



Heterokatalitikus reaktorok vizsgálata

Varga T., Abonyi J., Szeifert F.

Pannon Egyetem, Mémnöki Kar, Folyamatmérnöki Intézeti Tanszék
Veszprém, 8200 Egyetem út 10.

ÖSSZEFOGLALÁS

A reaktorok elfutása az ipari gyakorlatban gyakran jelentkező problémát jelent. A jelenség a technológia állapotváltozóinak, például a reaktor hőmérsékletének hirtelen bekövetkező, nagymértékű változását jelenti. A reaktor elfutásának megfelelő időben történő felismerése biztonsági és technológiai okokból egyaránt fontos lehet. Az elfutás bekövetkezésének jelzésére alkalmas módszereket két megközelítésmód alapján csoportosíthatjuk. A munkánk során egy döntéstámogató adat-, illetve egy modell-alapú technikát tanulmányoztunk. Az adat- és modell-alapú módszerek között a legnagyobb különbség, hogy az utóbbi alkalmas az elfutás bekövetkezésének előrejelzésére. Célul a reaktor elfutásának előrejelzésére alkalmas eszköz kifejlesztését tűztük ki, mely a betáplálási körülmények alapján kell, hogy előre jelezze a reaktor elfutását. Egy könnyen értelmezhető modell előállítás volt a célunk, amely alkalmas a különböző jellegű működési tartományok feltárására. Erre a célra döntési fákat alkalmazását javasoljuk, mivel ezek könnyen áttekinthetően definiálják az elfutás jelenségét generáló bemeneti változók által definiált működési tartományokat. A cikk ismerteti a vizsgált ipari reaktor stacioner modelljét és viselkedését, illetve az alkalmazott döntési fa identifikálásának technikáját. Az eredmények jól mutatják, hogy az általunk kidolgozott eszköz nemcsak az elfutás pontos előrejelzésére, hanem a fontos technológiai változók feltárására is alkalmas, így az operátorok döntéseit támogató szakértői rendszer részeként is funkcionálhat.

(Kulcsszavak: reaktorelfutás, előrejelzés, stabilitás-vizsgálat, döntési fa, döntéstámogató rendszer)

ABSTRACT

Simulation study of a heterocatalytic reactor

T. Varga, J. Abonyi, F. Szeifert

University of Pannonia, Faculty of Engineering, Department of Process Engineering
Veszprém, H-8200 Egyetem út 10.

The reactor runaway phenomenon is a serious problem in the chemical industry. In this work we focus on one of these runaway problems. Reactor runaway means a sudden and considerable change in the process variables. Runaway has two main important aspects. In one hand runaway forecast has a safety aspect, since it is important for avoiding the damage of reactor's constructional material or reactor explosion; on the other hand it has a technology aspect, since the forecast of the runaway can be used for avoiding the development of hot spots in catalytic bed. Most of different runaway criteria found in literature are basically based on two approaches, there are data- and model-based criteria. The problem with the data-based methods is found in measurement conditions. The model-based criteria require parameter-stability analysis, that means to apply a model-based criteria is necessary to have an exact

model and correct model parameters. This thesis applies the Ljapunov's indirect method to study the stability of an industrial reactor, and presents the how the steady-state simulator of the reactor can be used for the forecasting of the runaway in a catalytic tube-reactor. Based on the results extracted from this analysis a decision tree was inducted in order to be applied as part of an operator support system. This device is suitable for forecasting the reactor runaway based on the measured feed parameters.

(Keywords: reactor runaway, forecast, stability analysis, decision tree, operator support system)

BEVEZETÉS

Az ipari gyakorlatban használt folyamatirányító rendszerek törekednek arra, hogy a lehető legjobban kihasználják a technológiai folyamat nyújtotta lehetőségeket. Az optimális üzemeltetési körülmények már a fizikai és kémiai törvények által meghatározott korlátokat közelítik. Az egyik legkritikusabb biztonsági határ exoterm hőszínezetű reakció lejátszatásának helyet adó reaktor esetén az úgynevezett reaktorelfutását kiváltó körülmény. A reaktorok elfutása a technológia állapotváltozóinak, például a reaktor hőmérsékletének hirtelen bekövetkező nagymértékű változását jelenti. A jelenség kialakulását a legtöbb esetben igyekeznek elkerülni, de előfordulhat néhány technológiai lépés esetén, hogy célszerű a kialakulását segíteni, persze teljesen kontroll alatt tartott körülmények között.

A reaktor elfutásának megfelelő időben történő felismerése biztonsági és technológiai okokból egyaránt fontos lehet. Biztonsági ok a reaktor felrobbanásának megelőzése, míg a technológiai okok közé az úgynevezett forró-pontok kialakulásának elkerülése tartozhat, ami elsősorban a katalizátor megóvásának szempontjából fontos. A reaktorok elfutása, mint jelenség, már régóta ismert, de csak a Bhopal-i és a Seveso-i katasztrófákat követően került a figyelem középpontjába (*Eissen*, 2003). Az üzembiztonsági rendszerek fejlesztéséhez elengedhetlenül szükség volt az elfutás jelenségének részletes megismerésére. Az elfutás összetettségét támasztja alá az a tény, hogy még nem létezik olyan kritérium, amely teljes pontossággal előrejelezné bekövetkezését. A reaktorok elfutásának vizsgálata során eleinte arra a kérdésre keresték a választ, hogy a jelenség kialakulását a reaktor stabilitása határozza meg, vagy valami teljesen más.

