



Szakaszos gyártócella szimulációja

Balaton M.G., Nagy L., Szeifert F.

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

ÖSSZEFOGLALÁS

A Folyamatmérnöki Intézeti Tanszék laboratóriumában működik egy 50 literes zománcozott reaktorra épülő gyártócella, melynek felújítása során új, monofluidos hűtő-fűtő rendszert alakítottunk ki. Ezen cikk célja a gyártócella monofluidos hőellátó és szakaszos reaktor részét leképező dinamikus szimulátor elkészítésének bemutatása, valamint a szimulációs szoftverben a munka során tapasztalt korlátok ismertetése. A szimulátor elkészítésekor a fizikai rendszeren végzett mérések minél jobb közelítése volt a cél. A szimulátor az AspenTech HYSYS® programján alapuló Honeywell UniSim™ Design szimulációs programmal készült.

(Kulcsszavak: : batch, monofluid, UniSim design, reaktor szimulátor)

ABSTRACT

Simulation of a batch unit

M.G. Balaton, L. Nagy, F. Szeifert

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

In the Department of Process Engineering University of Pannonia (Hungary) a 50 liter stirred batch reactor with a monofluid jacket heating-cooling including three temperatures can be found. The aim of this paper to present the process creating the dynamic simulator of the jacketed batch reactor and its monofluid termoblock. The limits of the simulation software experienced during our work are also presented. The objective of our project is to create a simulator that produces nearly the same measured values as the real system. The simulator was created with the AspenTech HYSYS® based UniSim™ Design (Honeywell).

(Keywords: batch, monofluid, UniSim Design, dynamic, reactor simulator)

BEVEZETÉS

A vegyipar egyes területein, ahol a nagy folyamatos technológiákhoz képest sokféle és kis mennyiségű terméket állítanak elő, túlnyomórészt szakaszos technológiákat alkalmaznak, mint például a gyógyszeriparban (Molnár és Nagy, 1991), finomvegyszer gyártásban, stb.. Ezen technológiák esetében nagyon fontos a receptben előírt hőmérsékletek pontos tartása, és a reaktorban egyenletes hőmérséklet eloszlás biztosítása. Szakaszos technológiák esetében a reaktorok köpenyen keresztüli hűtése illetve fűtése sokféleképpen megvalósítható. Az iparban még mindig a legelterjedtebb a változó közegű, azaz multifluid köpeny hűtés-fűtés (több mint 90%), amely esetében két vagy három különböző közeg végzi a hűtést illetve a fűtést (CHINOIN Gyógyszer és Vegyszeti Termékek Gyára Rt., 1995; Louleh, 1996; Louleh, 1999). Ebben az esetben a szabályozás feladata a megfelelő közeg és annak a mennyiségének beállítása.

A szakaszos technológiai rendszert alkalmazó üzemek egyre inkább áttérnek a multipurpose, azaz többcélú üzemek építésére. Ha több reaktor van egymás környezetében, akkor gazdaságosabb egy központi hő ellátó rendszert megépíteni.

Egy másik megoldás az új monofluidos köpeny hűtés-fűtés, amelynél azonos, de különböző hőmérsékletű közegekkel lehet végezni a reaktor köpenyének hőmérséklet-szabályozását. Ebben az esetben mind a fűtés, mind a hűtés is közvetlen (direkt), és a rendszer egy közeget tartalmaz (ezért monofluid), de különböző hőmérsékleten, amelyeknek az előállítása a reaktor környezetében történik, tehát nem külső hálózatról érkezik a hőenergia. A megfelelő hőközlő folyadék megválasztása esetén a hőmérséklet-tartomány akár $-30 - 360\text{ }^{\circ}\text{C}$ is lehet.

A monofluidos köpeny hűtés-fűtés előnyei közé tartozik, hogy egyenletes hőmérséklet eloszlást lehet biztosítani a köpenyben, így elkerülhetőek a nem kívánt mellékreakciók és a reaktorelfutás. A legtöbb esetben a köpeny egy recirkulációs körrel rendelkezik, aminek következményeként egyenletes a hőmérséklet változása is, azaz nem jelentkeznek hősokk illetve lokális túlmelegedési (hot spot) problémák. A monofluidos rendszer emellett gyors reagálását és kisebb a karbantartási igénye, mivel azonos közegek esetén kevesebb korróziós termék keletkezik, mint például gőz és hűtővíz esetén.

A 1. ábrán a tanszéki rendszerrel megegyező köpenykapcsolást lehet látni, amely három különböző hőmérsékletű közeget tartalmaz.

1. ábra

Monofluidos hűtő-fűtő rendszer

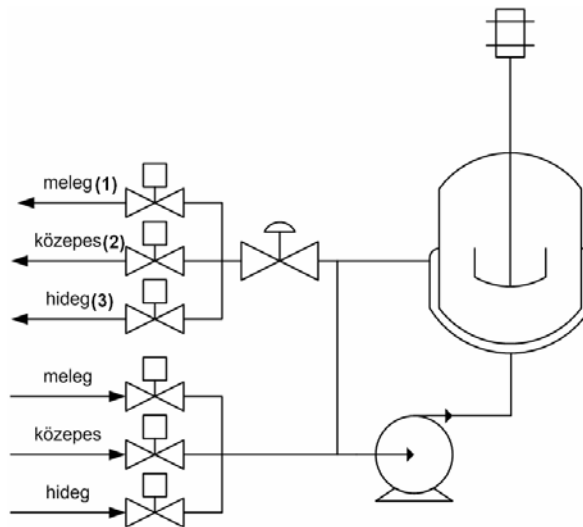


Figure 1: Monofluid heating-cooling system

High temperature level(1), Medium temperature level(2), Low temperature level(3)

