

Universitatea Națională de Știință și Tehnologie POLITEHNICA București

Proiectarea, Evaluarea Economică și Controlul Procesului de Metateză a Olefinelor

Rezumat

Autor:

Dipl. Eng. Andrei Maxim Andrei

Îndrumător:

Prof. Dr. Eng. Costin Sorin Bildea

București
2024

Cuprins

1. Introducere	5
1.1. Motivație	5
2. Prezentare teză	6
3. Tehnologii de producție a propilenei.	7
3.1. Introducere	8
3.2. Tehnologii industriale	10
3.2.1. Produs secundar rezultat din piroliza	10
3.2.2. Produs secundar rezultat din FCC	10
3.2.3. Tehnologii de producere a propilenei.....	11
3.2.4. Concluzii	24
3.2.5. Referințe	25
4. Dinamică și Controlul Proceselor	26
4.1. Introducere	27
4.2. Dinamica Proceselor	28
4.2.1. Modele bazate pe principii fundamentale	28
4.3. Modele liniare	30
4.3.1. Liniarizarea.....	30
4.3.2. Scalarea	32
4.4. Proprietăți ale sistemelor liniare.....	33
4.4.1. Stabilitate	33
4.4.2. Controlabilitatea stării	33
4.4.3. Observabilitatea stării	34
4.4.4. Realizabilitatea sistemelor liniare	35
4.4.5. Reducerea modelului	35
4.5. Modele liniare obținute prin identificare	37
4.5.1. Caracteristicile procesului	38
4.5.2. Modele în timp discret.....	42
4.5.3. Estimarea offline	46
4.5.4. Estimarea online	48

4.6. Controlul procesului	49
4.7. Strategii de control convenționale	51
4.7.1. Reglare după abatere - Feedback.....	52
4.7.2. Reglare înainte de abatere - Feedforward	53
4.7.3. Controlul de tip Cascadă	53
4.7.4. Controlul rației	55
4.7.5. Controlul Override (de suprascriere)	56
4.7.6. Controlul selectiv	57
4.8. Algoritmi de control cu feedback.....	58
4.8.1. Proporțional.....	59
4.8.2. Proporțional-integral	60
4.8.3. Acordarea	61
4.9. Controlul predictiv bazat pe model	64
4.9.1. Strategie de control predictiv de model	66
4.9.2. Calculații pentru Controlul Predictiv de Model	68
4.9.3. MPC pentru sistem SISO	71
4.9.4. Predicția variabilelor de stare și ieșire.....	73
4.9.5. Optimizarea	74
4.9.6. MPC pentru sistemul MIMO	75
4.9.7. Parametrii de proiectare ale MPC-ului	77
4.9.8. Implementarea MPC-ului.....	78
4.10. Controlul convențional și MPC aplicat la o coloană de benzen-toluen	81
4.10.1. Procesul studiat	82
4.10.2. Proiectarea în regim staționar	82
4.10.3. Dinamica și controlul procesului.....	84
4.10.4. Control combinat feedforward/feedback.....	86
4.10.5. Control predictiv aplicat la coloana de distilare benzen-toluen	88
4.10.6. Rezultate.....	97
4.10.7. Evaluarea performanței între controlul convențional și MPC	102
4.11. Concluzii	106
4.12. Referințe	107

Anexa 1. Model liniar al coloanei benzen-toluen realizat în Aspen Dynamics	109
Anexa 2. Model liniar al coloanei de benzen-toluen realizat prin identificare	111
5. Proiectarea instalației de metateză a 2-butenei	116
5.1. Proiectare conceptuală a instalației de metateză a 2-butenei	117
5.1.1. Introducere	117
5.1.2. Caracterizarea materiei prime	117
5.1.3. Chimia procesului	118
5.1.4. Cinetica.....	119
5.1.5. Termodinamica.....	120
5.1.6. Identificarea alternativelor de schemă de flux	121
5.1.7. Evaluarea economică a alternativelor de proces	124
5.1.8. Rezultatele evaluării economice a alternativelor de schemă de flux	127
5.1.9. Detalii ale schemei de flux Reacție - Separare.....	132
5.2. Optimizarea economica a instalației	136
5.2.1. Optimizarea secției de preîncălzire	136
5.2.2. Optimizarea secției de separare.....	138
5.3. Concluzii	146
5.4. Referințe.....	147
Anexa 3. Ecuatii economice	149
Anexa 4. Aspen FORTRAN pentru evaluarea Potențialului Economic EP	151
Anexa 5. Subrutina Aspen FORTRAN pentru secțiunea de preîncălzire	156
Anexa 6. Subrutina Aspen FORTRAN pentru secțiunea de separare	157
6. Controlul procesului de metateză a 2-butenei	158
6.1. Controlul procesului convențional	159
6.1.1. Descrierea structurii de control	159
6.1.2. Acordarea buclelor de reglare	160
6.1.3. Răspunsul dinamic pe întreaga instalație	163
6.2. Controlul predictiv bazat pe model	169
6.2.1. Descrierea modelului liniar predictiv bazat pe model (LMPC)	169
6.2.2. Proiectarea și acordarea LMPC	170
6.2.3. Performanța răspunsului dinamic pe întreaga instalație	171