Semenov (1928) úttörő munkáját követően a reaktorok vizsgálatával foglalkozó kutatások közvetve, vagy közvetlenül, de érintik a reaktorok stabilitásának és/vagy elfutásának leírását. *Bilous and Amundson* (1956) voltak az elsők, akik az elfutási probléma megoldására paraméter érzékenységi vizsgálatokat végeztek. A reaktor stabilitásának meghatározása alapján fogalmazták meg a reaktorelfutásának feltételét. Az érzékenység mérésére a reaktorok hossza mentén meghatározott maximális hőmérsékletek *Semenov*-szám szerinti deriváltját használták. Később *Schmitz* (1975) írta le, hogy az érzékenység vizsgálat kevésbé meghatározott, mint a stabilitás, de a kettő között létezik valamiféle kapcsolat. Az első reaktorelfutásra vonatkozó kritériumot *Barkelev* (1959) fogalmazta meg a hőmérsékletprofil empirikus analízise alapján. *Dente and Collina* (1964) a reaktor hőmérséklet maximuma előtt jelentkező inflexiós pontot tekintették elfutási feltételnek. Az általuk megfogalmazott kritérium tehát azt mondja ki, hogy a reaktor abban az esetben tekinthető elfutottnak, ha a hőmérséklet reaktorhossz szerinti második deriváltja nulla értéket vesz fel. Négy évvel később *Berty et al.* (1968) szintén ezt a kritériumot találták megfelelőnek az elfutás jelzésére. *Adler and Enig* (1964) a vizsgálatot az idő- és hossztartomány helyett a fázisra terjesztették ki. A fázisra a hőmérséklet és a konverzió összefüggése alapján írták le. Elfutási kritériumként azt a pontot jelölték meg, ahol a hőmérséklet a konverzió szerinti második deriváltja negatív értéket vesz fel. *Van Welsenaere and Froment* (1970) ezt nevezték

az első, a *Dente and Collina* (1964) által leírtat pedig a második kritériumnak. A két feltétel összehasonlítása után úgy gondolták, hogy ezek kevésben térnek el egymástól, valamint belátták, hogy a második kritérium pontatlanabb. *Bilous and Amundson* (1956) paraméter érzékenység jellemzésre adott megközelítést, először *Lacey* (1983) és *Boddington* (1983) alkalmazták az elfutás feltételének meghatározására. A számított érzékenységi jellemzőket ábrázolva maximummal rendelkező görbét kaptak. Abban az esetben, ha a Semenov-szám kisebb, mint a maximumhoz tartozó kritikus érték, akkor nem tapasztalták az elfutás bekövetkezését, ellenkező esetben pedig csak valószínűsíteni tudták a jelenség kialakulását. Egy, a tanszéken végzett kutatómunka során a bemutatott értelmezéseket hasonlították össze és az elfutás bekövetkezésének jelzésére Ljapunov stabilitási kritériumának alkalmazását javasolták (*Szeifert*, 2006).

Az előzőekben bemutatott kutatómunkák alapján, azt mondhatjuk, hogy két megközelítésmódon alapuló technikák léteznek az elfutás bekövetkezésének jelzésére. Adat-alapú megközelítésmódra épülő technikák legnagyobb hátránya, hogy későn, csak a bekövetkezést követően jelzi a reaktorelfutását. A mért változók kezelésének körülményessége, például az adatok mérési zajtól, illetve hibától történő szűrésének technikai kérdései tovább nehezítik e megoldások alkalmazását. Az adat-alapú technikák közé tartozik a technológiai változó idősorának inflexió pontján alapuló módszer. A modell alapú megközelítésmódot alkalmazó technikák még az elfutás bekövetkezése előtt figyelmeztethetnek. E technikák azonban stabilitás-vizsgálatra vezethetők vissza, ugyanis az alapgondolat, hogy az elfutás bekövetkezése és a reaktor instabillá válása egyszerre következik be. A stabilitás-vizsgálat elvégzéséhez elengedhetetlenül szükséges a reaktor részletes modelljének, illetve paramétereinek ismerete, melyek nem mindig állnak rendelkezésre. Abban az esetben, ha a modell és a paraméterek is ismertek még mindig szükség van mérésekre, melyek a modelljóságának meghatározására szolgálnak.

A stabilitásvizsgálat első lépésében az állapotváltozókra felírt nemlineáris differenciál-egyenletrendszer kell megoldani. A rendszer állapotátmeneti függvénye a

$$\frac{d\mathbf{x}}{d\tau} = \mathbf{f}(\mathbf{x}) \quad (1)$$

összefüggéssel adható meg, ahol \mathbf{x} az állapotváltozókat jelöli. A cikkben leírt modellalapú technika, a stabilitás megállapításához Ljapunov közvetett módszerét alkalmazza, s így az (1) differenciál-egyenletrendszer a Jacobi-mátrix,

$$\mathbf{J} = \left(\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}} \right)_{\mathbf{x}_0} \quad (2)$$

ahol \mathbf{x}_0 jelöli a vizsgált munkapontot, sajátértékeinek (λ),

$$|\mathbf{J} - \lambda \mathbf{I}| = 0 \quad (3)$$

vizsgálatára egyszerűsödik. A stabilitás kritériuma alapján, ha a (2) $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ sajátértékei negatívak, akkor az (1) összefüggés stabilnak, ha egy sajátérték is pozitív, instabillnak tekinthető a vizsgált munkapontban. Komplex sajátérték(ek) esetén további vizsgálat(ok) elvégzésére van szükség (*Szeifert*, 2000).