A 2. ábrán látható a tanszéken működő monofluidos köpeny hűtés-fűtés, amely három különböző hőmérséklet előállítására alkalmas körrel rendelkezik. Egyszerre csak egy tartály folyadékát vezethetjük a köpenybe, amit gömbcsapokkal lehet megválasztani. Ha

a kilépő oldalon a köpenyből távozó folyadékot a hőmérsékletéhez a legközelebb eső tartályba vezethetjük vissza, akkor így csökkenthetjük a tartályok hőmérsékleteinek nem kívánt változásait, illetve gazdaságosabbá tehető a rendszer.

2. ábra

Szakaszos reaktor és a monofluidos termoblokk

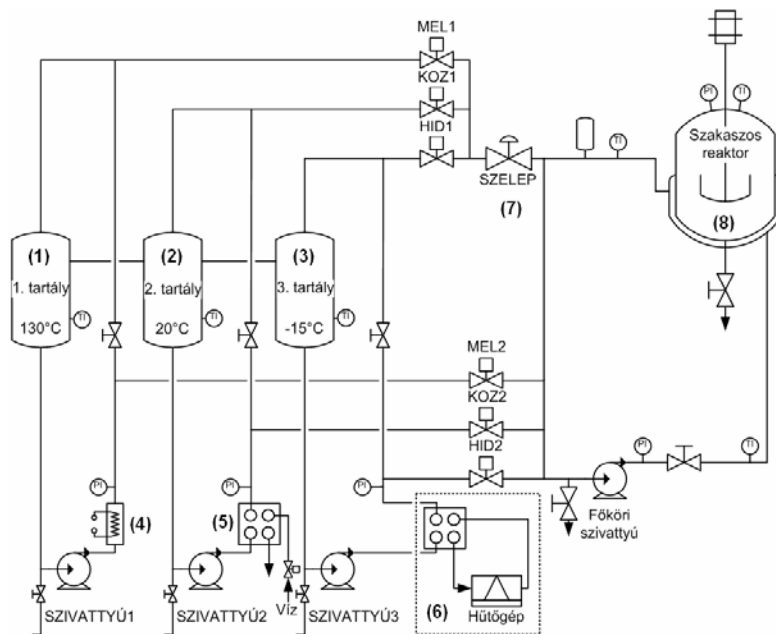


Figure 2: The batch reactor and the monofluid thermoblock

High temperature level puffer tank(1), Medium temperature level puffer tank(2), Low temperature level puffer tank(3), Electric heater(4), Tap water cooled heat exchanger(5), Refrigerator(6), Control valve(7), Batch reactor(8)

ANYAG ÉS MÓDSZER

Az UniSim™ Design szimulációs program az AspenTech HYSYS® programjának továbbfejlesztésével jött létre, és 2005-ben adta ki az első szériát a Honeywell. A programcsomag stacioner és dinamikus szimulációt is egyaránt lehetővé tesz. A program segítséget nyújthat tervezési, üzemeltetési és optimalizálási feladatok megoldásában, illetve a vegyipar különböző területein a beruházások gazdaságosságának vizsgálatakor.

A vegyipari üzemek ritkán működnek stacioner üzemben, ami a külső és belső zavarásoknak együttes következménye, mint például a környezeti hatások, hőcserélők elkoszolódása, katalizátor aktivitáscsökkenés, stb. Ebből kifolyóan a kémiai technológiai objektumok tranziens állapotainak vizsgálatára dinamikus szimulációs eszközökre van szükség, mint amilyen az UniSim™ Design programcsomag is (Edwards, 2001).

A szimuláció alapját differenciál egyenletek diszkrét időintervallumokban történő numerikus megoldása adja. Minél kisebbek az időintervallumok, annál közelebb kerülünk

az analitikus megoldáshoz, viszont ez növeli a számításhoz szükséges időt. Az UniSim™ Design koncentrált paraméterű modelleket használ, mivel az osztott paraméterű modellek megoldásához több idő és számítási igény szükséges. A tulajdonságok hely szerinti változását más módon számolja, a térfogattal rendelkező egységeket több kisebb részre osztja, és az egyes hold up-ok modelljeit koncentrált paraméterűként megoldva a teljes egységre megkapjuk az adott tulajdonság hely szerinti változását.

Az UniSim™ Design dinamikus megoldója szimultán és nyomásvezérelt. Alapvetően kétféle modellt különböztetünk meg, az ellenálláson és a térfogatmérlegen alapulókat. Az ellenálláson alapuló esetében egy összefüggés határozza meg a nyomás hold up-ok ki- és belépő áramainak nyomásviszonyait. A második típusú modellek esetében a térfogatmérleg határozza meg a nyomás hold up-ok ki- és belépő áramainak mennyiségét.

