporcionálne, integračné a derivačné zložky pre regulátory sa nachádzajú v tabuľke 3.

Tab. 3: Zložky navrhnutých regulátorov pre IC – 100 a kvantifikácia IAE

Navrhnutý regulátor PI	P	I	D	IAE
Ziegler – Nichols	10841,9252	0,0116	0,0029	0,1302
Cohen – Coon	12047,0481	0,014276	0,002109	0,1133
Metóda priamej syntézy s použitím aproximovaného modelu URO	1,8713	28,206	0,0028994	0,0280
Smith, Murrill (riadenie na žiadanú hodnotu)	2545,9888	35,4324	0,003264	0,0061
Rivera, Morari, $T_{uro} = 6$	8,7262	28,206	0,0028997	0,0060

Na vyhodnotenie optimálneho regulátora som vytvoril simulačnú schému: testovanie_PI, ktorá je na obrázku 32. Jednotlivé regulátory som otestoval v prostredí Matlab – Simulink. Kvalitu riadenia som hodnotil na základe integrálneho kritéria kvality – IAE. Vytvorená simulačná schéma je uvedená v prílohe.



Obr. 32: Bloková simulačná schéma riadenia s vyhodnotením IAE

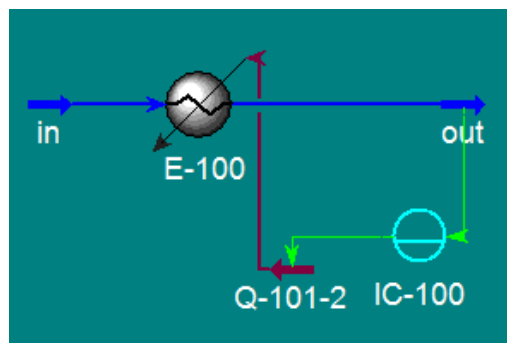
Najlepší regulátor bol navrhnutý metódou Rivera, Morari v tvare (6), regulátor získaný z Autotunera bol v tvare (7) a regulátor získaný pomocou IMC Designu bol v tvare (8).

$$G(s)_{navrhnuty} = 8,73 \left(1 + \frac{1}{28,2s} + 0,00289 s \right) \quad (6)$$

$$G(s)_{autotuner} = 14,7 \left(1 + \frac{1}{0,52s} + 0,00193 s \right) \quad (7)$$

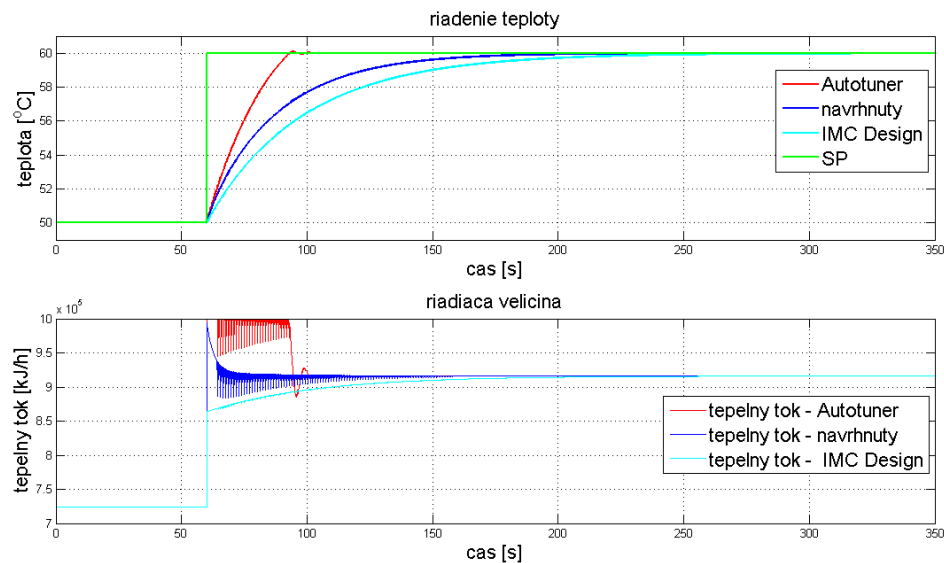
$$G(s)_{IMCdesign} = 0,622 \left(1 + \frac{1}{28s} + 0,00288 s \right) \quad (8)$$

Na obrázku 33 sa nachádza zapojenie regulátora IC – 100 pre ohrievač E – 100.



Obr. 33: Schéma riadenia ohrievača E – 100 s regulátorom IC – 100

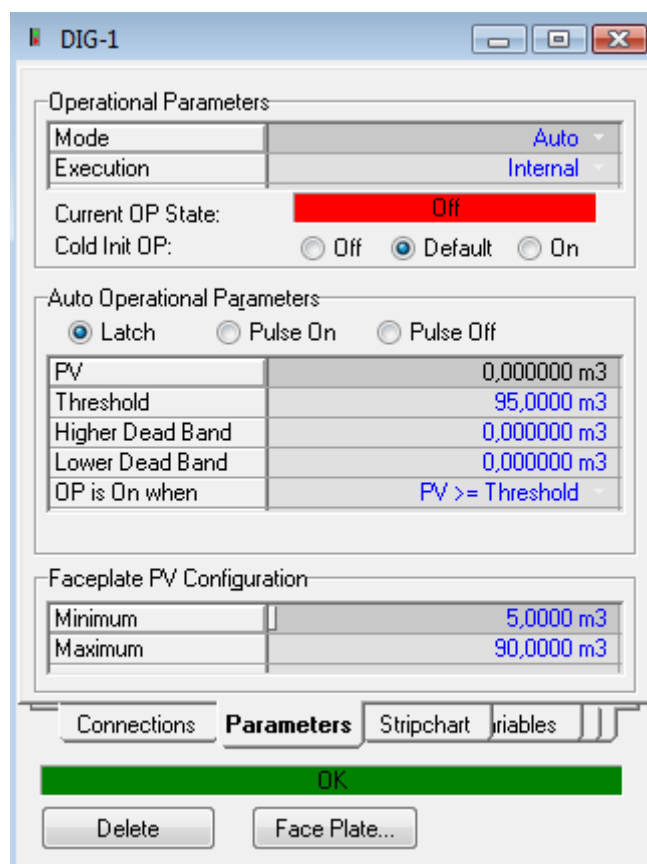
Riadenie s regulátormi (6), (7) a (8) je zobrazené na obrázku 34. Z komparácie použitých regulátorov, sa ukázal najvýhodnejší Autotuner, pretože uriadil teplotu na žiadanú hodnotu najrýchlejšie z použitých regulátorov. Za ním nasledoval navrhnutý PID regulátor a najpomalší čas regulácie bol s použitým regulátorom získaným z IMC Design. Do istej miery to bolo spôsobené voľbou parametra T_c , ktorého voľba sa odporúča na trojnásobok časovej konštanty. Generalizovaním výsledkov sa ukázalo, že optimálny návrh regulátora je možné dosiahnuť pomocou Autotunera.



Obr. 34: Porovnanie riadenia teploty v ohrievači prostredníctvom navrhnutého PID regulátora, Autotunera a IMC Design

Použitie spínača

Použitie spínača  predstavuje jednoduchý prístup k riadeniu. V princípe sa jedná o dvojpolohový spínač s pozíciami *On* respektíve *Off*. Odpadá tým použitie regulátora, ktorého investičné náklady prevyšujú náklady na dvojpolohovú reguláciu. Na obrázku 35 je zobrazená konfigurácia spínača DIG – 1 s možnosťou nastavenia *Thresholdu*, čo predstavovalo hranicu po ktorej prekročení sa otvoril ventil. Názorne to zobrazuje voľba *OP is On when: PV >=Threshold*. Ďalším aspektom, bola voľba alarmov, teda minimálnych a maximálnych hraníc, kedy v schéme sa zmenilo podfarbenie spínača a tým sa signalizovala kritická hranica objemu nádrže, pre ktorú bol spínač použitý.



Obr. 35: Konfigurovanie parametrov pre spínač DIG – 1

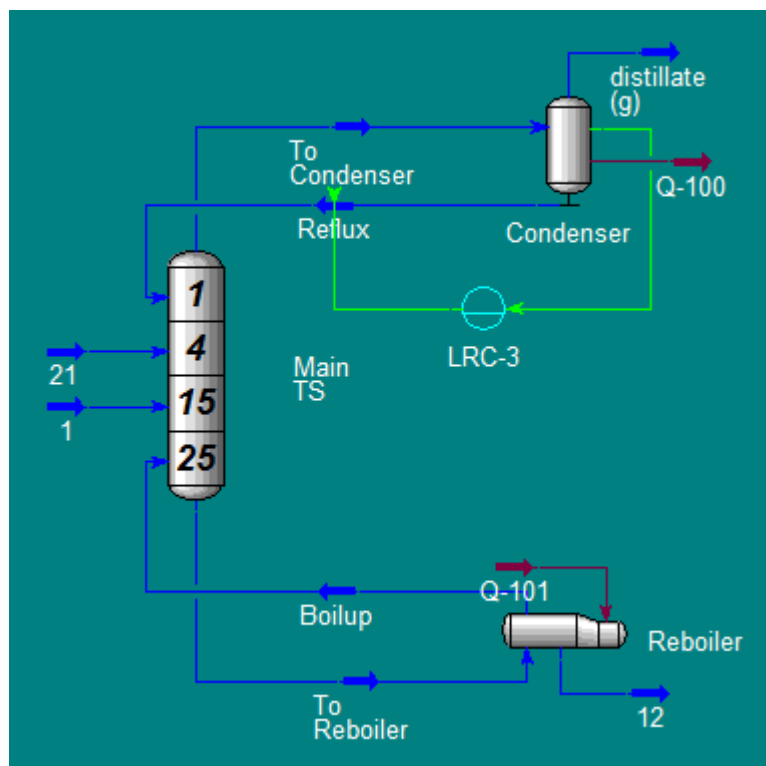
2.3 Riadenie 1. kolóny

Stratégiou riadenia bolo zabezpečiť konštantnú separačnú činnosť prvej kolóny. Inými slovami povedané, separovať n – Heptán pri danej čistote molového zlomku 99% a rovnako aj udržať činnosť kolóny pri vzniku porúch, či už meniaceho sa molového toku Fenolu, respektíve jeho teploty.