STACIONER MODELL

A munkánk alapjául egy ipari kontakt katalitikus reaktor vizsgálata szolgál (*1. ábra*), amelyben az álló, szilárd halmazállapotú katalizátorágyon keresztül áramoltatják a

gázhalmazállapotú reagenseket. A reaktor felépítését tekintve egy nagyszámú csövet magába foglaló függőleges kialakítású henger, ahol a katalizátor a csövekben van elhelyezve. A reakció hőszínezetét tekintve exoterm, ezért a reakciótér hűtésére van szükség, amit a csövek között áramoltatott hűtővízzel valósítanak meg. A gázhalmazállapotú reagensek betáplálása a reaktor alján történik. A másodrendű reakcióban felszabaduló hőmennyiség hatására a katalizátorágyban forrópontok alakulhatnak ki, amelyek meggyorsítják a katalizátor öregedését, ezért nagyon fontos az üzemeltetési körülmény megválasztása. A vizsgált reaktor normál üzemviteléhez hozzátartozik a reaktorelfutás bekövetkezése, így a rendszer lehetőséget nyújt ezen jelenség vizsgálatára. A feladat azon üzemeltetési tartományok meghatározása, melynél elfutásmentes körülmények között működtethető a reaktor, illetve egy olyan eszköz kidolgozása mely alkalmas előrejelezni az elfutás bekövetkezését.

1. ábra

A modellezett objektum egyszerűsített képe

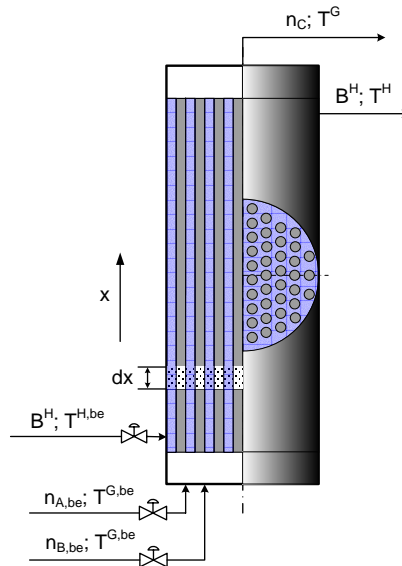


Figure 1: Schematic drawing of the contact catalytic reactor

A reaktor egy adott pontjában kialakuló stacioner állapot definiálására öt állapotváltozó szükséges, a három komponens anyagárama, a hőmérséklet és a nyomás. Az állapotváltozókra felírt mérlegegyenletek a következő feltételezéseken alapulnak:

- a reakció a gázfázisban játszódik le;
- a gáz és a szilárdfázis hőmérséklete megegyezik;
- a nyomásesés számítására egy egyszerűsített empirikus összefüggést alkalmaztunk;
- a köpenytér hőmérséklete állandó.

A modell egyenletekben szereplő változók jelentését a jelölésjegyzékben foglaltuk össze. A feltételezések alapján a komponensek anyagmennyiség áramainak hosszmenti változása:

$$\frac{dn_i}{dx} = v_i \cdot V^G \cdot r^G, \quad (4)$$

ahol $i = \{A; B; C\}$. A reaktor hőmérsékletének, illetve nyomásának változása az alábbi összefüggéssel definiálható:

$$B^G \cdot \rho^G \cdot c_p^G \cdot \frac{dT^G}{dx} = V^G \cdot r^G \cdot \Delta H_r - A^{GH} \cdot \alpha^{GH} \cdot (T^G - T^H) \quad (5)$$

$$\frac{dp^G}{dx} = -0.012. \quad (6)$$

Az egyenletrendszer megoldásához szükséges peremfeltételeket a belépő áramok tulajdonságai adják:

$$x = 0, \quad n_i = n_{i,be}; \quad T^G = T^{G,be}; \quad p^G = p^{G,be}. \quad (7)$$

A (4)-ben szereplő bruttó reakciósebesség számítására a *Potter (1951)* által javasolt

$$r^G = 9477 \cdot e^{\left(\frac{-18250}{R \cdot T^G}\right)} \cdot p^G \cdot \frac{(n_A)^{0.75} \cdot (n_B)^{0.25}}{\sum_{i=\{A,B,C\}} (n_i)} \cdot (1 - K_r) \cdot r_{corr} \quad (8)$$

összefüggést alkalmaztuk, amit egy korrekciós faktorról (r_{corr}) módosítottunk, hogy a valós reaktorban lejátszódó folyamat bruttó sebességét kapjuk. A reakcióra vonatkozó egyensúlyi állandó értékét az alábbi összefüggésből határoztuk meg:

$$K_r = e^{\left(16.14 - \frac{102845}{R \cdot T^G}\right)}. \quad (9)$$

Az (5) egyenletben szereplő hőkapacitásáramot

$$B^G \cdot \rho^G \cdot c_p^G = \sum_{i=\{A,B,C\}} \left[B^G \cdot c_i^G \cdot M_i \cdot (c_{1,i} + c_{2,i} \cdot T^G + c_{3,i} \cdot (T^G)^2) \right], \quad (10)$$

míg a gázfázis és köpenyter közötti hőátvezetés tényezőt, a mérési adatokra illesztett empirikus összefüggéssel számítottuk (*Madár, 2005*):

$$\alpha^{GH} = 52.7 + 0.1 \cdot T^G. \quad (11)$$

A modell leképezését és az elvégzett vizsgálatokat MATLAB környezetben valósítottuk meg.