„Egy modell, számos felhasználás”. Ez azt jelenti, hogy az adott eljárásról elég egy modellt létrehozni, amit a tervezés különböző fázisain fel lehet használni. Tervezési fázis alatt segítséget nyújthat a tervezés elvi kérdéseiben, a tényleges eljárásstervezésben, részletes mérnöki tervezésben és végül a működőképességi vizsgálatokban. A technológia felépítése után ugyanazt a modellt fel lehet használni az üzemeltetés hatékonyságának növelésére, az operátorok tréningjére, biztonságtechnikai vizsgálatokra és a technológia optimalizálásra. Mindemellett az UniSim™ Design megfelelő környezetet biztosíthat a vegyipar különböző területein jelentkező modellezési feladatok esetében is.

EREDMÉNY ÉS ÉRTÉKELÉS

A vegyiparban már bevált szokás meglévő technológiák leképzése szimulációs programokkal, azzal a céllal, hogy operátorok betanítását végezzék, üzemzavarok elhárítását, az üzem indítását, leállítását gyakorolják (OTS – Operator Training Simulation), a valós rendszeren nehezen kivitelezhető mérést, üzemeltetési módot próbáljanak ki (biztonságtechnika), illetve a telepítés előtt új szabályozókat, szabályozási struktúrákat teszteljenek. A tanszéken is hasonló céllal készül a szakaszos gyártócella dinamikus szimulátora, mivel így lehetőség nyílik a valós rendszertől függetlenül szabályozási struktúrák tesztelésére, illetve az OTS-ekhez hasonlóan, hallgatói laborok során oktatási célra is fel lehet használni az elkészült szimulátort. A szimulátor folyamatirányító szoftverekkel OPC (OLE for process control) kapcsolaton keresztül történő összekötéshez az UniSim™ Design helyett a célnak megfelelő UniSim™ Operations programcsomag szükséges.

A különböző reaktormegoldások bemutatása

A vegyiparban eddig elsősorban folyamatos technológiák szimulátorát készítették el. Szakaszos technológiák dinamikus leképzése esetén a szimulációs programok korlátokkal rendelkeznek. Ilyen korlátba ütköztünk a köpenyes reaktor esetén is, mivel az UniSim™ Design programban nincs pontosan erre a célra alkalmazható modell. Ezért közelítő megoldást kellett alkalmaznunk.

Az UniSim™ Design beépített modelljeivel a szakaszos gyártócella folyamatos, monofluidos része problémák nélkül létrehozható volt. A valós rendszer összes rendelkezésre álló adatát figyelembe véve készítettük el a szimulátort. A teljes rendszer, azaz a reaktor és a monofluidos köpeny hűtés-fűtés egyszerűsített PFD ábrája a 3. ábrán látható.

1. megoldás: Benyúló csőköteges szeparátor

Első megoldásként a köpenyes reaktort az UniSim™ Design egyik beépített modelljének átalakításával, a benyúló csőköteges szeparátorral közelítettem. A reaktor oldalt modellezi

a szeparátor, a köpeny oldalt pedig a benyúló csőköteg. A szeparátor lehetőséget ad reakció megadására is, de ez nem feltétel, tehát a tökéletesen kevert reaktorral szemben ezzel a modellel végezhetőek hőtani vizsgálatok reakció megadása nélkül is.

A benyúló csőköteg azért közelíti jól a reaktor köpenyét, mert a modell nem tartalmaz olyan paramétert, ami egyértelműen definiálná a hőátadó szerkezet alakját. Tehát ezzel a modellel köpeny is definiálható.

A megadható paraméterek a csőköteg esetén a következők:

- térfogat,
- hőátadási tényező a fal mindkét oldalára, folyadékra és gőzre egyaránt,
- hőátadási felület,
- a hőátadó felület magassága,
- a fal tömege,
- a fal fajhője,
- a fal anyagára jellemző faktor.

A reaktorkialakítás PFD ábrája a 4. ábrán látható, ahol megfigyelhető a reaktor mellett a köpenyhez tartozó recirkulációs kör is. A kört alkotó csőszakaszok modellezésére is szükség volt, mivel összterfogatuk összemérhető a köpeny térfogatával.

3. ábra

A monofluidos termoblokk és a reaktor egyszerűsített PFD ábrája

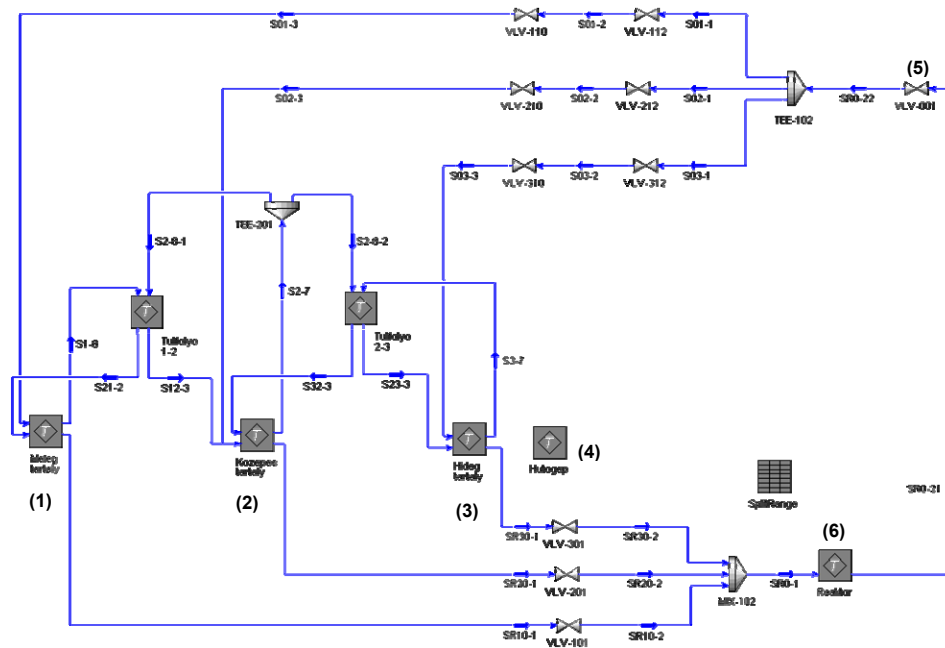


Figure 3: The simplified flowsheet of the batch reactor and the monofluid thermoblock in UniSim™ Design