Na dosiahnutie týchto cieľov som si zvolil riadenie zádrže kvapaliny v kondenzátore a vo varáku. V ďalšom kroku som pristúpil k riadeniu teploty a tlaku na hlave kolóny.

2.3.1 Riadenie zádrže kvapaliny v kondenzátore pomocou refluxu

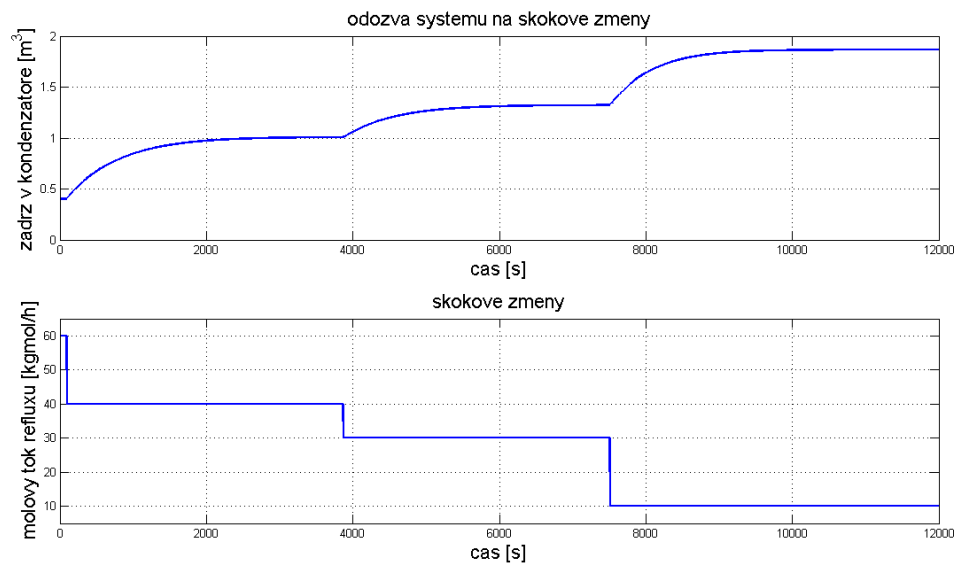
Pri tomto spôsobe riadenia, ako je to znázornené na obrázku 36, bol riadiacou veličinou refluxný tok pri použitej riadenej veličine – zádrži kvapaliny v kondenzátore.



Obr. 36: Schéma riadenia zádrže kondenzátora kolóny T – 100

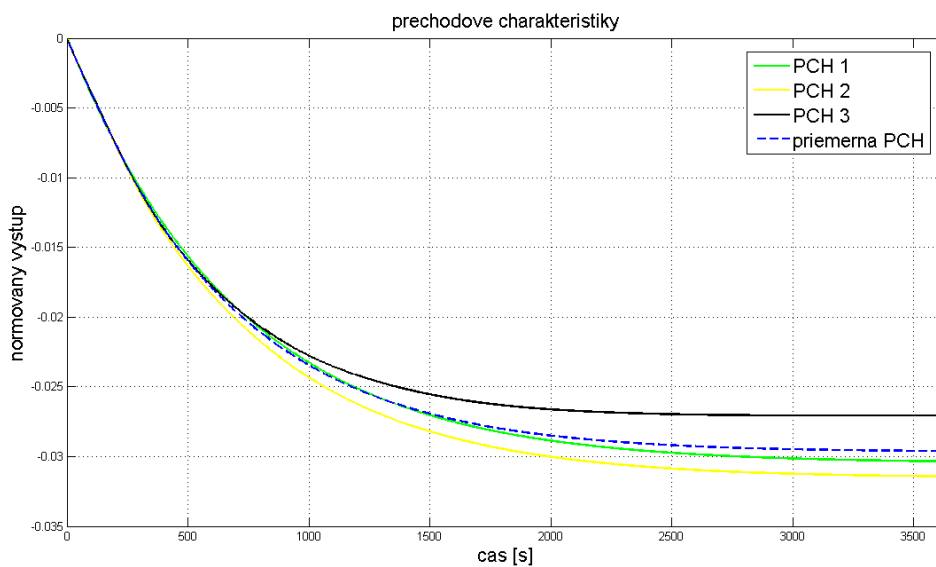
Syntéze regulátora a následnému riadeniu predchádzalo vykonanie skokových zmien, zistenie prechodových charakteristík a identifikácia normovanej prechodovej charakteristiky.

V dynamickom režime som zistil ako systém reaguje na skokové zmeny refluxného toku, ktoré sú znázornené na obrázku 37.



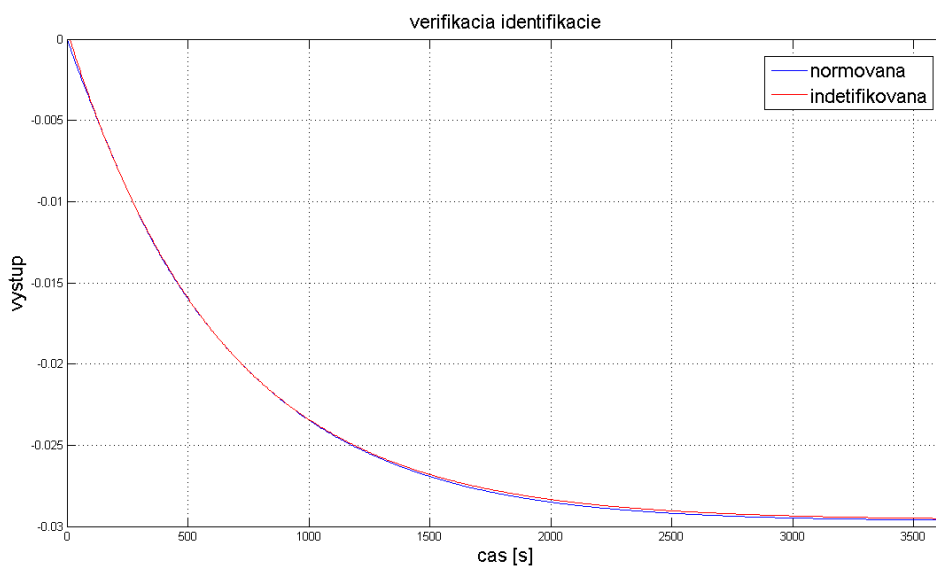
Obr. 37: Zmena zádrže kvapaliny v kondenzátore pri meniacom sa refluxnom toku

Po analýze odozvy na skokové zmeny refluxu som vykreslil PCH, spolu s priemernou PCH.



Obr. 38: Vykreslenie troch PCH a priemernej PCH

Verifikáciou normovanej a identifikovanej PCH, ktoré sú znázornené na obrázku 39 som zistil že identifikácia systému 1. rádom bola správna.



Obr. 39: Overenie identifikácie prenosu

Na základe získaného prenosu (9) som navrhol regulátory pomocou metód, ktoré sú uvedené v tabuľke 4 a vyhodnotil IAE.

$$G(s) = \frac{-0,0296}{631,3369 s + 1} e^{-12,2179 s} \quad (9)$$

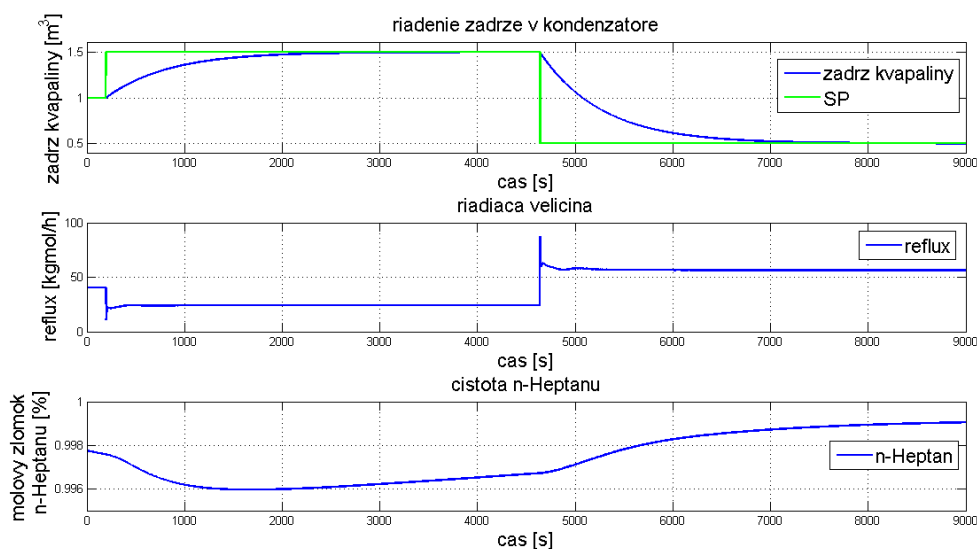
Tab. 4: Zložky navrhnutých regulátorov pre LRC – 3 a kvantifikácia IAE

Navrhnutý regulátor PI	P	I	IAE
Ziegler – Nichols	-1571,1419	40,6856	0,1606
Cohen – Coon	-1573,9572	39,1227	0,1638
Metóda priamej syntézy s použitím aproximovaného modelu URO	-33,1598	631,3369	0,2866
Haalman	-1163,8088	631,3369	0,1142
Smith, Murrill (riadenie na žiadanú hodnotu)	-734,4399	614,8546	0,1105
Rivera, Morari (spresnený), $T_{\text{uro}} = 126$	-169,5695	637,4459	0,0793
Metóda požadovaného modelu (0% preregulovanie)	-642,2786	631,3369	0,1080

Na základe vyhodnotenia integrálneho kritéria kvality IAE, som kvalifikoval ako najlepšie regulátor (10) navrhnutý pomocou metódy Rivera, Morari.

$$G(s) = Z_r \left(1 + \frac{1}{T_i s} \right) = -169,6 \left(1 + \frac{1}{637,4s} \right) \quad (10)$$

Riadenie zádrže kvapaliny v kondenzátore pomocou Rivera – Morariho PI regulátora je zobrazené na obrázku 40. Hoci regulačný čas bol pomalší, použitý regulátor dokázal uradiť zádrž na žiadanú hodnotu. Všeobecne platilo, že pri zmenšovaní zádrže dochádzalo k zvýšeniu čistoty n – Heptanu.