EREDMÉNY ÉS ÉRTÉKELÉS

A stacioner modell adekvátságának vizsgálata

A stacioner szimulátor megfelelőségének vizsgálatához az üzemeltetés során gyűjtött és a szimulátorral számított stacioner hőmérséklet értékeket hasonlítottuk össze a 2. ábrán. A mért adatokat különböző reagens betáplálási anyagáram esetén elvégzett mérések során gyűjtötték. A számított görbék, illetve a mért értékek illeszkedése alapján, arra a következtetésre jutottunk, hogy a szimulátor alkalmas a reaktorban bekövetkező elfutás vizsgálatára.

Az elfutás bekövetkezésének jelzése

Az elfutás kialakulásának jelzéséhez a modell stabilitását vizsgáltuk véletlenszerűen generált betáplálási áram tulajdonságkombinációk esetén. A stabilitás vizsgálatához meghatároztuk a stacioner modell Jacobi-mátrixát, majd alkalmazva Ljapunov stabili-

tásra vonatkozó kritériumát, véletlenszerűen generált betáplálási áram tulajdonságok esetén vizsgáltuk a modell-alapú módszer alkalmazhatóságát. A modellel számított hőmérsékletprofilok inflexiós pontjának vizsgálatát, az alkalmazott módszerek érzékenységének összevetése érdekében végeztük.

2. ábra

A mért és a számított értékek összehasonlítása

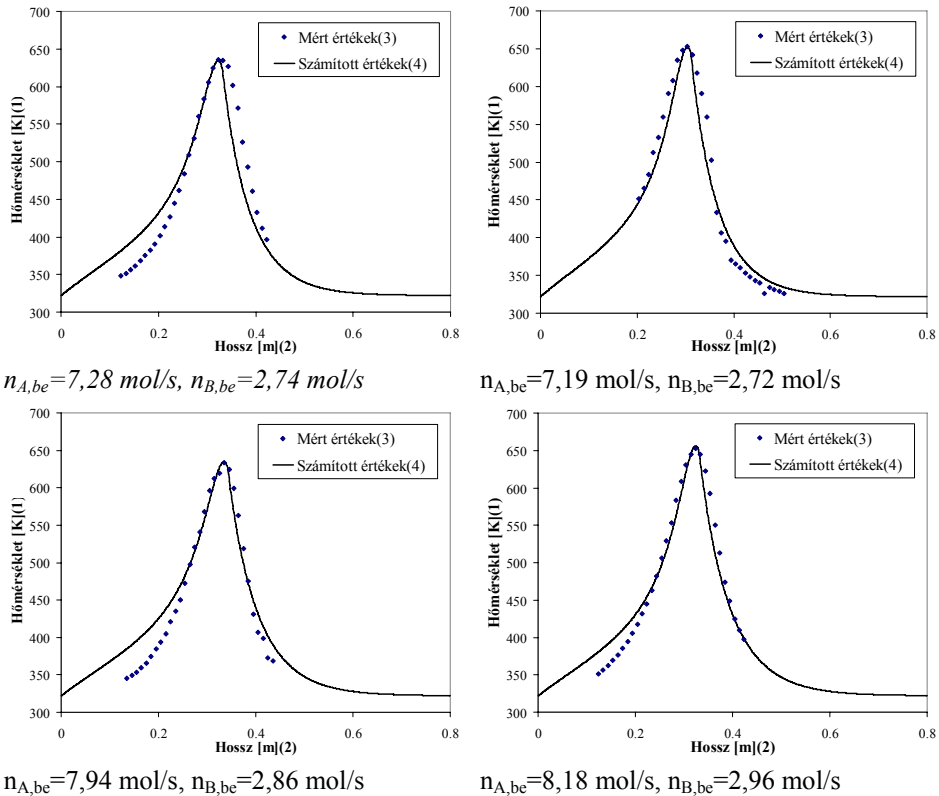


Figure 2: Comparison of measured and calculated temperatures

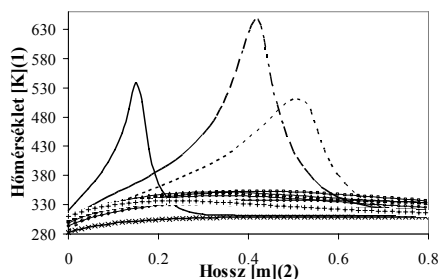
Temperature [K](1), Length [m](2), Measured values(3), Calculated values(4)

A módszerek megbízhatóságának megállapításához 10 darab véletlenszerűen generált betáplálási áramot állítottunk elő és vizsgáltuk az elfutás bekövetkezését. A generált betáplálási áramok alapján a szimulátorral számított hőmérsékletprofilok a 3a. ábrán láthatók.

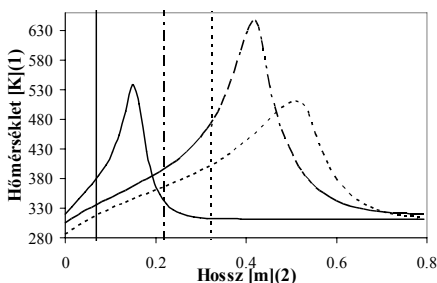
A stabilitás vizsgálat alapján elfutottnak ítélt esetek a 3b. ábrán láthatók, ahol a függőleges vonalak az első instabilnak talált munkapontokat jelölik. A 3a. és 3b. ábrákat összevetve látható, hogy a módszer alapján az összes szemmel láthatóan elfutott eset kiszűrhető. A 3b. és 3c. ábrák összevetésével megállapíthatjuk, hogy a két módszer alapján elfutottnak ítélt esetek megegyeznek. A módszerek érzékenységében tapasztalt ellentmondás (vö. 3b. és 3c. ábra függőleges vonalak) valószínűleg numerikus hiba eredménye.