High temperature loop(1), Medium temperature loop(2), Low temperature loop(3)
Refrigerator(4), Control valve(5), Batch reactor(6)

4. ábra

A benyúló csőköteges reaktorkialakítás

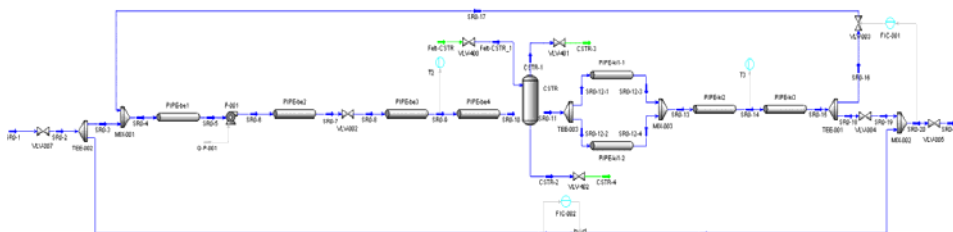


Figure 4: The reactor configuration using the separator with tube bundle module

Ezzel a reaktorkialakítással végzett szimuláció eredményét az 5. ábrán lehet látni. A szimuláció célja, hogy szimulátor paramétereinek állításával minél jobban meg tudjam közelíteni a valós rendszeren végzett mérés eredményeit. Jól látható, hogy ez a modell a felmelegítési szakaszon jól követi a reaktor hőmérsékletét, viszont a hűtési szakaszon nagyon pontatlan.

2. megoldás: Reaktor és hőcserélő kombinációja

A köpenyes reaktort egy tökéletesen kevert üstreaktorral és egy 1-1 átfutású hőcserélővel (köpeny) helyettesítettük, ahol a tökéletesen kevert üstreaktor falon átadott hő a hőcserélő csőoldali hőáramával tettük egyenlővé. A hőcserélő csőoldali anyagáramának belépő hőmérsékletét minden pillanatban a tökéletesen kevert reaktor pillanatnyi hőmérsékletével írtuk felül. A csőoldalon áramló közeg tömegáramát a keverő fordulatszámának függvényében változtattuk (Balaton, 2009). Az összekötést az UniSim™ Design egy rugalmas moduljával végeztük („Spreadsheet”), amely lehetőséget biztosít a szimulátorban szereplő bármelyik változó beolvasására, valamint a felhasználó által módosítható változók írására. Felülete nagyban hasonlít a Microsoft Excel felépítéséhez, alaphelyzetben négyszer tíz cellából áll, amelyek között cellahivatkozásokkal számítások végezhetőek. Lehetőség van a könnyebb áttekinthetőség szempontjából a változók mértékegységeinek megadására is. Az UniSim™ Design kezelőfelületét a 6. ábrán lehet látni, ahol a bal felső részben a „Spreadsheet” modul, a bal alsó részbe egy modell paraméterezésének ablaka, jobb oldalt a rendelkezésre álló modellek eszköztára, valamint a háttérben a PFD részlete található.

Első megközelítésre egy egyszerű egyenletet használtunk az átadott hő számítására, amely megegyezik a program beépített hőcserélőmodelljével, amely esetén a hőátzármaztatási tényező megadásával, a logaritmikus átlagos hőmérséklet, illetve a töltettömeg és a köpenybe be- és kilépő folyadékáramok mennyiségének felhasználásával számítható az átszármaztatott hő. Dinamikus szimulátorról lévén szó, még figyelembe vettük, hogy a térfogatáram változásával a hőátzármaztatási tényező is változik, tehát ezt a változót egy referencia térfogatáram segítségével normáljuk. Ezzel a reaktorkialakítással végzett szimuláció eredményei a 8. ábrán láthatóak, ahol a valós rendszeren végzett nyitott körű mérésnek megfelelően működött a szimulátor is. Ezen megoldás PFD ábráját a 7. ábrán láthatjuk. A mérés során a három különböző hőmérsékletű közegből csak kettőt használtunk, mégpedig a közepes (20 °C) és a meleg közeg (90 °C).