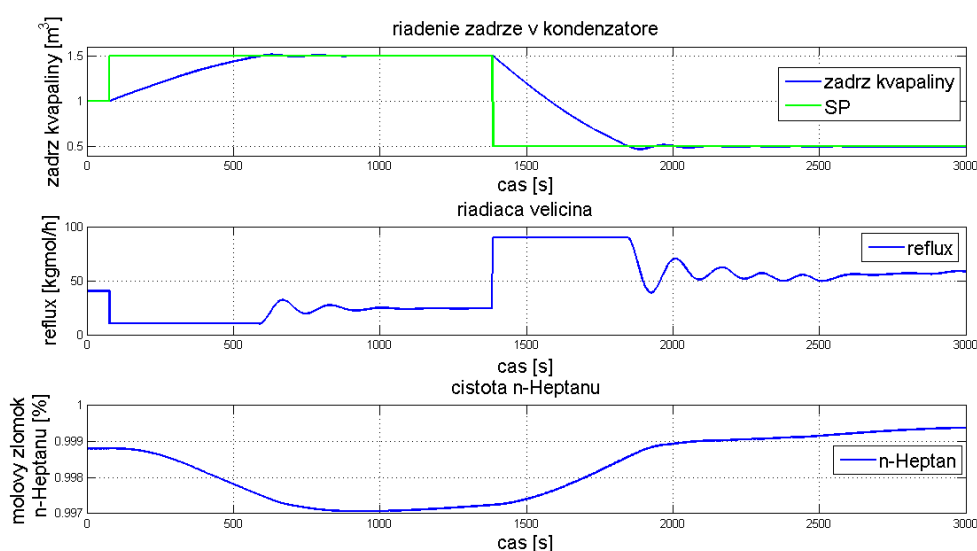
Obr. 40: Riadenie zádrže kvapaliny v kondenzátore refluxom Riverovým – Morariho PI regulátorom

Program UniSim Design ponúkal už vyššie opísaný nástroj na návrh regulátorov – Autotuner. Jednalo sa o rýchly spôsob návrhu regulátora, pričom odpadávala zdĺhavá identifikácia. Podmienkou bolo mať ustálený priebeh simulácie, v opačnom prípade syntéza pomocou Autotunera nebola úspešná.

Pri riadení s Autotunerom som použil PI regulátor v tvare (11).

$$G(s) = Z_r \left(1 + \frac{1}{T_i s} \right) = -5,65 \left(1 + \frac{1}{410,4s} \right) \quad (11)$$

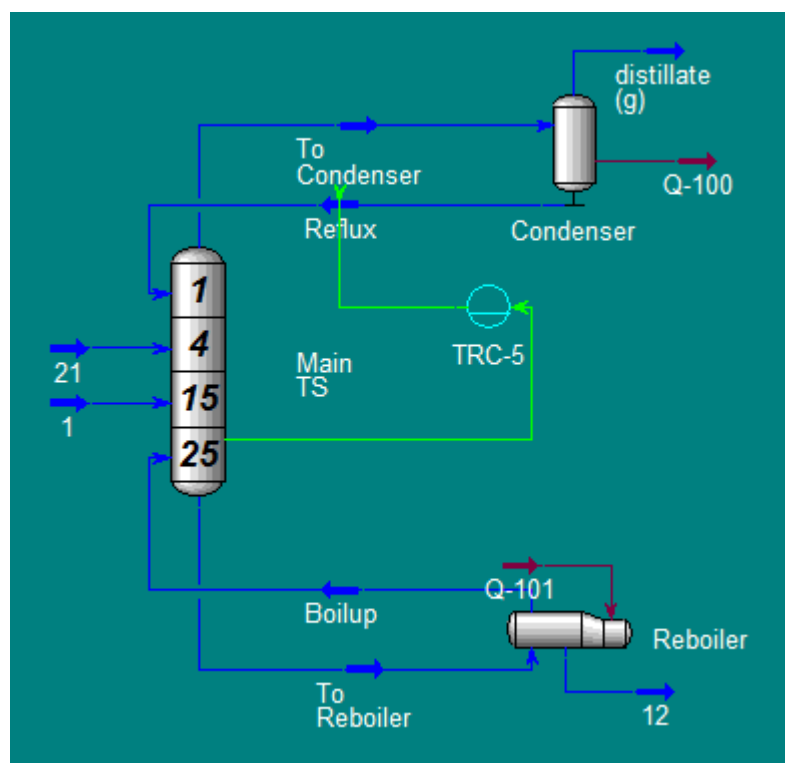
Riadenie zádrže v kondenzátore s PI regulátorom, získaným pomocou Autotunera, je zobrazené na obrázku 41. Pri použití Autotunera bola rýchlejšie uriadená zádrž kvapaliny na požadovanú hodnotu ako pri použití Rivera – Morariho PI regulátora. Platilo, že pri zmenšovaní zádrže dochádzalo k zvýšeniu čistoty n – Heptánu. Jednoznačne to súviselo s meniacim sa refluxom, pretože pri zvýšenom toku refluxu sa zvýšil aj molový zlomok separovaného n – Heptánu.



Obr. 41: Riadenie zádrže kvapaliny v kondenzátore refluxom pomocou Autotunera

2.3.2 Riadenie teploty na hlave kolóny pomocou refluxu

Pri tomto spôsobe riadenia, ako je to znázornené na obrázku 42, bol riadiacou veličinou refluxný tok pri použitej riadenej veličine – teplote na hlave kolóny.

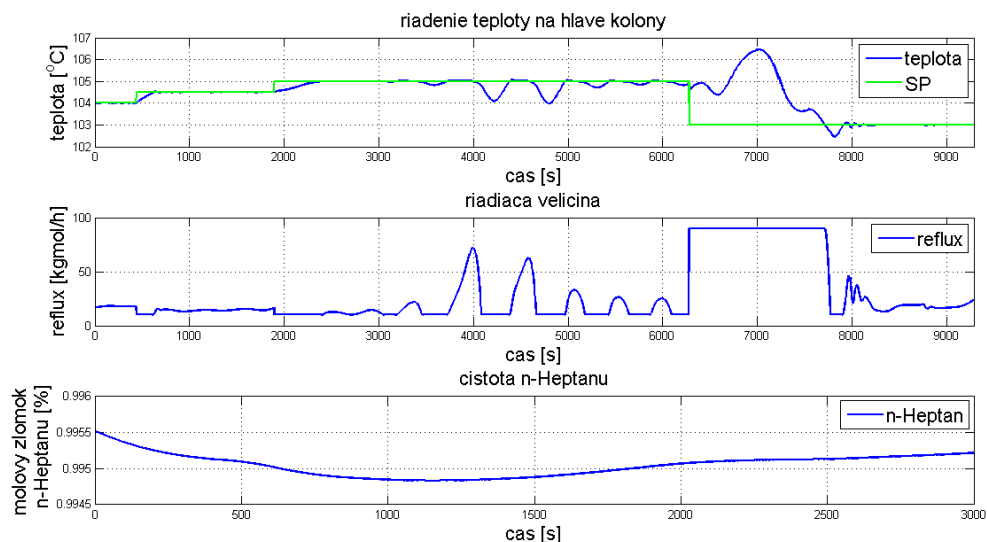


Obr. 42: Schéma riadenia teploty na hlave kolóny T – 100

Pri tomto spôsobe riadenia som využil regulátor navrhnutý pomocou Autotunera v tvare (12).

$$G(s) = Z_r \left(1 + \frac{1}{T_i s} \right) = -2,46 \left(1 + \frac{1}{3,6s} \right) \quad (12)$$

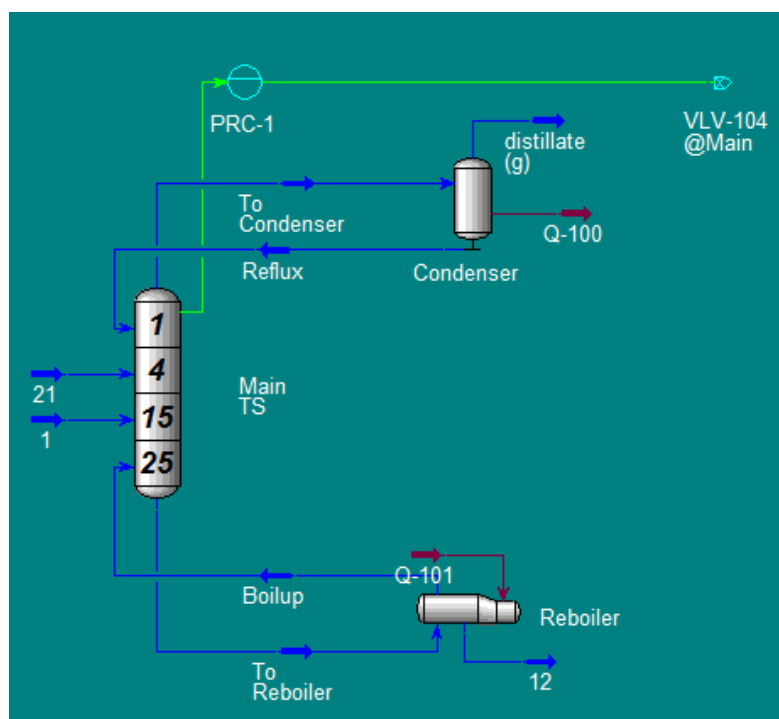
Použitie Autotunera sa ukázalo v tomto prípade ako výhodné, pretože pri klasickom spôsobe identifikácie, ktorý zahŕňa získanie normovanej PCH, bolo komplikované namerať relevantné údaje pre správnu identifikáciu. V neposlednom rade pri verifikácii identifikácie 1. rádom dochádzalo k značným odchýlkam. Napriek tomu sa teplotu podarilo pomocou regulátora z Autotunera uradiť na žiadanú hodnotu, pričom platilo, že pri znížení teploty na hlave kolóny dochádzalo k zvýšeniu čistoty n – Heptánu. Ak sa teplota na hlave zvyšovala, dochádzalo k zvýšenému podielu n – Heptánu v odchádzajúcich parách. Súviselo to so zvyšovaním teploty na hlave bližšie k hodnote teploty varu Toluénu ($t_{v \text{ Toluén}} = 110,7 \text{ } ^\circ\text{C}$). Regulačný priebeh je zobrazený na obrázku 43.