6.3. Concluzii	177
6.4. Referințe	178
Anexa 7. Modelul liniar al metatezei 2-butenei obținut prin identificare	180
7. Concluzii	183
7.1. Proiectarea instalației de metateză a olefinelor	184
7.2. Controlul pe întreaga instalație de metateză a 2-butenei	185
7.3. Provocări, recomandări și blocaje	186
7.4. Sfaturi pentru cercetări ulterioare și recomandări	187
Lucrări publicate	188
Cuvinte cheie: dinamica si controlul procesului, metateza olefinelor, controlul predictiv bazat pe model	

Introducere

Motivație

Piața actuală a etilenei și propilenei înregistrează o creștere continuă de la an la an. Mai multe tehnologii sunt necesare pentru a face față cererii ridicate, în adăugire la tehnologiile deja existente (piroliza și cracarea catalitică în strat fluidizat), unde olefinele ușoare sunt obținute ca un produs adiacent. O alternativă atractivă pentru producția intenționată de olefine ușoare este procesul de metateză a olefinelor. Metateza 2-butenei este un proces inovator pentru a converti produsele secundare cu valoare redusă ale cracării catalitice fluidizate (FCC) în produse mai atractive, cum ar fi propilena și etilena. Prin urmare, prima parte a tezei este dedicată prezentării proiectării, optimizării economice și controlului convențional al instalației de metateză a 2-butenei.

Provocările imprevizibile ale pieței pentru obținerea consecventă a unei calități înalte a produselor, utilizarea mai eficientă a energiei, reducerea emisiilor de gaze cu efect de seră și o creștere a adoptării unei economii circulare impun cerințe tot mai mari asupra sistemelor de control decât pot fi îndeplinite doar prin tehnici convenționale. Implementarea tehnicilor avansate de control a proceselor în industriile chimice și petrochimice, cum ar fi controlul predictiv al modelului liniar (LMPC), oferă o modalitate atractivă și eficientă de a aborda problemele în sistemele de control multivariable prin includerea modelului procesului în calculul acțiunilor de control. Cu toate acestea, literatura publicată despre aplicarea unui astfel de model (LMPC) pe întreaga instalație este limitată. Adesea, controlul predictiv bazat pe modelul liniar (LMPC) este implementat exclusiv pe echipamente individuale (de exemplu, reactor, coloană de distilare) și nu pe o întreagă instalație.

Prin urmare, obiectivul celei de-a doua părți a acestei teze este să abordeze provocările și beneficiile implementării controlerului predictiv (LMPC) în scopul de a controla întreaga instalație de metateză. Performanța controlerului convențional și a celui predictiv aplicat instalației de metateză a 2-butenei este evaluată pentru a reflecta beneficiile, precum și provocările identificate în timpul acestui studiu.

Prezentarea tezei

Teza este compusă din șase capitole.

Capitolul 1 prezintă motivația tezei actuale legată de proiectarea conceptuală, optimizarea economică și controlul convențional și predictiv al instalației de metateză a olefinelor.

Capitolul 2 descrie pe scurt literatura de specialitate și aplicațiile industriale existente pentru producția de propilenă, fie ca un produs adiacent - dominant în prezent pe piață, fie ca un produs independent - prin diverse tehnologii intenționate.

Capitolul 3 prezintă aspecte teoretice legate de dezvoltarea modelului dinamic bazat pe principii fundamentale și identificarea sistemului, precum și controlul procesului prin strategii convenționale și avansate, cum ar fi controlul predictiv bazat pe modelul. Un studiu de caz pe o coloană de distilare binară este folosit pentru a compara performanța buclă de reglareului convențional și a buclă de reglareului predictiv al modelului liniar.