5. ábra

A benyúló csőköteges reaktorkialakítás esetében a szimuláció és a valós rendszeren végzett mérés eredménye

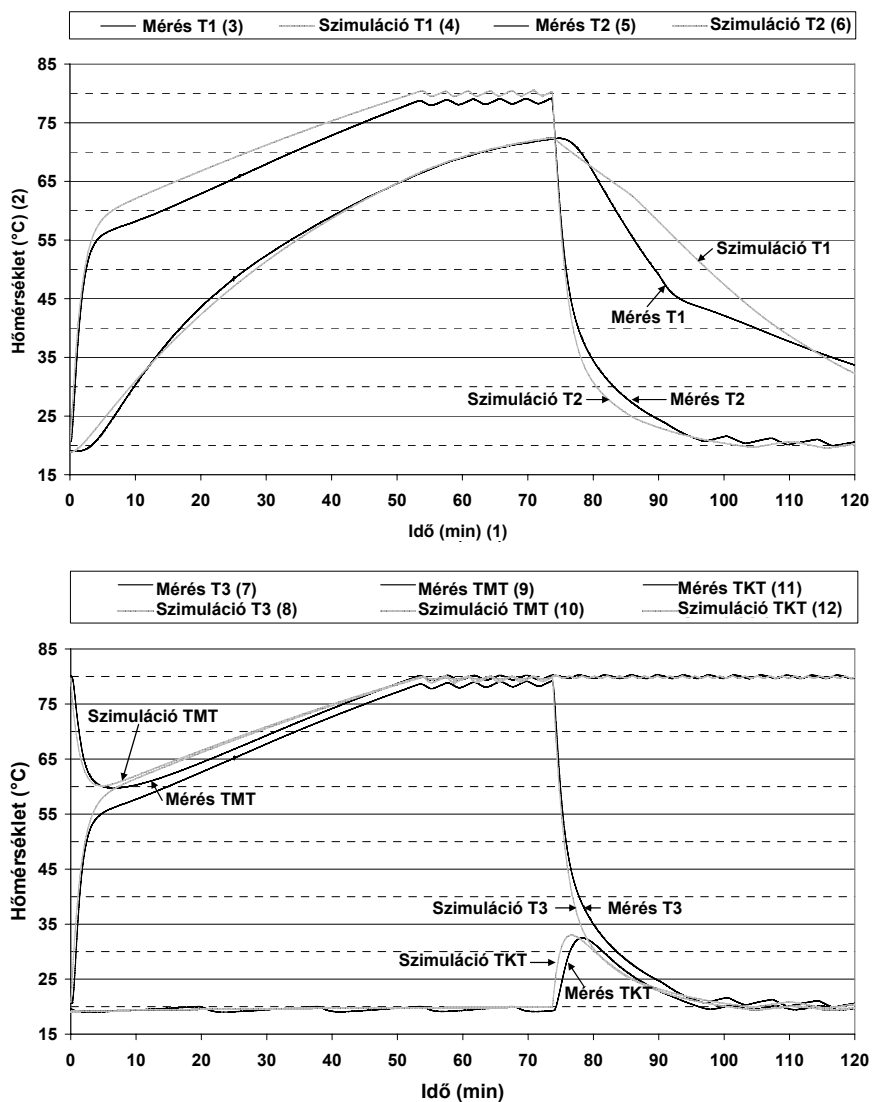


Figure 5: The test measurement and simulation results in the case of the reactor configuration containing the separator with tube bundle module

Time (min)(1), Temperature (°C)(2), Test measurement reactor temperature (T1)(3), Simulation T1(4), Test measurement jacket inlet temperature (T2)(5), Simulation T2(6), Test measurement jacket outlet temperature (T3)(7), Simulation T3(8), Test measurement high temperature level (TMT)(9), Simulation TMT(10), Test measurement medium temperature level (TKT)(11), Simulation TKT(12)

6. ábra

A program kezelőfelülete

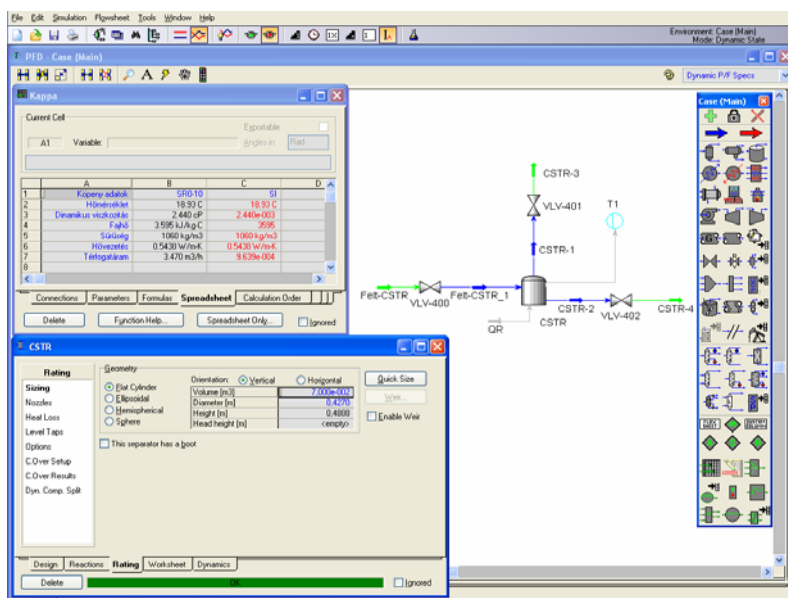


Figure 6: The user interface of the simulation software

7. ábra

A reaktorrész PFD ábrája az összekapcsolt kialakítás esetén

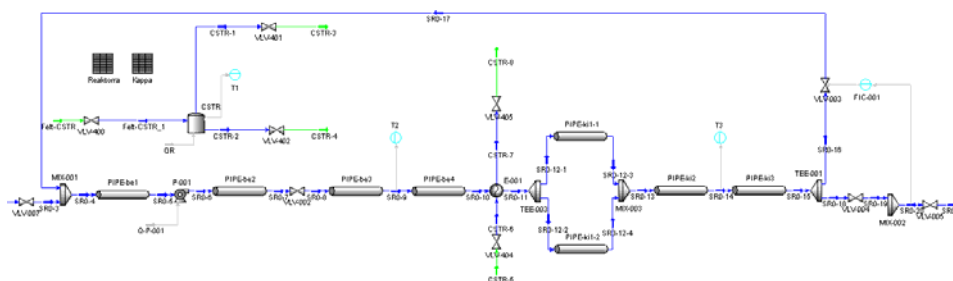


Figure 7: The flowsheet of the reactor and the jacket recirculation loop in the case of the custom reactor configuration