Obr. 43: Riadenie teploty na hlave kolóny refluxom pomocou Autotunera

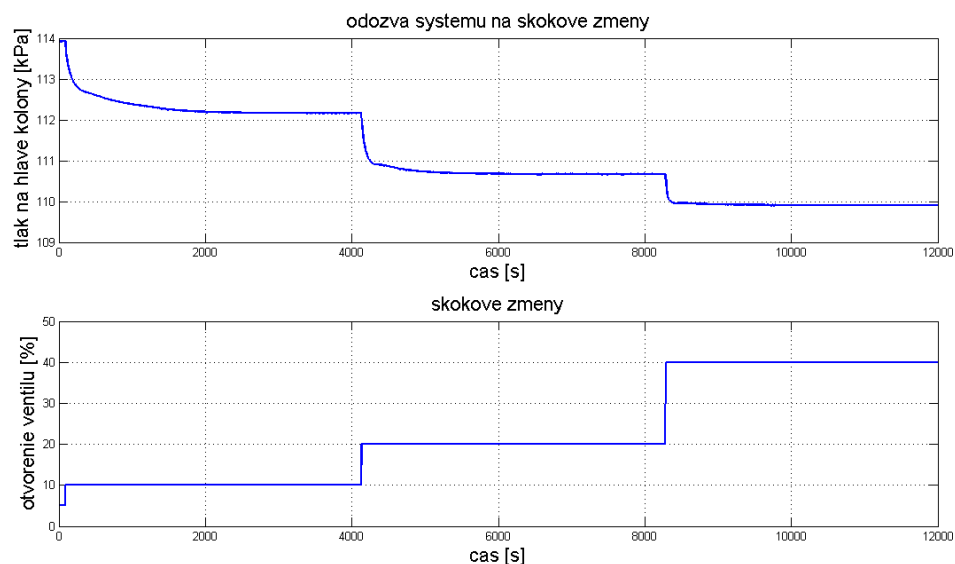
2.3.3 Riadenie tlaku na hlave kolóny pomocou destilátu

Pri tomto spôsobe riadenia, ako je to znázornené na obrázku 44, bol riadiacou veličinou odchádzajúci destilát v parnej fáze pri použitej riadenej veličine – teplote na hlave kolóny. Akčným členom bol ventil VLV – 104.

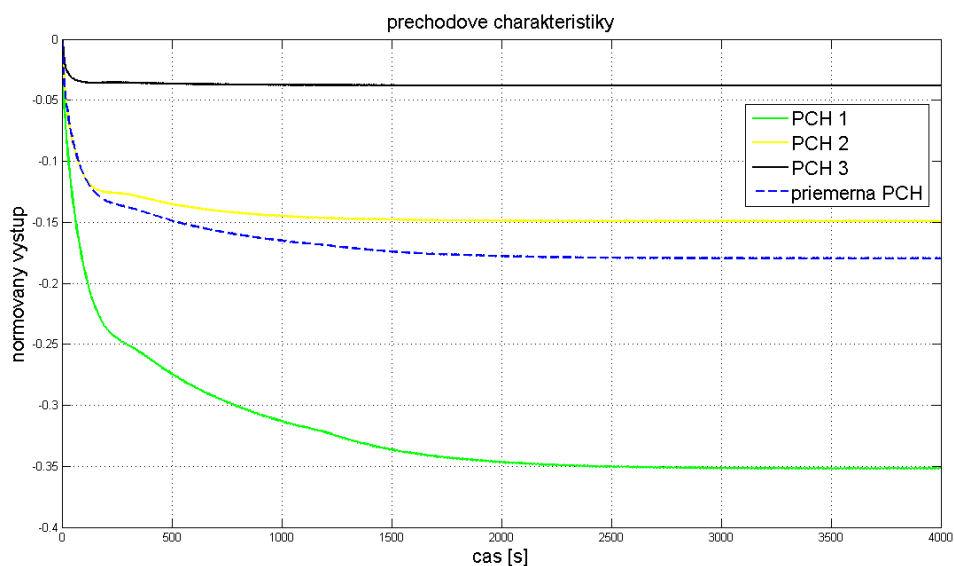


Obr. 44: Schéma riadenia tlaku na hlave kolóny T – 100

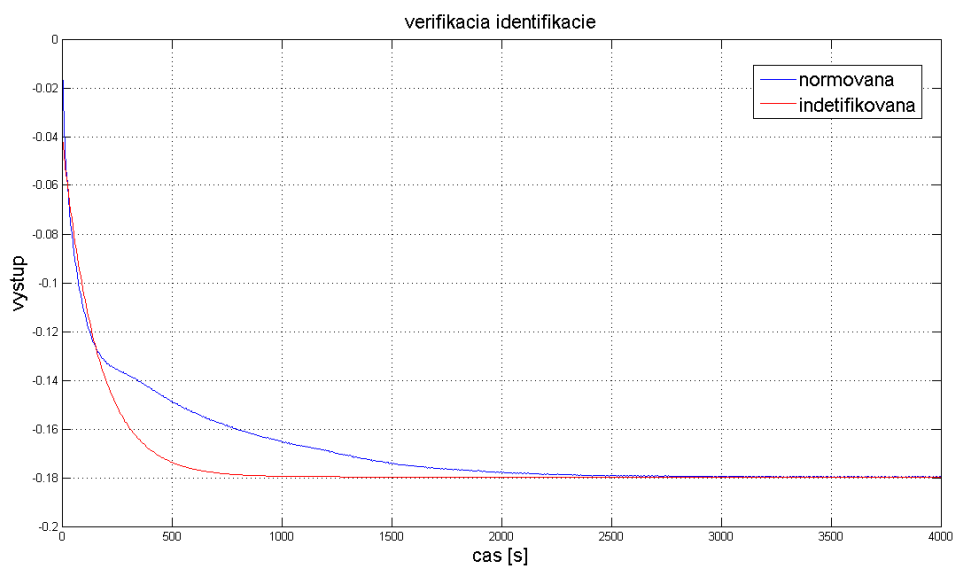
Spôsob, akým som zistil reakciu systému na zmeny otvorenia ventilu, bol podobný ako v predchádzajúcom prípade riadenia zádrže kvapaliny v kondenzátore. Odozvy na skokové zmeny otvorenia ventilu sú zobrazené na obrázku 45, namerané PCH s priemernou PCH sú zobrazené na obrázku 46 a verifikácia normovanej a identifikovanej PCH je zobrazená na obrázku 47.



Obr. 45: Zmena tlaku na hlave kolóny pri zmene otvorenia ventilu pre prúd destilátu



Obr. 46: Vykreslenie troch PCH a priemernej PCH



Obr. 47: Overenie identifikácie prenosu

Na základe získaného prenosu (13) som navrhol regulátory pomocou metód, ktoré sú uvedené v tabuľke 5 a vyhodnotil IAE.

$$G(s) = \frac{-0,1797}{158,5127 s + 1} e^{-38,7283 s} \quad (13)$$

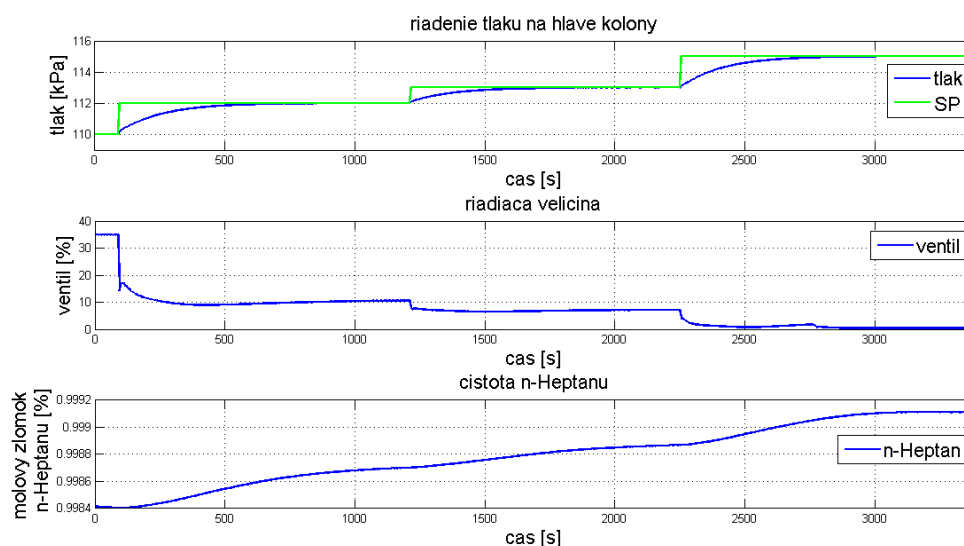
Tab. 5: Zložky navrhnutých regulátorov pre PRC – 1 a kvantifikácia IAE

Navrhnutý regulátor PI	P	I	IAE
Ziegler – Nichols	-20,4989	128,9652	0,2125
Cohen – Coon	-20,9626	85,712	0,2813
Metóda priamej syntézy s použitím aproximovaného modelu URO	-4,5067	158,5127	0,3914
Haalman	-15,1844	158,5127	0,1652
Smith, Murrill (riadenie na žiadanú hodnotu)	-11,857	160,1645	0,1657
Rivera, Morari (spresnený), $T_{uro} = 361$	-30,933	177,8768	0,3775
Metóda požadovaného modelu (0% preregulovanie)	-8,3799	158,5127	0,2105

Na základe vyhodnotenia integrálneho kritéria kvality IAE som kvalifikoval ako najlepšie regulátor navrhnutý pomocou metódy Haalman. V praxi sa však ukázalo, že bol potrebný regulátor (14) s menším zosilnením, tak som použil Metódu požadovaného modelu pri 0% preregulovaní.

$$G(s) = Z_r \left(1 + \frac{1}{T_i s} \right) = -8,38 \left(1 + \frac{1}{158,5s} \right) \quad (14)$$

Riadenie tlaku na hlave kolóny s navrhnutým PI regulátorom je zobrazené na obrázku 48. Táto stratégia riadenia tlaku na hlave kolóny pomocou odtlakovania kondenzátora sa uskutočňovala prostredníctvom akčného člena – ventilu. Pri zvyšovaní tlaku na hlave kolóny dochádzalo k zvyšovaniu molového zlomku n – Heptánu v odchádzajúcich parách z kondenzátora.