Capitolul 4 prezintă proiectarea conceptuală a obținerii de propilenă prin procesul de metateză a 2-butenei. Mai multe alternative de proces sunt investigate prin abordare ierarhică. Un simplu proces Reacție-Separare se dovedește a fi cea mai economică alternativă. Se efectuează optimizarea economică a "cele mai bune" scheme tehnologice având ca funcție obiectiv optimizarea costului total anual.

Capitolul 5 prezintă controlul procesului instalației de metateză a 2-butenei folosind două strategii de control: convențional și predictiv al modelului liniar. Beneficiile și provocările ambelor strategii de control sunt demonstrate pe baza performanței buclă de reglare în atingerea specificațiilor de produs necesare.

Capitolul 6 prezintă principalele realizări ale tezei împreună cu provocările, limitările sau chiar problemele întâlnite în timpul dezvoltării, încheind cu recomandări pentru a ajuta utilizatorul final să evite repetarea aceluiași erori ca autorul.

Toate capitolele pot fi citite independent; fiecare capitol începe cu o introducere sau prezentare succintă, urmată de metodologie și contribuții originale, încheindu-se cu concluzii. Referințele sunt listate la sfârșitul fiecărui capitol.

Producerea de etilenă și propilenă din materii prime cu cost redus (2-butenă) prin procesul de metateză folosind un catalizator mesoporos de wolfram este fezabilă. Aspectele economice sugerează utilizarea schemei tehnologice Reacție-Separare cu o singură trece (fără recirculare). Dinamica instalației poate fi controlată prin intermediul unui sistem de control convențional și, pentru o performanță superioară, prin controlul predictiv bazat pe model (MPC). Lucrările viitoare ar trebui să se concentreze pe îmbunătățirea generării de produse secundare ale instalației (circularitate) datorită economiei (recircularea reactanților) și posibilitatea unei interacțiuni mai eficiente a operatorului cu MPC prin interfețe prietenoase.

Tehnologii de obținere a propilenei

Rezumat

Accentul este pus pe apariția rutelor intenționate pentru producția de propilenă, ca răspuns la creșterea cererii de materiale plastice și la trecerea la gazul de șist ca materie primă pentru producția de etilenă în ultimele decenii. Printre aceste rute, dehidrogenarea propanului s-a dovedit a fi o metodă eficientă și selectivă pentru generarea de propilenă, atrăgând investiții semnificative pentru a acoperi deficitul de ofertă de propilenă.

În plus, tehnologia de metateză, inițial introdusă în anii 1960, cunoaște în prezent un interes reînnoit, în special în contextul procesului de transformare a propanului în olefine. Integrarea tehnologiei de metateză cu activele existente are potențialul de a optimiza marginile economice ale rafinărilor. Acest lucru asigură flexibilitatea în producție și eficiența resurselor, ambele cruciale pentru adaptarea la dinamica pieței chimice și petrochimice. Sunt evidențiate activitățile de cercetare în desfășurare în acest domeniu și sunt conturate perspectivele viitoare.

Dinamica Proceselor și Controlul Proceselor

Rezumat

Comportamentul dinamic al instalațiilor chimice este caracterizat de complexitate, cu numeroase provocări din perspectiva operabilității și a siguranței. Dinamica proceselor și controlul reprezintă un pilon fundamental în faza de proiectare pentru evaluarea operabilității unui proces, specificațiile produsului și dezvoltarea unor proiecte de proces sigure și fiabile.

În acest capitol, este prezentată o metodologie pentru dezvoltarea unui model dinamic bazat pe modelele de principiu. De asemenea, este explicată o abordare aparent mai simplistă pentru construirea modelelor de proces prin identificarea modelului din datele procesului (datele de intrare-ieșire), împreună cu provocările acestei metode. Integrarea între mai multe pachete software (co-simulare Aspen Dynamics-Simulink) este descrisă și exemplificată pe modelele de operații ale unei instalații în capitolele următoare.

Controlul convențional și strategiile de control mai avansate, precum controlul predictiv bazat pe model (MPC), sunt aplicate pe o coloană de distilare binară și în final pe întreaga instalație de metateza a 2-butenei.