3. ábra

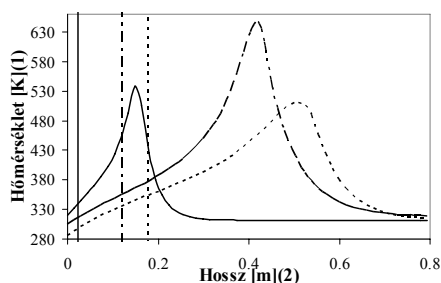
Reaktorelfutás jelzésre való alkalmazhatóság



a) A számított hőmérsékletprofilok (3)



b) Stabilitás vizsgálat (4)



c) Inflexió pont vizsgálat (5)

Figure 3: Application for reactor runaway detection

Temperature [K](1), Length [m](2), The calculated temperature profile(3), Stability analysis(4), Inflection point analysis(5)

Statistikai minta generálása

A vizsgálat során a cél a betáplálási áram tulajdonságai közül, a reaktorelfutásra leginkább hatással levők kiválasztása. Nagyszámú, véletlenszerűen generált bemenetet állítottunk elő és stabilitás vizsgálat alapján meghatároztuk, mely esetekben következik be elfutás. Eredményként az egyes betáplálási áram tulajdonságok változtatásának az elfutott kísérletek arányára gyakorolt hatását mutatjuk be a 4. ábrán.

A 4. ábrán látható, hogy az elfutás bekövetkezésére a legnagyobb hatással a hűtővíz ($T^{H,be}$), míg legkevésbé a reagensek betáplálásának hőmérséklete ($T^{G,be}$) van. A hűtővíz belépési hőmérsékletének 295-300 K-nél alacsonyabbat választva szinte teljes mértékben visszaszorítható az elfutás bekövetkezése. A hűtővíz betáplálási hőmérséklete mellett a nyomás ($p^{G,be}$) az, ami leginkább hatással van az elfutás bekövetkezésére. A betáplálás nyomásának növelésével közel lineárisan változik az elfutott kísérletek aránya, míg reagensek betáplálási anyagáramának növelése ($n_{A,be}$ és $n_{B,be}$), különböző mértékben ugyan, de csökkentik az elfutott kísérletek arányát. Erre a magyarázata az lehet, hogy a konvektív hőáram megnő a reakcióban felszabaduló hőmennyiséggel szemben, s ez segíti a reaktorban felszabaduló hő elvezetését. A sztöchiometriai aránytól lényegesen eltérő arányok ($n_{A,be}/n_{B,be}$) esetén a reakciósebesség jelentős csökkenése

okozza, hogy a reagáló komponensek betáplálási anyagmennyiségeinek arányának növelése kismértékben ugyan, de csökkenti az elfutás bekövetkezésének arányát.

4. ábra

Az elfutott kísérletek arányának változása

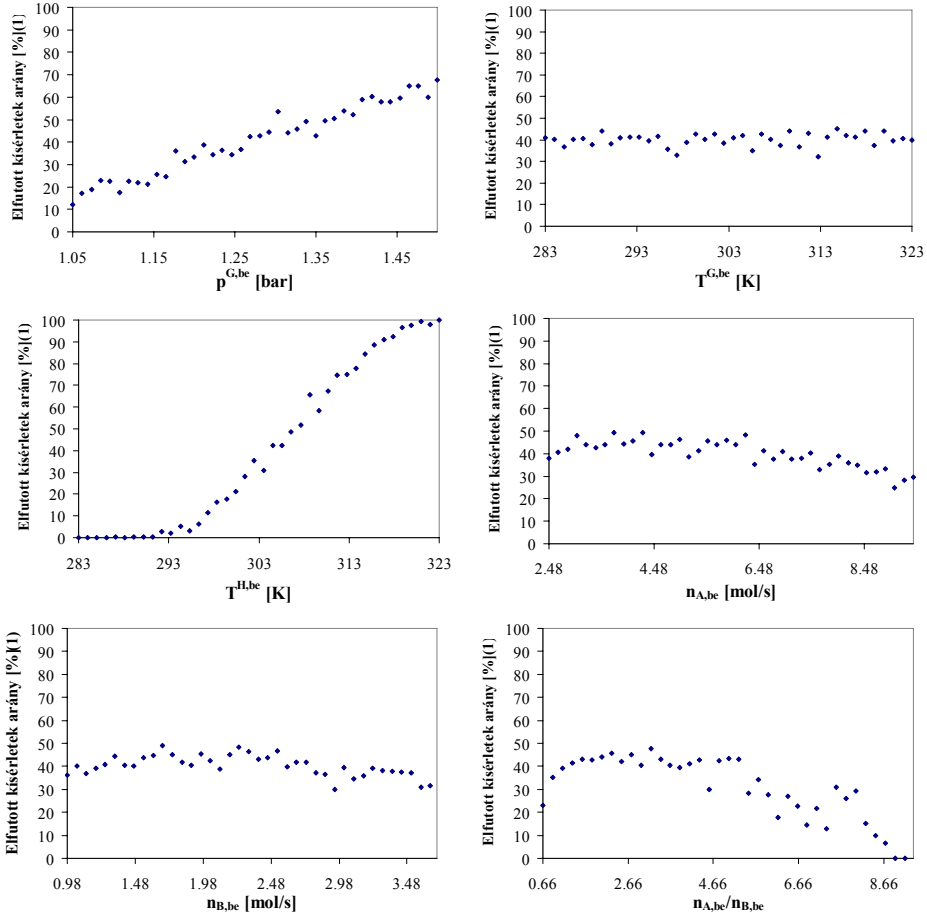


Figure 4: The effect of process variables to the probability of runaway

The ratio of experiments when runaway develops(1)