A diagrammon jól látható, hogy tendenciájában mindegyik hőmérséklet megfelelően követi a mérés eredményét, viszont a reaktor hőmérséklete a hűtési szakasz végén növekvő hibát tartalmaz, ahol az eltérés már nagyobb, mint 6 °C, viszont a felmelegítési szakasz esetén a hiba mindvégig 0,5 °C alatt marad. Ez annak a következménye, hogy a modell nem veszi figyelembe a viszkozitás hőmérsékletfüggését, ami hatással van a hőátzármaztatási tényezőre is. Ezért a reaktorhőmérséklet csak a felmelegítési szakaszon követi jól a mérési eredményt, mivel a szimulátor paraméterei elsődlegesen erre a szakaszra lettek beállítva.

8. ábra

Mérési és szimulációs eredmények az egyszerű modell esetén

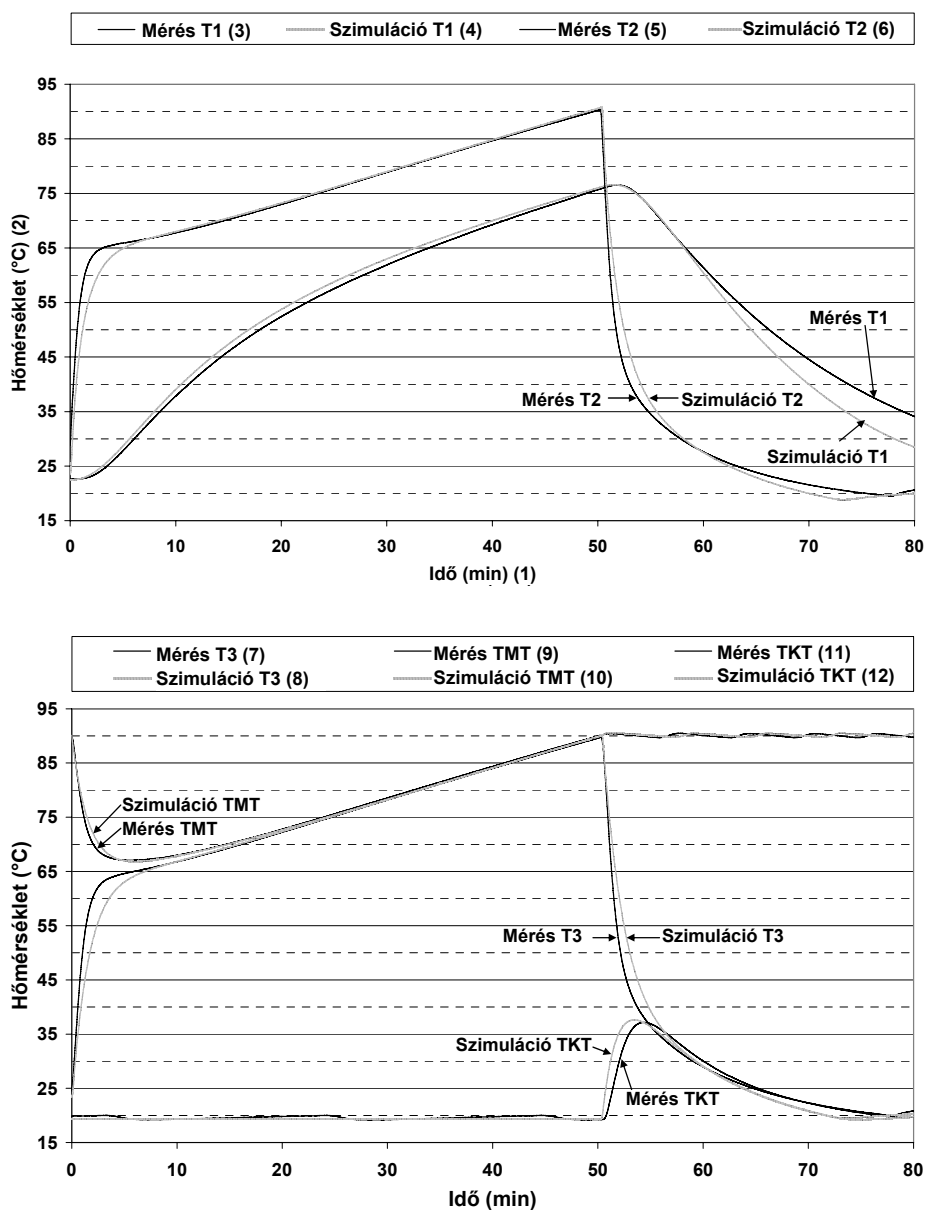


Figure 8: The test measurement and simulation results in the case of the custom reactor configuration containing the simple heat transfer model