Controlul conventional și controlul predictiv (MPC) aplicate pe o coloană de distilare benzen-toluen

Acest studiu analizează comportamentul dinamic unei coloană de distilare benzen-toluen, și a răspunsurilor sistemului de control utilizând două strategii de reglare distincte: controlul convențional (prin combinarea a doua strategii de reglare, și anume, înainte și după abatere, feedforward și feedback) și controlul predictiv al modelului liniar (MPC). Sistemul de control convențional și dinamica procesului sunt efectuate în Aspen Dynamics, în timp ce controlul predictiv (MPC) este implementat în Simulink/MATLAB. Abordarea MPC este împărțită în două cazuri în funcție de dezvoltarea modelului: (1) liniarizare din Aspen Dynamics și (2) identificarea sistemului folosind date din simulare.

Coloana de distilare este intrinsec neliniară. Pentru a obține un model potrivit pentru scopuri de control, modelul neliniar al coloanei este liniarizat în apropierea condițiilor sale de operare la regim stabil, folosind Aspen Dynamics. Acest lucru furnizează matricile de stare A, B, C și D. Acest model reprezentat de matricile de stare este apoi folosit pentru a proiecta buclă de reglare MPC.

O altă abordare în care modelul de simulare dinamic (neliniar) este folosit pentru a efectua mai multe teste de tip treaptă, iar datele obținute sunt procesate cu instrumentul de Identificare a Sistemului în MATLAB. Similar primului caz, rezultă o reprezentare a modelului reprezentat de matricile de stare.

Alegerea de a reprezenta ambele modele în forma matricilor de stare este conditionată în primul rând de cerința instrumentului MPC Designer, care impune o astfel de reprezentare pentru construirea algoritmului MPC.

Raportul descrie pașii implicați în dezvoltarea atât a simulărilor la regim stabil, cât și a celor dinamice. De asemenea, explică integrarea dintre mediul Aspen Dynamics și Simulink/MATLAB pentru configurarea algoritmului predictiv al modelului. Documentul include recomandări și sfaturi practice pentru lucrul cu diversele aplicații software implicate.

Se pune accent pe pașii necesari pentru a permite schimbul de date între software-urile AspenTech și MATLAB. Este important de remarcat că atât instrumentele MPC Designer, cât și “System Identification” fac parte integrantă din suita de software MATLAB, în timp ce Simulink servește ca platformă pentru interacțiunea cu mediul de simulare Aspen Dynamics.

Raportul include rezultatele dinamice atât pentru controlul convențional, cât și controlul predictiv bazat pe modelul, denumit MPC. Secțiunea de concluzii oferă o analiză comparativă a performanței fiecărei strategii de control.

Controlul combinat de feedforward/feedback

Controlul de tip reglare înainte de abatere “feedforward” este o strategie de control adesea implementată împreună cu controlul feedback pentru a respinge perturbațiile, în special dacă perturbația identificată influențează semnificativ ieșirile procesului. Rata de alimentare ușor măsurabilă este ideală pentru integrarea buclă de reglării feedforward, îmbunătățind semnificativ performanța sistemului de control. Buclă de reglarea feedforward ideal este raportul negativ dintre funcția de transfer a perturbației împărțită la funcția de transfer a procesului.

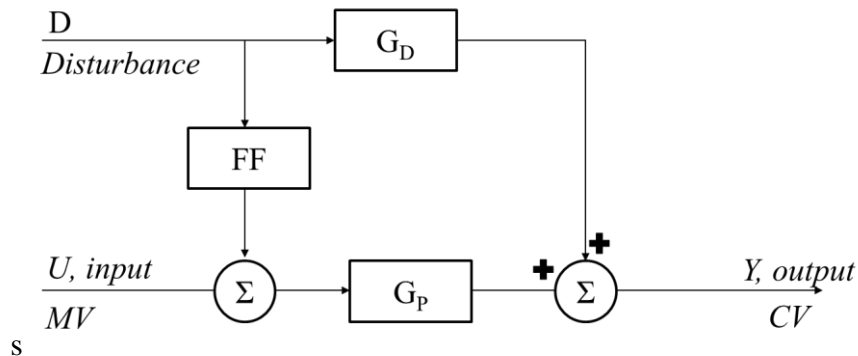


Figure 1. Schema de tip bloc pentru reglare înainte de abatere (FF)