Döntési fa generálása

Az adatbányászat legfontosabb feladatai közé tartozik a különböző jelenségek meglévő adatok alapján történő leírása mellett, az egyes jelenségek jövőbeli viselkedésének előrejelzése is. Az osztályozás, mely lényege, hogy különböző mintákat előre meghatározott osztályokba sorolunk, a jelenségek leírása mellett előrejelzésre is alkalmas, ezért az adatbányászat egyik legfontosabb eszköze. Osztályozási feladatok megoldására a legismertebb eszköz a döntési fa, illetve azok az algoritmusok, amelyekkel ez generálható

(Han, 2000). A döntési fa abban segít, hogy sorozatos döntéseket követően a megfelelő következtetésre jussunk. A gyökérből indulva a fa köztes csomópontjaiban, általában egy változóra vonatkozó kérdésekre adott válaszokon keresztül jutunk el a fa valamelyik leveléig. A vizsgálatunk következtetését ennek a levélnek a címkéje tartalmazza.

Az előző fejezetben bemutatott eredményeket tanítási mintákként felhasználva döntési fát generáltunk az információnyereség elvén alapuló C4.5 algoritmus alkalmazásával (Abonyi, 2005). A szemléltetés érdekében csak az első ezer tanuló minta alapján létrehozott, majd egy alaposan tisztított fa látható az 5. ábrán. A később bemutatásra kerülő grafikus felület mögött már egy lényegesen összetettebb döntési fa áll.

Az 5. ábrán balról-jobbra haladva jutunk el a döntési fa gyökerétől az osztálycímkéket tartalmazó levelekig. Az osztálycímké 1-es értéke, azt jelenti, hogy a reaktor bemenetét a fa ezen ágával definiált intervallumból választva, nem következik be a reaktor elfutása. A 2-es értékű osztálycímké a reaktorelfutás bekövetkezését jelenti. A zárójelben lévő értékek közül a baloldali, az osztálycímké által definiált halmazba tartozó esetek számát, a jobboldali pedig a az információnyereség értékét adja meg.

5. ábra

A generált döntési fa

```

TH,be <= 306.6 :
| TH,be <= 296.3 : 1 (384.0/8.2)
| TH,be > 296.3 :
| | pG,be <= 1.37 :
| | | nA,be > 4.26 : 1 (138.0/9.4)
| | | nA,be <= 4.26 :
| | | | nB,be > 2.53 : 1 (19.0/4.6)
| | | | nB,be <= 2.53 :
| | | | | pG,be <= 1.25 : 1 (13.0/6.5)
| | | | | pG,be > 1.25 : 2 (11.0/4.2)
| | | pG,be > 1.37 :
| | | | TH,be <= 299.4 :
| | | | | pG,be <= 1.41 : 1 (5.0/2.3)
| | | | | pG,be > 1.41 : 2 (13.0/6.5)
| | | | | TH,be > 299.4 :
| | | | | nB,be > 1.26 : 2 (37.0/2.9)
| | | | | nB,be <= 1.26 :
| | | | | | TG,be <= 298.4 : 1 (3.0/1.9)
| | | | | | TG,be > 298.4 : 2 (2.0/1.6)
| | | TH,be > 306.6 :
| | | | pG,be > 1.27 : 2 (192.0/6.7)
| | | | pG,be <= 1.27 :
| | | | | TH,be <= 311.7 :
| | | | | | nB,be > 2.74 : 1 (16.0/2.7)
| | | | | | nB,be <= 2.74 :
| | | | | | | pG,be <= 1.10 : 1 (11.0/2.6)
| | | | | | | pG,be > 1.10 :
| | | | | | | | TH,be <= 309.7 : 1 (12.0/7.3)
| | | | | | | | TH,be > 309.7 : 2 (11.0/5.2)
| | | | | | | TH,be > 311.7 :
| | | | | | | | pG,be > 1.14 : 2 (70.0/2.9)
| | | | | | | | pG,be <= 1.14 :
| | | | | | | | | nA,be <= 8.35 :
| | | | | | | | | | nB,be <= 3.23 : 2 (40.0/6.3)
| | | | | | | | | | nB,be > 3.23 :
| | | | | | | | | | | TH,be <= 317.9 : 1 (5.0/2.3)
| | | | | | | | | | | TH,be > 317.9 : 2 (4.0/2.1)
| | | | | | | | | | | nA,be > 8.35 :
| | | | | | | | | | | | TH,be <= 318.9 : 1 (8.0/2.5)
| | | | | | | | | | | | TH,be > 318.9 : 2 (6.0/3.5)

```

Figure 5: The inducted decision tree

A döntési fák egyik nagy előnye, hogy a vizsgálat szempontjából fontos változókat a fa gyökeréhez, míg a kevésbé fontosokat a levelekhez közel helyezi el a fát generáló algoritmus. Korábban már láttuk, hogy a hűtővíz belépő hőmérséklete ($T^{H,be}$), illetve a reagensek betáplálásának nyomása ($p^{G,be}$) van a leginkább hatással az elfutás bekövetkezésére. Ezekkel teljes összhangban vannak a létrehozott döntési fából levonható következtetések is, ugyanis az 5. ábrán látható, hogy a fa első két csomópontjában a vizsgált változók a hűtővíz hőmérséklete, illetve a reagensek nyomása.