See Figure 5

A felhasznált egyenletek:

Az átszármaztatott hő mennyisége:

$$Q = \kappa A \Delta T_{LM} F_t \quad (1)$$

A dinamikus számításokhoz szükséges korrekciós faktor:

$$F_T = \frac{2f_1 f_2}{f_1 + f_2} \quad (2)$$

$$f_1 = \left(\frac{M_{cs}}{M_{cs,ref}} \right)^{0,8} \quad (3)$$

$$f_2 = \left(\frac{M_k}{M_{k,ref}} \right)^{0,8} \quad (4)$$

Az egyszerű modell hiányossága miatt egy összetettebb reaktormodellt hoztunk létre, amely már figyelembe veszi a viszkozitás hőmérsékletfüggését, és dinamikusán számolja a reaktor méretei, szerkezeti anyagai, közegetulajdonságok, lineáris áramlási sebességek illetve a keverő figyelembevételével a hőátzármaztatási tényező értékét. Így egy dinamikus változót alkalmazunk konstans helyett. A reaktor belső tere esetén a Chilton-Cummings-West összefüggést, a reaktor köpenyénél a Sieder-Tate összefüggést vettük figyelembe. A 9. ábrán látható, hogy az összetett modellnek köszönhetően a reaktor hőmérséklete mind a felmelegítési, mind a hűtési szakaszon jól közelíti a mérés eredményét (~1 °C).

A felhasznált egyenletek:

Hőátzármaztatási tényező:

$$\kappa = \frac{1}{\frac{1}{\alpha_{reaktor}} + \frac{1}{\alpha_{köpeny}} + \frac{\delta_{fal}}{\lambda_{fal}} + \frac{\delta_{zománc}}{\lambda_{zománc}}} \quad (5)$$

Hőátadási tényező reaktor oldalon:

$$\alpha_{reaktor} = Nu \cdot \frac{\lambda}{D_{belső}} \quad (6)$$

Nusselt szám a reaktor oldalon (Chilton összefüggés):

$$Nu = C \cdot Re^{2/3} \cdot Pr^{1/3} \cdot \left(\frac{\mu}{\mu_{fal}} \right)^{0,14} \quad (7)$$

Hőátadási tényező a köpenyoldalon:

$$\alpha_{köpeny} = Nu \frac{\lambda}{d_h} \quad (8)$$

Egyenértékű átmérő a köpeny esetén:

$$d_h = \frac{4 \cdot f}{U} \quad (9)$$

Nusselt szám a köpeny oldalon (Sieder-Tate összefüggés):

$$Nu = 0,023 \cdot Re^{4/5} \cdot Pr^{1/3} \cdot \left(\frac{\mu}{\mu_{fal}} \right)^{0,14} \quad (10)$$