$$Y(s) = D(s) \cdot G_D(s) + U(s) \cdot G_P(s) = 0$$

$$U(s) = -\frac{G_D(s)}{G_P(s)} \cdot D(s) \quad (0.1)$$

$$G_{FF} = -\frac{G_D(s)}{G_P(s)}$$

În acest exemplu, debitul de alimentare reprezintă o perturbație măsurată și este adăugat ca acțiune de feedforward atât pe buclă de reglarea de compoziție a distilatului, cât și pe buclă de reglarea de compoziție a reziduului. Scopul este de a asigura o răspuns dinamic mai bun și mult mai rapid la diferite perturbații măsurabile. O bună aproximare în majoritatea aplicațiilor de control feedforward este să se stabilească factorul de amplificare egal cu raportul dintre perturbație și factorii de amplificare ale procesului, în special atunci când ambele ieșiri ale buclă de reglării acționează asupra procesului cu dinamici similar, $\tau_p \approx \tau_d$. Prin urmare, următoarea ecuație poate fi aplicată:

$$K_{FF} = -\frac{K_D}{K_P} \quad (0.2)$$

Deoarece buclă de reglării de compoziție sunt buclă de reglării PI (proporțional-integral), buclă de reglarea feedforward este adăugat la aceștia cu următoarea adăugare a perturbației măsurate,

$$d.u(t) = u_{bias} + K_C e(t) + \frac{K_C}{\tau_I} \int_0^t e(t) dt + K_{FF} d \quad (0.3)$$

În Figura 41, controlul combinat feedforward și feedback pe coloana de distilare benzen-toluen este ilustrat. Acțiunea feedforward este configurată în Aspen Dynamics printr-un bloc comparator care calculează abaterea debitului de alimentare, un bloc lead-lag configurat cu caracteristici feedforward. Semnalul provenit de la blocul lead-lag, împreună cu acțiunea buclă de reglareului de compoziție, sunt introduse într-un bloc de sumă, cu semnalul de ieșire controlând rata de reflux pentru un buclă de reglare feedforward, FF1, și puterea de reboiler pentru al doilea buclă de reglare, FF2. S-au efectuat teste treaptă asupra debitului de alimentare pentru a determina răspunsul asupra compoziției produselor, și, în consecință, parametrii buclă de reglare pentru ambii buclă de reglare feedforward (de exemplu, benzene CC1 și toluene CC2) din funcțiile lor de transfer corespunzătoare și prin aplicarea ecuației (4.104).

Table 1. Feedforward controller parameters

	Feedforward on benzene composition controller	Feedforward on toluene composition controller
Feedforward control gain, K_{FF}	-19.8	0.0148
Disturbance gain, K_d	0.0009, ([-]/kmol/hr)	-0.0121, ([-]/kmol/hr)
Disturbance time constant, τ_d	0.53 h	0.95 h
Feedforward transfer function	$G_{FF1} = -\frac{0.0009}{0.53s+1} \cdot \frac{0.56s+1}{4.54 \times 10^{-5}}$	$G_{FF2} = -\frac{-0.0121}{0.95s+1} \cdot \frac{0.56s+1}{0.82}$

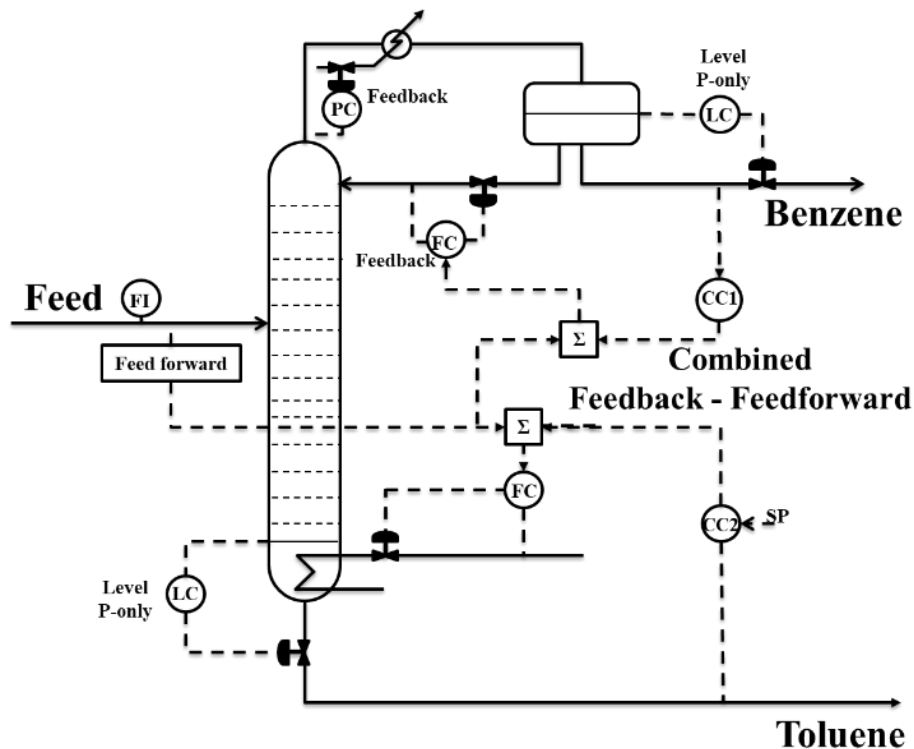


Figure 2. Controlul combinat Feedforward/Feedback pe o coloană de distilare benzen-toluen