Az így generált fa alkalmassá válik ismeretlen minták osztályozására. Megállapítható tehát, hogy a döntési fa generálására alkalmas algoritmus használatával sikerült létrehoznunk egy egyszerű eszközt, ami a reaktor betáplálási körülményei alapján előrejelzi az elfutás bekövetkezését. Nem szabad azonban elfelejteni, hogy a módszer statisztikai jellegű, így előfordulhatnak olyan esetek, amikor az előrejelzés nem felel meg a ténylegesen bekövetkező állapotnak. Ezen kivételes esetek száma csökkenthető egyrészt a tanuló minták számának növelésével, a vizsgált bemeneti paraméter tartományok szűkítésével, illetve a fa tisztítása során a metszések számának csökkentésével. A döntési fa pontosíthatósága és tesztelhetősége érdekében a 6. ábrán látható grafikus felületet készítettük MATLAB/GUIDE-ban.

6. ábra

Döntési fa generálására és vizsgálatára készített kezelőfelület

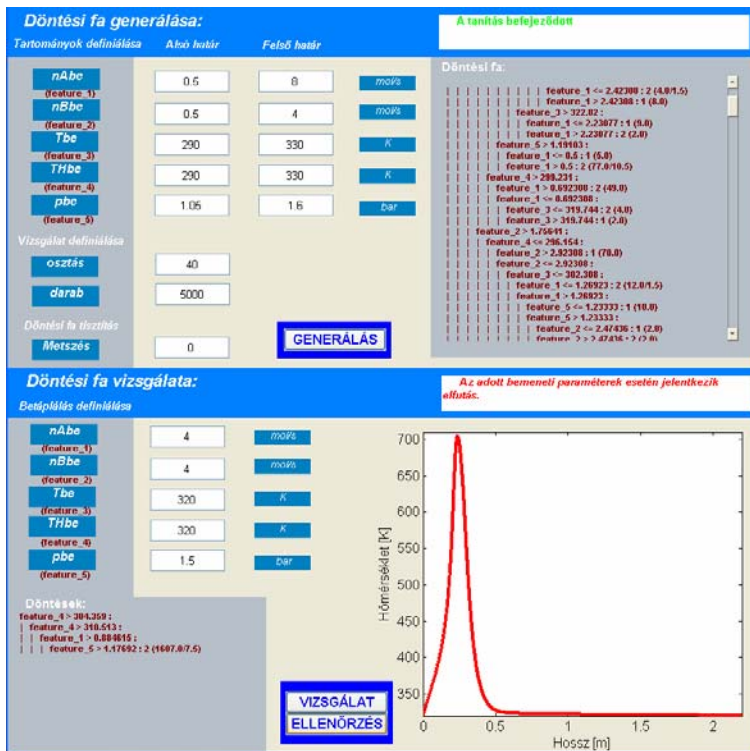


Figure 6: Graphical user interface designed to generate and validate decision trees

Az eszköz alkalmas arra, hogy a felhasználó pontosítsa a bemeneti paraméterekre vonatkozó tartományokat ezzel javítva az előrejelzés pontosságát. A felületen kijelzésre kerül a döntési fa azon része, amely alapján az algoritmus osztályozta az ismeretlen mintát.

KÖVETKEZTETÉSEK

A cikk egy elfutásra hajlamos komplex kontakt katalitikus reaktor egy részletes, reaktor elfutási vizsgálatokra alkalmas matematikai modelljét ismertette. A stationer modell stabilitás vizsgálatán alapulva egy olyan új elfutás előrejelzésére alkalmas módszer dolgoztunk ki, amellyel akár csak a reaktor betáplálási áramainak alapján is előre tudjuk jelezni a reaktorelfutás bekövetkezését. Egy olyan új technikát dolgoztunk ki, melynek alkalmazásával elhatárolhatjuk azokat az üzemeltetési tartományokat, melyeknél az elfutás jelentkezik, illetve nem jelentkezik. A javasolt megközelítésmód legnagyobb előnye, hogy a reaktor különböző jellegű működési tartományait, könnyen értelmezhető módon, nyelvi szabályok, illetve az ezeket tömörítő döntési fa segítségével definiálja. Tehát az ismertett döntési fa alapú vizsgálati technika az adatok alapján történő elemzés mellett, lehetővé teszi a rendszert leíró vegyész-mérnöki modellekből származatható információk kinyerését és értékelését is, például feltárhatja, hogy az üzemeltetés szempontjából mely változók az igazán kritikusak.

A cikk fontos üzenete, hogy a csupán részletes vegyész-mérnöki modellen alapuló analitikus technika hátránya, hogy bár a modell, mint differenciál és algebrai egyenletek halmaza értelmezhető a modellt alkotó vegyész-mérnök számára, nem ad egyértelmű, közvetlenül felhasználható információt arra vonatkozóan, hogy mely betáplálási körülményeket meghatározó bemeneti változók együttállása esetén fordul elő a reaktor elfutása. Tehát csupán a rendszer részletes modelljének ismerete alapján e technikával sem tudjuk közvetlenül, szimulációs vizsgálat és az állapotváltozók mérése nélkül megbecsülni teljes pontossággal az elfutás bekövetkezését. Az ilyen jellegű ismeretek feltárásának azonban hasznos eszköze a cikkben alkalmazott döntési fa.