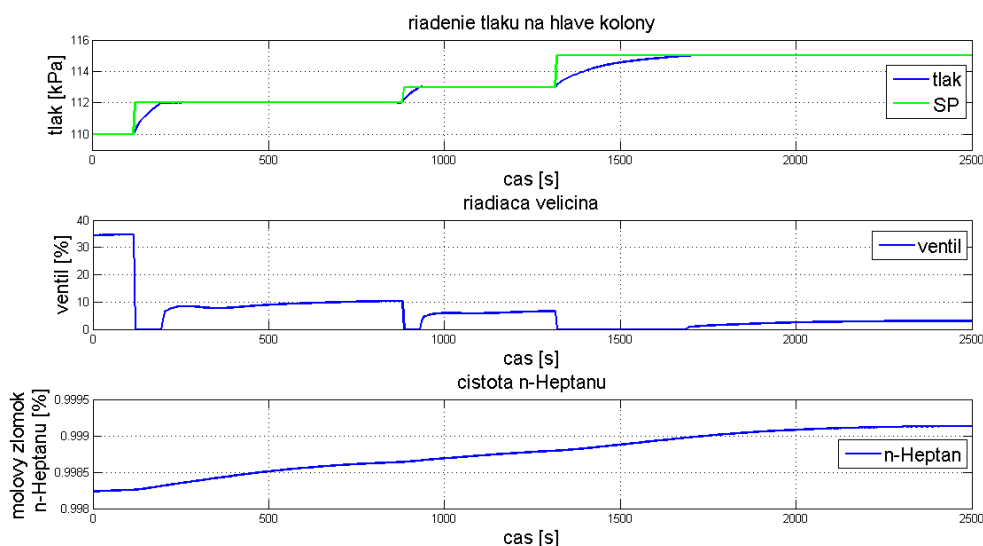


Obr. 48: Riadenie tlaku na hlave kolóny zmenou otvorenia ventilu PI regulátorom navrhnutým Metódou požadovaného modelu

Regulátor navrhnutý pomocou Autotunera bol tvare (15).

$$G(s) = Z_r \left(1 + \frac{1}{T_i s} \right) = -0,569 \left(1 + \frac{1}{0,128s} \right) \quad (15)$$

Riadenie tlaku na hlave kolóny PI regulátorom, získaným pomocou Autotunera, je zobrazené na obrázku 49. V porovnaní s predchádzajúcim riadením pomocou navrhnutého regulátora sa riadenie s Autotunerom ukázalo ako rýchlejšie. Inými slovami povedané, žiadaná hodnota tlaku bola dosiahnutá skôr. Pri zvyšovaní tlaku na hlave kolóny dochádzalo k zvyšovaniu molového zlomku n – Heptánu v odchádzajúcich parách z kondenzátora.



Obr. 49: Riadenie tlaku na hlave kolóny zmenou otvorenia ventilu PI Autotunerom

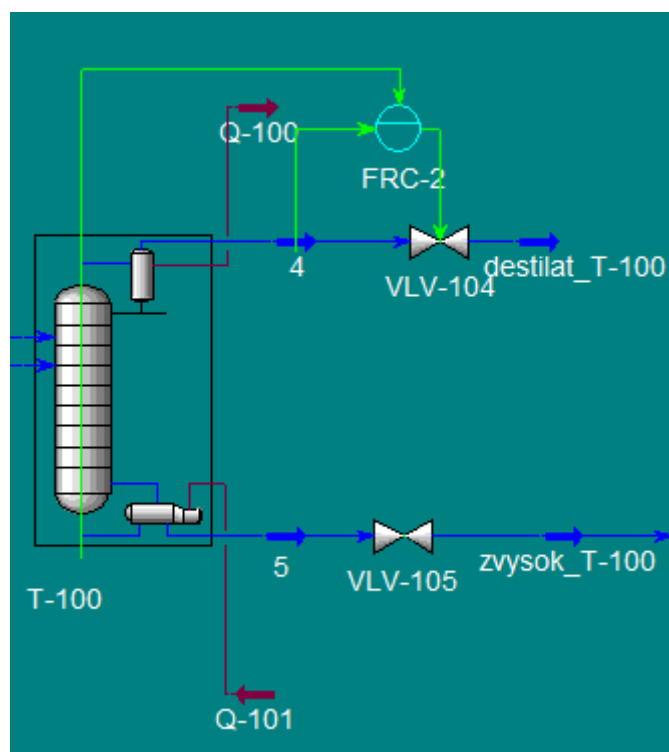
Kaskádové zapojenie

Pri kaskádovom zapojení riadenia tlaku na hlave kolóny T – 100 som uvažoval s pomocným regulátorom FRC – 2, ktorý je zobrazený na obrázku 50. Ten mal za úlohu korigovať zásah hlavného regulátora PRC – 1 (obrázok 51).

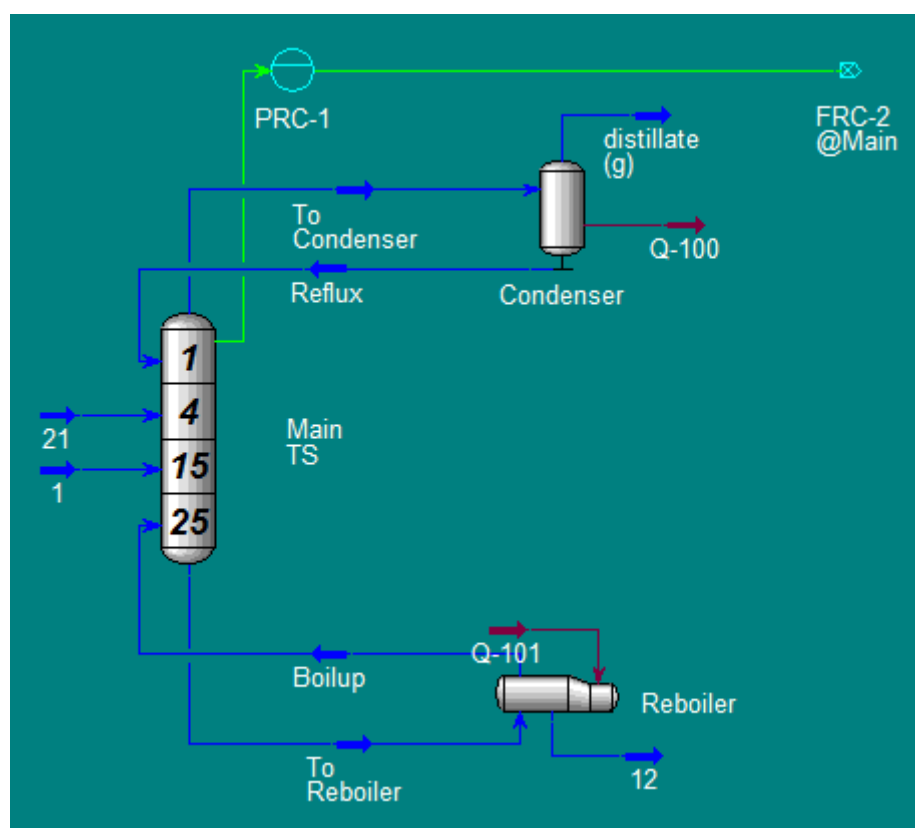
Regulátor PRC – 1 bol v tvare (16) a FRC – 2 v tvare (17).

$$G(s) = Z_r \left(1 + \frac{1}{T_i s} \right) = -0,569 \left(1 + \frac{1}{0,128s} \right) \quad (16)$$

$$G(s) = Z_r \left(1 + \frac{1}{T_i s} \right) = 0,00121 \left(1 + \frac{1}{0,027s} \right) \quad (17)$$