Control predictiv (MPC) aplicat pe coloana de distilare benzen-toluen

Se demonstrează aplicabilitatea unui buclă de reglare predictiv folosind un model liniar pentru o coloană de distilare benzen-toluen, inclusiv câteva recomandări valoroase și sugestii care pot salva cititorul de un efort considerabil în găsirea soluției sau direcției pentru proiectarea și configurarea unui buclă de reglare predictiv al modelului în simularea Aspen Dynamics.

Sunt necesare câteva condiții pentru a facilita legătura și transmiterea datelor între simularea Aspen Dynamics și Simulink/MATLAB. În mod evident, pachetele de software AspenTech (de exemplu, Aspen Plus și Aspen Dynamics) trebuie să fie disponibile. Pentru a permite transferul de date între Aspen Dynamics și MATLAB, trebuie să fie utilizată o versiune compatibilă (fie 32 de biți, fie 64 de biți); astfel, în acest caz, Aspen Plus v10 și MATLAB R2015b sunt utilizate pentru cercetarea curentă. Simulink este o aplicație în cadrul MATLAB, așadar trebuie să fie disponibilă împreună cu celelalte aplicații sau instrumente, cum ar fi MPCdesigner și System Identification Toolbox. Aceste aplicații din urmă sunt, de asemenea, necesare pentru proiectarea și configurarea MPC pe coloana de distilare benzen-toluen.

Interfața de Proiectare a Buclă de reglareului (CDI) de la Aspen Dynamics permite extragerea unui model liniar cu matrici de stare din simularea neliniară a Aspen Dynamics, care poate fi utilizat ulterior în Control System Toolbox pentru proiectarea unui sistem de control al procesului, prin urmare, a unui buclă de reglare predictiv al modelului (Mathworks), (AspenTech, 2016). Un exemplu similar cu proiectarea și co-simularea unei turnuri de distilare pentru separarea benzenului, toluenului și p-xilenului este furnizat și disponibil pe site-ul Mathworks.

Rezultate

Rezultatele pentru fiecare structură de control sunt prezentate mai jos pentru a ilustra performanța și răspunsul la control pentru o perturbație de alimentare constând într-o schimbare treaptă de +/- 10% din debitul de alimentare.

Controlul convențional reprezentat de cele trei (3) scenarii:

- CS1: Proporțional-Integral (PI)
- CS2: PI și Reglare înainte de abatere (Feedforward FF) pe puritatea de benzen
- CS3: PI și Reglare înainte de abatere (Feedforward FF) pe puritatea de benzen și toluen

Controlul predictiv al modelului reprezentat de cele două (2) scenarii:

- CS4: Model dezvoltat prin Identificarea Sistemului cu perturbație măsurată
- CS5: Model dezvoltat prin liniarizare cu Aspen Dynamics (CDI)

CS1: Evaluarea performanței buclă de reglareului PI

Linia punctată prezintă răspunsul buclă de reglareului pentru o reducere treaptă de 10% a debitului de alimentare, în timp ce liniile continue reprezintă o creștere de 10% a debitului de alimentare. Structura de control PI constă în bucle de control de bază ale zestrei coloanei (de

exemplu, două (2) bucle de reglare de nivel pentru vasul de reflux și blazul coloanei și un (1) buclă de reglare de presiune de la vârful coloanei) și două (2) bucle de reglare de compoziție pentru puritățile produselor.

În Figura 54 sunt prezentate rezultatele dinamice ale CS1 pentru variabilele de intrare și ieșire, luând în considerare o perturbație de $\pm 10\%$ a debitului de alimentare. Înainte de declanșarea perturbației de alimentare, se menține o perioadă de așteptare de 1 oră cu valorile nominale pentru coloana de distilare. Puritățile produselor ating în aproximativ 3 ore un nou regim stabil, iar sarcina refierbatorului și debitul de reflux resping perturbarea de alimentare cu o deviație de sub $\pm 9\%$ față de valoarea nominală. Fluctuațiile purităților produselor sunt mai mici de 0,5%, cea mai mare corespunzând purității de toluen.