9. ábra

Mérési és szimulációs eredmények az összetett modell esetén

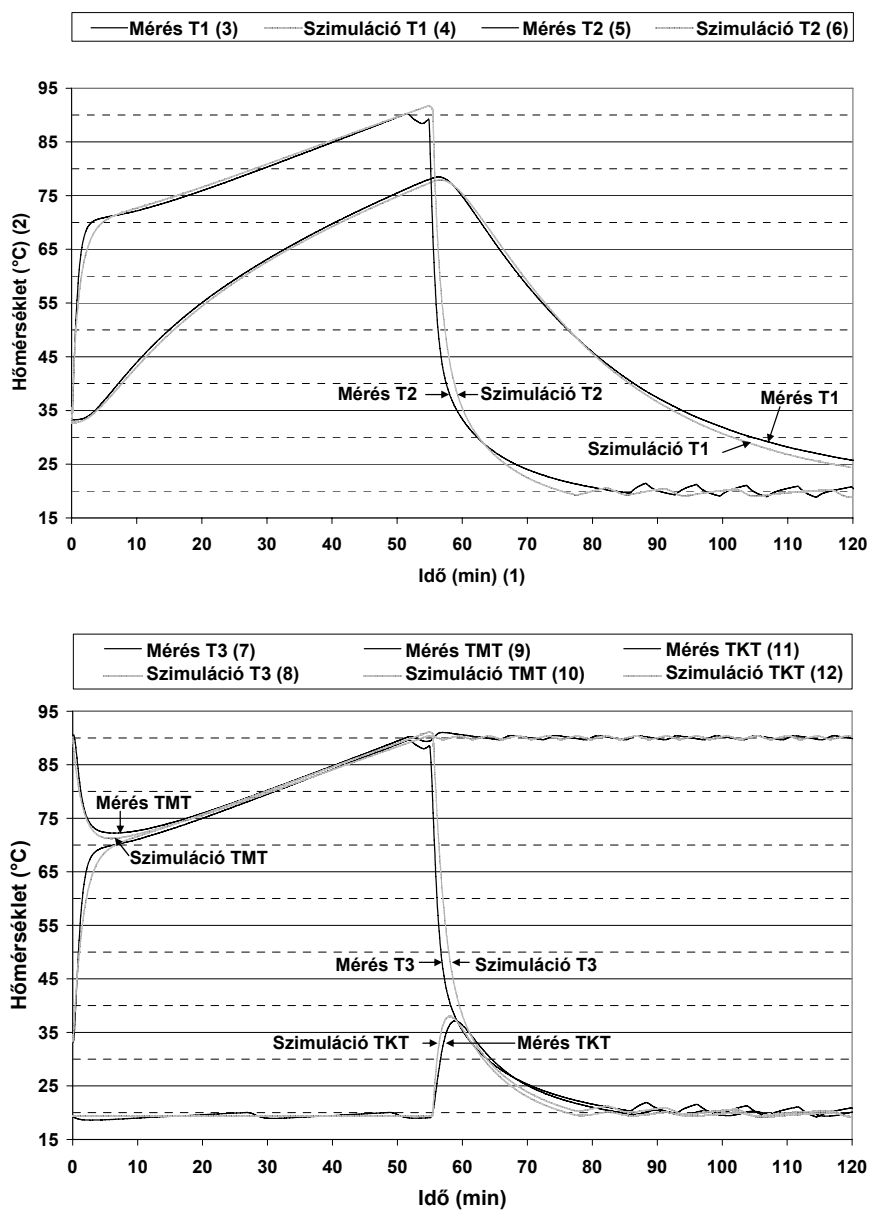


Figure 9: The test measurement and simulation results in the case of the custom reactor configuration containing the complex heat transfer model

See Figure 5

KÖVETKEZTETÉSEK

A munkák során létrehoztunk egy olyan szimulátort, amely nagymértékben megközelíti a valós rendszer működését. Későbbiekben ezt a szimulátort felhasználva, OPC kapcsolaton keresztül a valós folyamatirányító rendszerrel összekötve létrehozható egy OTS rendszer, aminek a segítségével a szabályozási algoritmusok gyorsabban és költséghatékonyabban tesztelhetők, illetve hallgatói laborok során is felhasználható.

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Köszönetet mondunk a TÁMOP-4.2.2-08/1/2008-0018 (Élhetőbb környezet, egészségesebb ember - Bioinnováció és zöldtechnológiák kutatása a Pannon Egyetemen, MK/2) projekt anyagi támogatásáért.

A jelen cikk a TÁMOP-4.2.1/B-09/1/KONV-2010-0003 projekt keretében készült. A projekt a Magyar Állam és az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósult meg.

JELÖLÉSJEGYZÉK

Jelölés	Jelentés	Mértékegység
α	Hőátadási tényező	$\frac{W}{m^2 \cdot K}$
δ	Vastagság	m
κ	Átlagos hőátadási tényező	$\frac{W}{m^2 \cdot K}$
λ	Hővezetési tényező	$\frac{W}{m \cdot K}$
μ	A reaktorban lévő közeg dinamikus viszkozitása	$Pa \cdot s$
μ_{fal}	A reaktorban lévő közeg dinamikus viszkozitása a fal hőmérsékletén	$Pa \cdot s$
A	Hőátadási felület	m^2
C	Konstans	1
$D_{belső}$	A reaktor belső átmérője	m
d_h	Egyenértékű átmérő	m
f	Áramlási keresztmetszet	m^2
F_T	LMTD korrekciós faktor	1
M_{cs}	Csőoldali tömegáram (reaktoroldal)	$\frac{kg}{s}$
$M_{cs, ref}$	Csőoldali referencia tömegáram (reaktoroldal)	$\frac{kg}{s}$
M_k	Köpenyoldali tömegáram	$\frac{kg}{s}$
$M_{k, ref}$	Köpenyoldali referencia tömegáram	$\frac{kg}{s}$
Nu	Nusselt-szám	1
Pr	Prandtl-szám	1
Q	Hőmennyiség	J
Re	Reynolds-szám	1

$T1$	A reaktor hőmérséklete	$^{\circ}C$
$T2$	A reaktor recirkulációs körének belépő oldali hőmérséklete	$^{\circ}C$
$T3$	A reaktor recirkulációs körének kilépő oldali hőmérséklete	$^{\circ}C$
TKT	A közepes hőmérsékletű tartály hőmérséklete	$^{\circ}C$
ΔT_{LM}	logaritmikus hőmérsékletkülönbség	K
TMT	A magas hőmérsékletű tartály hőmérséklete	$^{\circ}C$
U	A „nedvesített” terület	m

IRODALOMJEGYZÉK

- Balaton M.G., Nagy L. (2009): Szakaszos gyártócella szimulációja. Műszaki kémiai napok, Veszprém, 117-122 p.
- CHINOIN Gyógyszer és Vegyészeti Termékek Gyára Rt. (1995): Berendezés hőközlési műveletek végrehajtására. Szabadalom, Lajstromszám: 211223.
- Edwards J. E. (2001): Dynamic modelling of batch reactors & batch distillation. Batch Reactor Systems Technology Symposium, Teesside.
- Louleh, Z., Cabassud, M., Le Lann, M.V., Chamayou, A., Casamatta, G. (1996): A new heating-cooling system to improve controllability of batch reactors. In: Chemical Engineering Science, 51. 11. 3163-3168. p.
- Louleh, Z., Cabassud, M., Le Lann, M.V. (1999): A new strategy for temperature control of batch reactors: experimental application. In: Chemical Engineering Journal, 75. 11-20 p.
- Molnár F., Nagy T. (1991): Rugalmas gyógyszergyári autokláv vezérlés Honeywell Micro TDC 3000 folyamatirányító géppel. In: Mérés és Automatika. 39. 225-228. p.

Levelezési cím (*Corresponding author*):

Balaton Miklós Gábor

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

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

Tel.: 36-88-624-295, Fax: 36-88-624-171

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