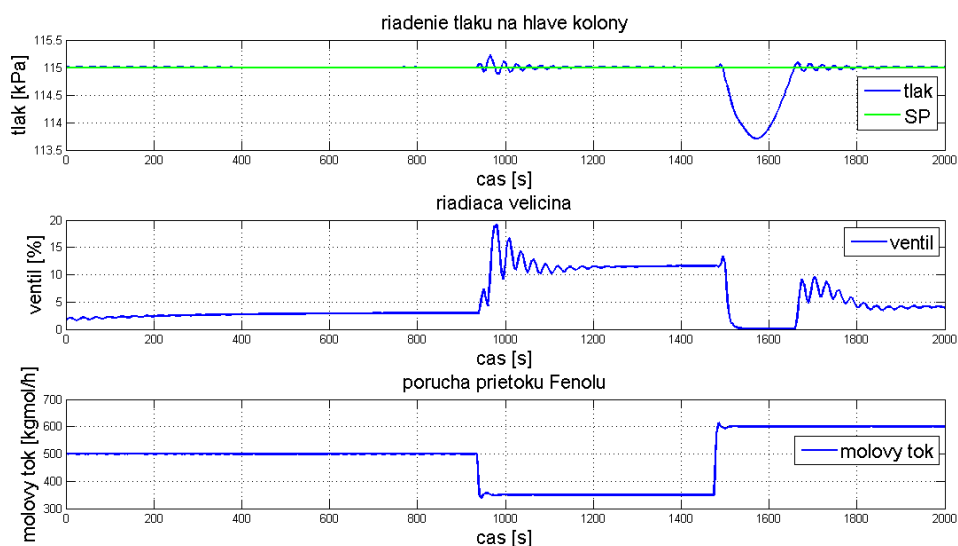


Obr. 50: Schéma výsledného zapojenia hlavného a pomocného regulátora



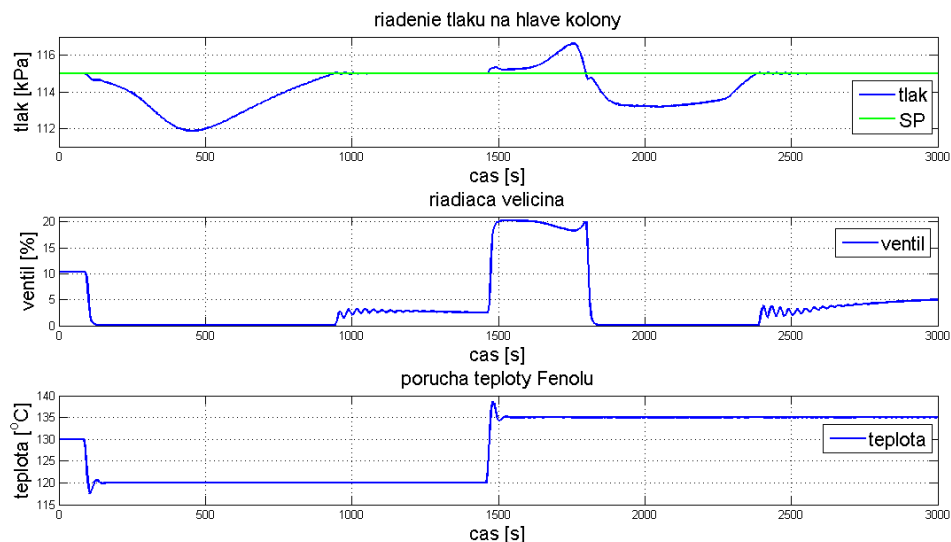
Obr. 51: Schéma kaskády riadenia tlaku na hlave kolóny T – 100

Pri funkčnom zapojení som testoval vplyv poruchy vstupného toku Fenolu do kolóny T – 100. V prvom prípade, je priebeh regulácie pri danej poruche zobrazený na obrázku 52. Prostredníctvom zmeny otvorenia ventilu VLV – 4 dochádzalo k uriadeniu tlaku na hlave kolóny s menšími osciláciami v okolí žiadanej veličiny.



Obr. 52: Vplyv poruchy molového toku Fenolu na riadenie tlaku na hlave kolóny

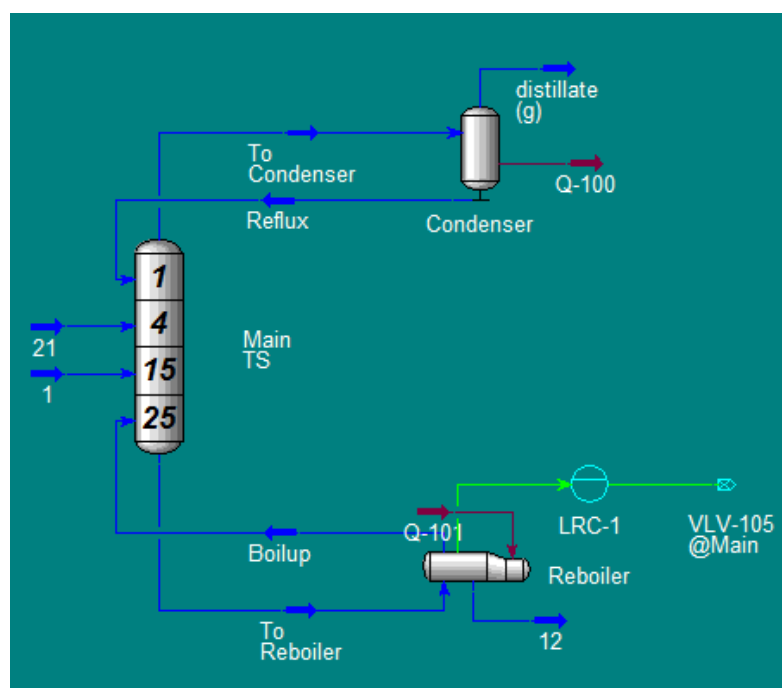
V druhom prípade som testoval aké bolo riadenie tlaku na hlave kolóny ak dochádzalo k poruche teploty vstupného prúdu Fenolu. Táto porucha predstavovala väčšie riziko v oblasti riadenia na žiadanú veličinu, pretože spôsobovala väčšie oscilácie tlaku. Priebeh riadenia je zobrazený na obrázku 53.



Obr. 53: Vplyv poruchy teploty Fenolu na riadenie tlaku na hlave kolóny

2.3.4 Riadenie zádrže kvapaliny vo varáku pomocou prietoku zvyšku

Pri tomto spôsobe riadenia, ako je to znázornené na obrázku 54, bol riadiacou veličinou odchádzajúci zvyšok z varáka, pri použitej riadenej veličine – zádrži kvapaliny vo varáku. Akčným členom bol ventil VLV – 105.



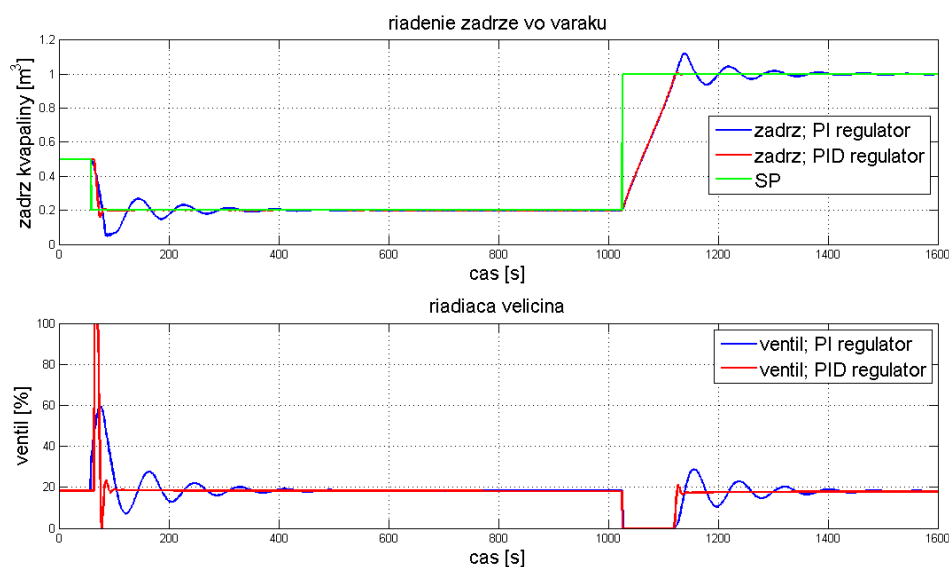
Obr. 54: Schéma riadenia zádrže kvapaliny vo varáku pre kolónu T – 100

Pre riadenie boli použité PI (18) a PID (19) regulátory navrhnuté pomocou Autotunera.

$$G(s) = Z_r \left(1 + \frac{1}{T_i s} \right) = -0,399 \left(1 + \frac{1}{3,36s} \right) \quad (18)$$

$$G(s) = Z_r \left(1 + \frac{1}{T_i s} + T_D s \right) = -8,76 \left(1 + \frac{1}{1,9s} + 0,4224s \right) \quad (19)$$

Pri tomto riadení výšky hladiny vo varáku, ktoré je zobrazené na obrázku 55, som porovnával riadenie pomocou regulátora PI a PID získaného z Autotunera. Generalizovaním regulácie bolo uriadenie zádrže kvapaliny vo varáku na požadovanú hodnotu prostredníctvom akčného člena – ventila. Použitie PID regulátora sa ukázalo ako výhodné z hľadiska menej kmitavého priebehu. Bolo to spôsobené tým, že D zložka spôsobovala tlmenie oscilácií priebehu riadenia. Bez derivačnej zložky dochádzalo k prekmitu regulačného pochodu.



Obr. 55: Porovnanie riadenia zádrže kvapaliny vo varáku zmenou otvorenia ventilu prostredníctvom PI a PID Autotunera

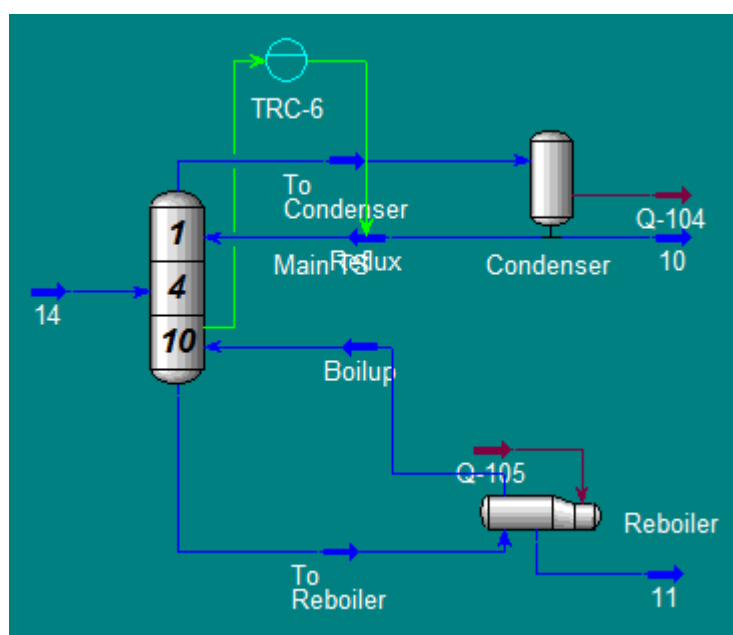
2.4 Riadenie 2. kolóny

Stratégiou riadenia tejto rektifikačnej kolóny bolo zabezpečiť konštantnú separačnú činnosť. Inými slovami povedané, separovať Toluén aspoň pri čistote 60 až 70 molových percent. Ďalším cieľom bolo zabezpečiť konštantný tok Fenolu ako zvyšku, pretože ten sa ďalej využíval v recirkulácii.

Prístup, akým boli tieto ciele dosiahnuté bol vytýčený na riadenie teploty na hlave kolóny a riadenie zádrže kvapaliny vo varáku kolóny T – 101.