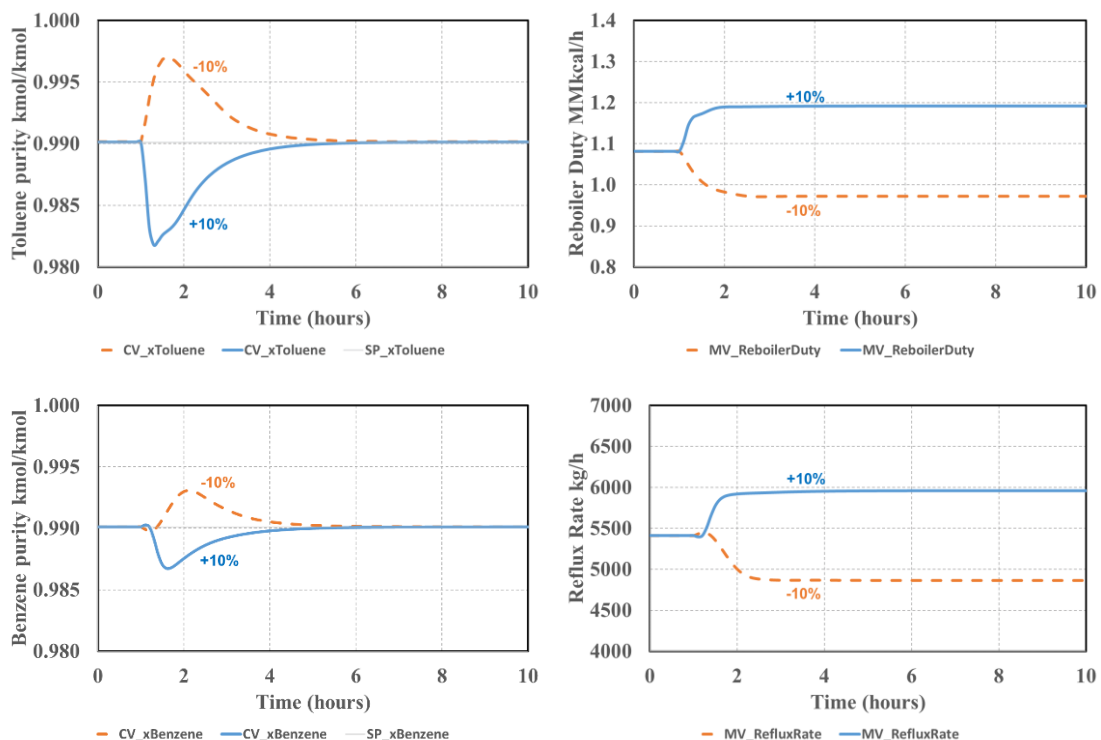


Figure 3. Răspunsul dinamic al coloanei de distilare benzen-toluen la perturbația de $\pm 10\%$ a debitului de alimentare (control PI)

CS2: Evaluarea performanței buclă de reglareului PI cu feedforward aplicat pe puritatea de benzen.

În plus față de structura anterioară de control, este inclusă o strategie de feedforward pentru compoziția de benzen pentru a îmbunătăți performanța buclă de reglareului. Rezultatul constă într-o deviere ușor mai mică decât controlul PI convențional, în intervalul de 0.2% pentru puritatea de benzen. Răspunsul buclă de reglareului este ușor mai lent comparativ cu CS1, astfel încât în aproximativ 4 ore se atinge noul regim stabil. Rezultatele sunt prezentate în Figura 55 pentru variabilele controlate și manipulate.