KÖSZÖNETNYÍLVÁNÍTÁS

A kutatást a Vegyész-mérnöki Intézet Kooperációs Kutatási Központjának III/2 és az OTKA T049534 téma támogatta.

IRODALOMJEGYZÉK

- Abonyi, J. (2005). Adatbányászat – a hatékonysága eszköze. ComputerBooks kiadó, 12-34.
- Adler, J., Enig, J.W. (1964). The Critical Conditions in Thermal Explosion Theory with Reactant Consumption. Comb. Flame, 8. 97-1103.
- Barkelew, C. (1959). Stability of Chemical Reactors. Chem. Eng. Prog. Symp. Ser., 25. 37-46.
- Berty, J.M., Brices, J.H., Hambrick, J.O. (1968). Parametric Sensitivity and Stability of Staged Adiabatic Reactors with Luterstage Coolers. Symposium on Stability and Control of Reaction Systems: Part III, Preprint 10E, St. Louis, Missouri, Feb. 1968.
- Bilous, O., Amundson, N.R. (1956). Chemical Reactor Stability and Sensitivity II. Effect of Parameters on Sensitivity of Empty Tubular Reactors. AIChEJ., 2. 117-126.
- Boddington, T., Gray, P., Kordilewski, W., Scott, S.K. (1983). Thermal Explosions with Extensive Reactant Consumption: A New Criterion for Criticality. Proc. R. Soc., A 390. 13-30.
- Dente, M., Collona, A. (1964). Il Comportamento dei Reattori Chimici a Flusso Longitudinale nei Rigvardi della Sensitività. Chim. E Industria, 46. 752-761.

- Eissen, M., Zogg, A., Hungerbühler, K. (2003). The runaway scenario in the assessment of thermal safety: simple experimental access by means of the catalytic decomposition of H_2O_2 . *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 16. 289-296.
- Han, J., Kimber, M. (2000). *Data Mining: concepts and techniques*. Chapter 7, Morgan Kaufman, 279-334.
- Lacey, A.A. (1983). Critical Behaviour for Homogeneous Reacting Systems with Large Activation Energy. *Int. J. Eng. Sci.*, 21. 501-515.
- Madár, J. (2005). Kutatási jelentés.
- Potter, C., Baron, S. (1951). Kinetics of the catalytic formation of phosgene. *Chem. Eng. Prog.*, 47. 9. 473-480.
- Schmitz, R.A. (1975). Multiplicity, Stability and Sensitivity of States in Chemical Reacting Systems. A Review. *Adv. Chem. Ser.*, 148-156.
- Semenov, N.N. (1928). Zur Theorie des Verbrennungsprozesses, *Z. Phys.*, 48. 571-581.
- Szeifert, F., Chován, T., Nagy, L., Abonyi, J., Árva, P., Berty, J.M. (2006). Runaway of chemical reactors: parametric sensitivity and stability, publikációra előkészítve.
- Szeifert, F., Chován, T., Nagy, L., Almásy, G. (2000). Rendszermodellek-Rendszeranalízis (Process Modeling), Veszprémi Egyetemi Kiadó, 4. 18-4.21.
- van Welsenaere, R.J., Froment, G.F. (1970). Parametric Sensitivity and Runaway in Fixed Bed Catalytic Reactors. *Chemical Engineering Science*, 25. 1503-1516.

JELÖLÉSJEGYZÉK

Jelölés	Jelentés	Mértékegység	Jelölés	Jelentés	Mértékegység
α^{GH}	A katalizátorágy és a köpenytér közötti hőátzármaztatási tényező	$\frac{W}{m^2 \cdot K}$	ν_i	Sztöchiometriai együttható	-
A^{GH}	A katalizátorágy és a köpenytér közötti hőátzármaztatási felület	m^2	n_i	Anyagmennyiség áram	$\frac{mol}{s}$
B^G	Térfogati sebesség	$\frac{m^3}{s}$	p^G	Nyomás	Pa
c_p^G	A gázfázis hőkapacitása	$\frac{J}{kg \cdot K}$	r^G	Reakciósebesség	$\frac{mol}{kg \cdot s}$
$c_{1,i}; c_{2,i}; c_{3,i}$	A komponensek fajhőinek számítására szolgáló összefüggés állandói	-	R	Gázállandó	$\frac{J}{mol \cdot K}$
ΔH_r	A reakcióban felszabaduló hőmennyiség	$\frac{J}{mol}$	ρ^G	A gázfázis sűrűsége	$\frac{kg}{m^3}$
\underline{I}	Egységmátrix	-	t	Műveleti idő	s
\underline{J}	Jacobi-mátrix	-	$T^G; T^H$	A gázfázis, illetve köpenytér hőmérséklete	K
K_r	A termék keletkezésére vonatkozó egyensúlyi állandó	-	V^G	A gázfázis térfogata	m^3
λ	Jacobi-mátrix sajátértéke	-	x	Dimenziómentes hossz, $x \in [0, 1]$	-
M_i	A komponensek molekulatömege	$\frac{kg}{mol}$			

Levelezési cím (*Corresponding author*):

Varga Tamás

Pannon Egyetem, Folyamatmérnöki Intézeti Tanszék

8200, Veszprém, Egyetem út 10.

University of Pannonia, Department of Process Engineering

H-8200, Veszprém, Egyetem út 10.

Tel.: 36 88-624-447, Fax: 36 88-624-171

e-mail: vargat@fmt.uni-pannon.hu