2.4.1 Riadenie teploty na hlave kolóny pomocou refluxu

Pri tomto spôsobe riadenia, ako je to znázornené na obrázku 56, bol riadiacou veličinou refluxný tok pri použitej riadenej veličine – teplote na hlave kolóny.

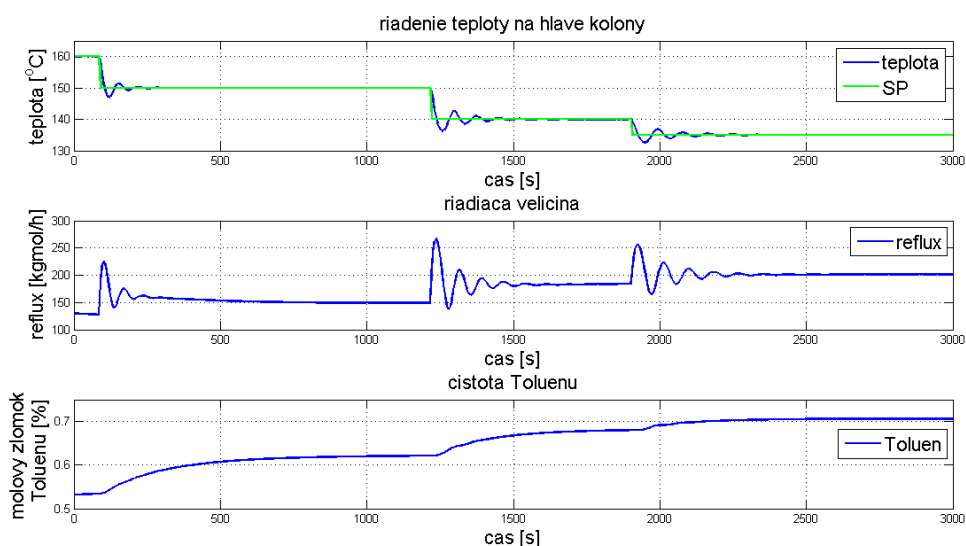


Obr. 56: Schéma riadenia teploty na hlave kolóny refluxom

Pre riadenie bol použitý PI regulátor (20) navrhnutý pomocou Autotunera.

$$G(s) = Z_r \left(1 + \frac{1}{T_i s} \right) = -0,404 \left(1 + \frac{1}{2,06s} \right) \quad (20)$$

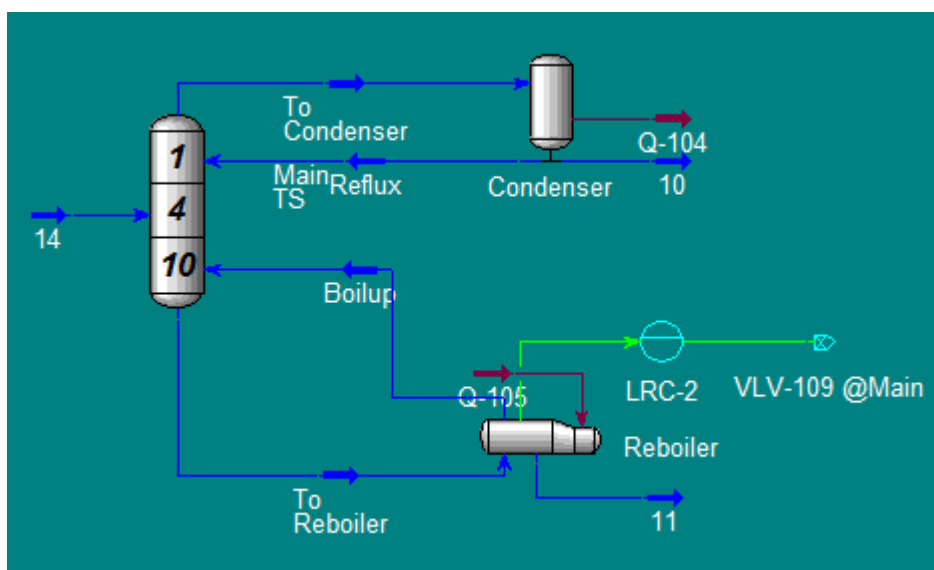
Riadenie teploty na hlave kolóny, ktoré je zobrazené na obrázku 57, bolo realizované zmenou refluxného toku. S menšími osciláciami sa podarilo zabezpečiť požadovanú teplotu na hlave kolóny. S poklesom teploty stúpala molový zlomok Toluénu na výstupe. Maximálna čistota bola dosiahnutá na 70 molových percentách.



Obr. 57: Riadenie teploty na hlave kolóny refluxom pomocou PI regulátora z Autotunera

2.4.2 Riadenie zádrže kvapaliny vo varáku pomocou zvyšku

Pri tomto spôsobe riadenia, ako je to znázornené na obrázku 58, bol radiacou veličinou odchádzajúci zvyšok pri použitej riadenej veličine – zádrži kvapaliny vo varáku. Akčným členom bol ventil VLV – 109.

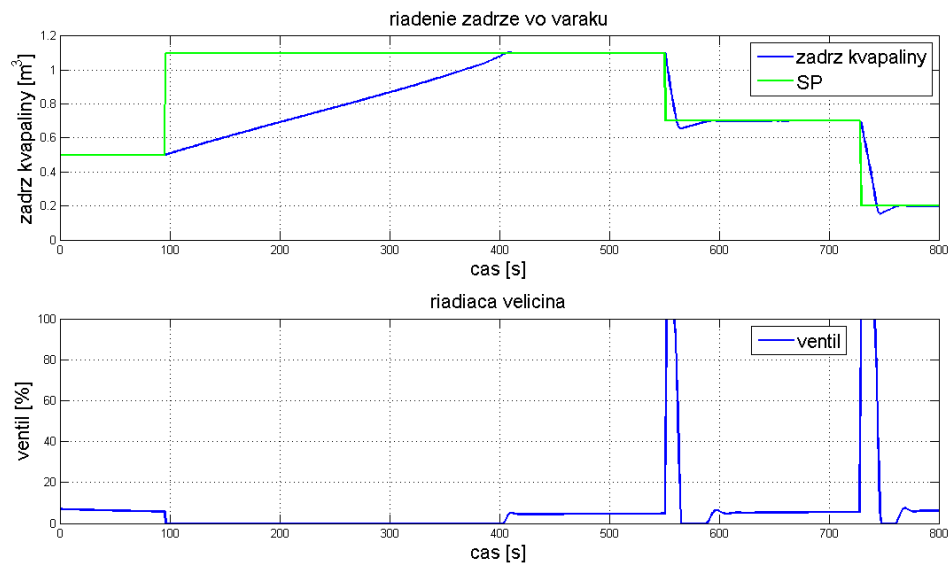


Obr. 58: Schéma riadenia zádrže kvapaliny vo varáku pre kolónu T – 101

Pre riadenie bol použitý PID regulátor (21) navrhnutý pomocou Autotunera.

$$G(s) = Z_r \left(1 + \frac{1}{T_i s} + T_D s \right) = -9,95 \left(1 + \frac{1}{1,9s} + 0,49s \right) \quad (21)$$

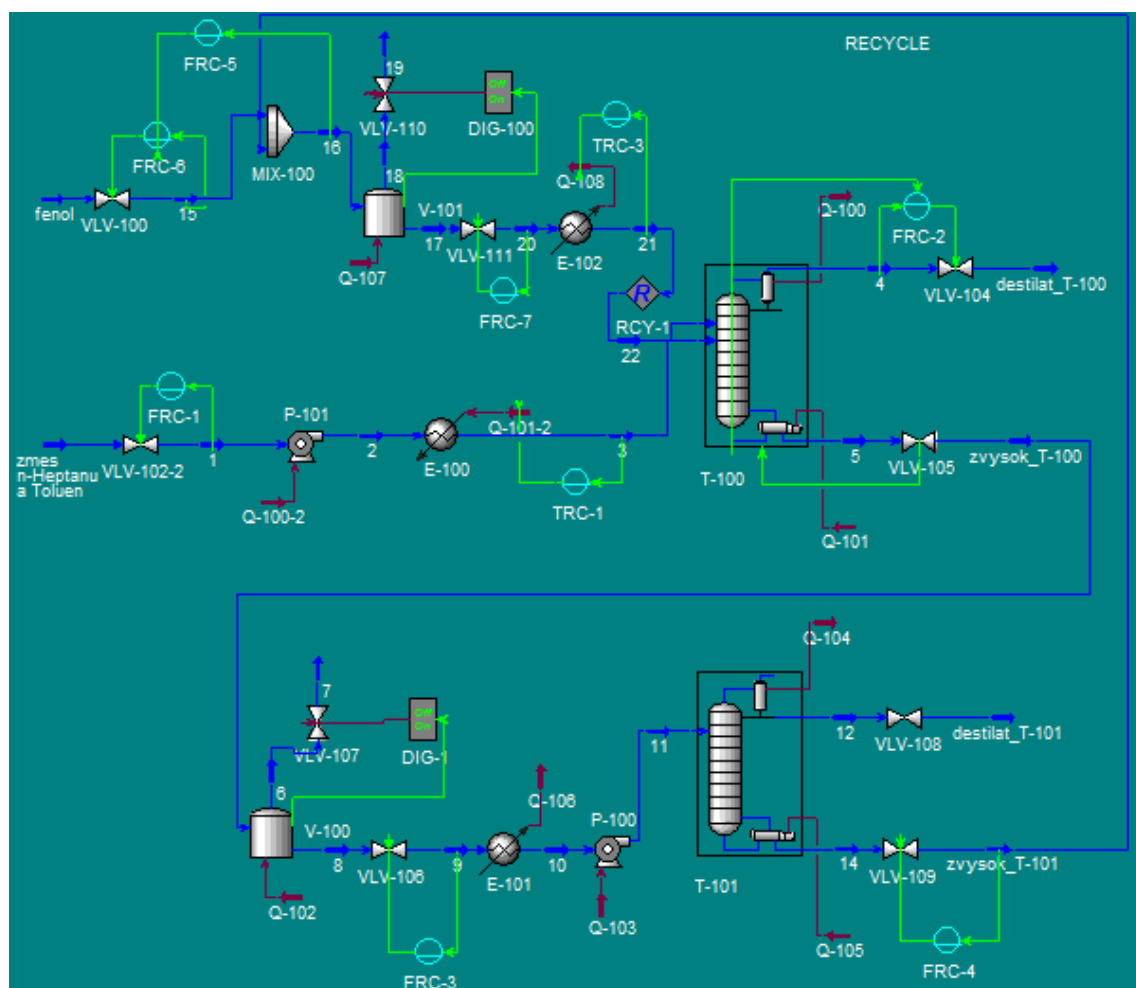
Výsledkom tohto riadenia zádrže vo varáku, ktoré je zobrazené na obrázku 59, bolo dosiahnutie konštantného molového toku zvyšku. Dochádzalo ku nekmitavému regulačnému priebehu, ktorý bol zabezpečený použitím PID regulátora. Dosiahnutie požadovaného objemu kvapaliny z 0,5 m³ na 1,1 m³ bolo síce pomalé, ale v tomto čase neodchádzal z kolóny žiaden zvyšok. Regulátor z Autotunera okamžite reagoval na zmenu žiadanej veličiny nekmitavým akčným zásahom ventila.



Obr. 59: Riadenie teploty na hlave kolóny refluxom pomocou PI regulátora z Autotunera

2.5 Kompletizácia schémy

Výsledná technologická schéma so zapojením prúdov, dvoch kolón, ohrievača, dvoch chladičov, vyrovnávacích nádrží, čerpadiel, zmiešavača a implementovaných regulačných obvodov je znázornená na obrázku 60. Táto schéma s názvom DP_completed_scheme.usc sa nachádza v prílohe.



Obr. 60: Výsledná schéma separácie zmesi s riadením

Proporcionálne a integračné zložky ostatných regulátorov, ktoré boli navrhnuté pomocou Autotunera, sa nachádzajú v tabuľke 6.

Tab. 6: Zložky použitých regulátorov v schéme

Autotuner PI regulátor	P	I
FRC – 1	0,00142	0,0058
FRC – 2	0,00121	0,0272
FRC – 3	0,00178	0,0271
FRC – 4	0,0209	0,166
FRC – 5	0,137	0,177
FRC – 6	0,000213	0,00407
FRC – 7	0,00311	0,0267
LRC – 1	-0,399	3,36
PRC – 1	-0,569	0,128
TRC – 1	0,098	4,62
TRC – 2	-0,404	2,06
TRC – 3	-0,00325	0,536

Pri štarte simulácie, teda pri prechode zo *Static Mode* do *Dynamic Mode*, bol potrebný určitý čas, aby sa kolóny inicializovali. Predstavovalo to časové trvanie cca 20 minút. Po uplynutí tejto doby kolóny už pracovali správne. Pri inicializácii v dynamickom móde bolo potrebné pre vyrovnávaciu nádrž V – 101 zvoliť z ponúknutých možností: *Increase Temperature* a *100% Liquid* práve možnosť *Increase Temperature*. Pre kondenzátor kolóny T – 101 bolo potrebné zvoliť z vyššie spomenutej voľby práve voľbu *100% Liquid*. Nastavenie charakteristík týchto spomenutých operátorov bolo dôležité pre správnu separáciu. Pri inej voľbe by dochádzalo k výpočtovým problémom, ktoré by smerovali v konečnom dôsledku ku ukončeniu simulácie.

3 Záver

Cieľom mojej diplomovej práce bolo namodelovať a riadiť výrobu n – Heptánu a Toluénu prostredníctvom programu UniSim Design R390. Stratégia riešenia danej problematiky spočívala primárne v zabezpečení správnej separácie zmesi n – Heptánu a Toluénu s dosiahnutím molového zlomku n – Heptánu na úrovni minimálne 99% a pre Toluén aspoň 70%. Sekundárny cieľ vymedzoval prístup na zabezpečenie správneho chodu extrakčno – rektifikačnej a rektifikačnej kolóny s ohľadom na korektnú separačnú činnosť a kompenzáciu výskytu porúch. V technologickej schéme, ktorá zabezpečovala separáciu, boli použité čerpadlá, ohrievač, chladiče, zmiešavač a vyrovnávacie nádrže. Všetky tieto činitele plnili nezastupiteľnú úlohu pre konfiguráciu fyzikálno – chemických parametrov vstupných a výstupných prúdov.

V rámci stratégie syntéz regulátorov som pristupoval k identifikácii prenosu na základe získaných dát z odozvy dynamického systému na skokové zmeny. Ďalším krokom bol návrh regulátorov podľa známych metód s vyhodnotením integrálneho kritéria kvality. UniSim Design ponúka možnosť syntézy regulátora pomocou nástrojov Autotunera a IMC Designu. Komparáciou troch získaných regulátorov som dospel k zisteniu, že optimálny regulátor bol získaný práve pomocou programového nástroja Autotuner. Využitie dvojpolohovej regulácie v podobe spínačov sa ukázalo ako jednoduchý prístup k riadeniu vyrovnávacích nádrží.

Pri riadení prvej extrakčno – rektifikačnej kolóny som sa zamerlal na riadenie zádrže kvapaliny v kondenzátore a vo varáku. V ďalšom kroku som riadil teplotu a tlak na hlave kolóny. Pri riadení zádrže v kondenzátore som riadil výšku hladiny z 1 m^3 na $1,5\text{ m}^3$ a potom na $0,5\text{ m}^3$. Riadiacou veličinou bol refluxný tok, pričom v každom prípade dochádzalo k uriadeniu hladiny na žiadanú hodnotu. Sledovaním zmeny čistoty n – Heptánu som dospel k záveru, že znížením zádrže kvapaliny v kondenzátore dochádzalo k zvýšeniu molového zlomku n – Heptánu. Pri riadení zádrže kvapaliny vo varáku som využil PI a PID regulátor získaný z Autotunera, pričom som porovnával jednotlivé regulácie. V oboch prípadoch došlo k uriadeniu systému na žiadanú hodnotu, pričom akčnou veličinou bol ventil na odchádzajúcom prúde zvyšku z 1. kolóny. D zložka v prípade PID regulátora zabezpečila kvalitnejší regulačný priebeh. Riadenie teploty na hlave kolóny bolo sprevádzané zvýšenými osciláciami v riadení na žiadanú hodnotu. Akčnou veličinou bol refluxný tok. Z hľadiska analýzy čistoty

získaného n – Heptánu som dospel k záveru, že zvýšením teploty dochádza k zníženiu jeho podielu v odchádzajúcich parách. Riadenie tlaku na hlave kolóny sa javilo ako najlepšie riešenie na zabezpečenie stability kolóny a čistoty separovanej látky. Akčnou veličinou bol ventil na odchádzajúcom prúde pár z kondenzátora. Zvyšovaním tlaku na hlave kolóny som získaval vyšší podiel n – Heptánu. Pri zapojení kaskádovej regulácie, ktorá je zobrazená na obrázku 50, som analyzoval ako dokázala kolóna separovať v prípade poruchy prietoku a teploty Fenolu. V každom prípade došlo k uspokojivému výsledku, čiže sa podarilo udržať žiadanú hodnotu tlaku na hlave kolóny s menšími osciláciami, ktoré narastali ak sa porucha prejavila na teplote privádzaného Fenolu.

Pri riadení druhej rektifikačnej kolóny som sa zamerlal na riadenie teploty na hlave kolóny a zádrže kvapaliny vo varáku. Pri riadení teploty na hlave kolóny bol akčnou veličinou refluxný tok. Pomocou regulátora získaného z Autotunera sa podarilo uradiť teplotu na žiadanú hodnotu. Analýzou čistoty Toluénu v destiláte som dospel k záveru, že znížením teploty dochádzalo k zvýšeniu molového zlomku Toluénu. Riadením zádrže vo varáku pomocou akčnej veličiny – ventilu na prúde zvyšku, som dospel k záveru, že navrhnutý PID regulátor dokázal uspokojivo uradiť zádrž na žiadanú hodnotu s minimálnymi prekmitmi riadiacej veličiny.

Nekmitavý regulačný priebeh sa ukázal ako optimálny prístup pre realizáciu recirkulácie zvyšku, ktorý bol tvorený z hlavnej časti Fenolom. Pomocou využitia zvyšku z druhej kolóny som dokázal ušetriť čerstvý Fenol, ktorý vstupoval do prvej kolóny. V podstatnej miere som optimalizoval spotrebu čerstvého Fenolu. V reálnej prevádzke by to prinieslo nižšie prevádzkové náklady.

Do budúcnosti je možné optimalizovať spotrebu a využitie jednotlivých tepelných prúdov práve rekuperáciou a ich prepojením. UniSim Design taktiež ponúka nástroje na optimalizáciu zisku, ak sú zadane vstupné parametre pre jeho výpočet. Agregáciou týchto stratégií by sa zvýšila pridaná hodnota technologického procesu.

Zoznam použitej literatúry

- [1] Dostupné na internete: <<http://hpsweb.honeywell.com/Cultures/en-US/Products/ControlApplications/simulation/UniSimDesign/default.htm>>
- [2] Dostupné na internete: <<http://hpsweb.honeywell.com/NR/rdonlyres/3406456F-3AFA-40F6-9A71-EE779F298884/95221/UniSimDesignSuiteProductInformationNote.pdf>>
- [3] Dostupné na internete: <<http://hpsweb.honeywell.com/Cultures/en-US/Products/ControlApplications/simulation/UniSimOperations/default.htm>>
- [4] Dostupné na internete: <[http://eprints.utm.my/3030/2/HYSYS for UTM Degree%2B%2B Program.pdf](http://eprints.utm.my/3030/2/HYSYS_for_UTM_Degree%2B%2B_Program.pdf)>
- [5] Dojčanský, J., Longauer, J., Chemické inžinierstvo II. Malé Centrum, Bratislava, 2000. ISBN 80-967064-8-9
- [6] Oravec, Juraj.: *Tvorba programového systému pre syntézu regulátorov*. Diplomová práca, ÚIAM FCHPT STU v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, 2010.

Prílohy

CD médium

- diplomová práca v elektronickej podobe
- simulačná schéma: DP_completed_scheme.usc
ohrievac.usc
- schéma: testovanie_PI.mdl