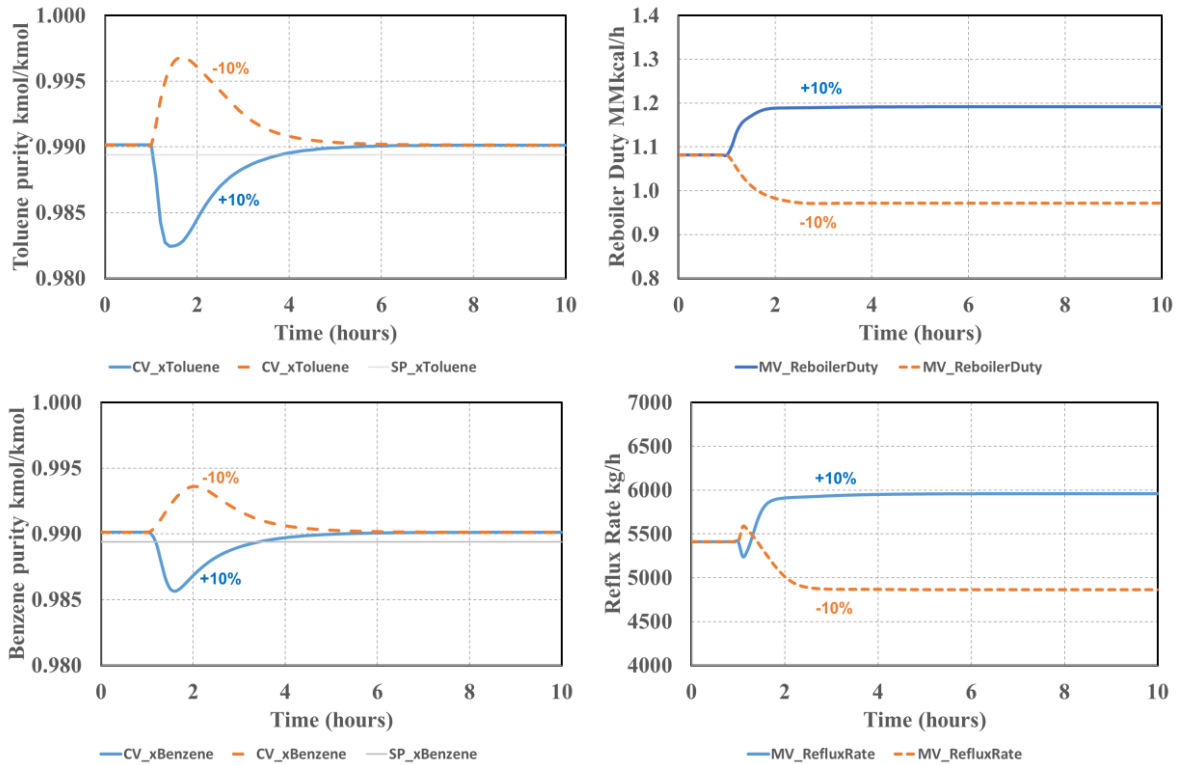
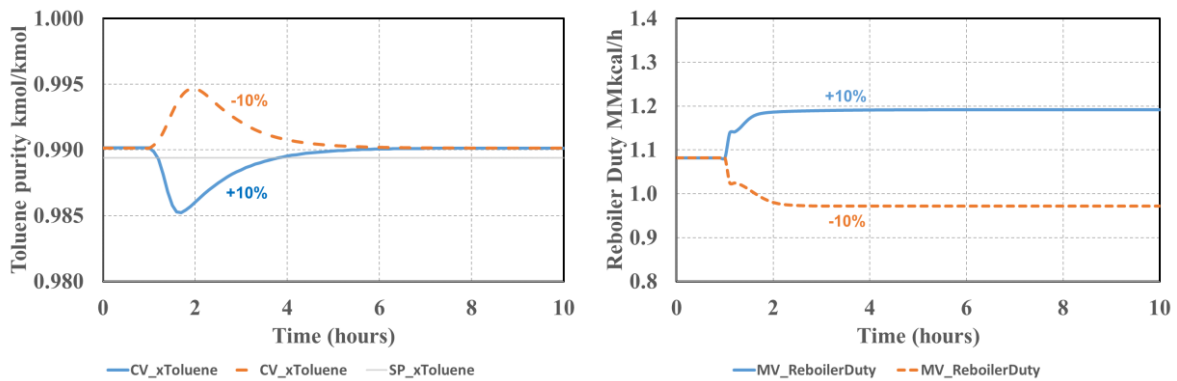


Figure 4. Răspunsul dinamic al coloanei de distilare benzen-toluen la perturbația de $\pm 10\%$ a debitului de alimentare (control PI și FF pe puritatea de benzen)

CS3: Evaluarea performanței buclă de reglarea PI cu feedforward aplicat pe puritatea de benzen și toluen.

Răspunsul buclă de reglarea este similar pentru compozițiile produselor, în timp ce puritatea de toluen este ajustată în mai puțin de 3 ore de la schimbările treaptă ale alimentării. Mai mult, deviațiile pentru puritatea de toluen sunt considerabil reduse, cu o deviere de sub 0.1% față de valoarea nominală. Variabilele manipulate (sarcina refierbătorului și debitul de reflux) sunt ajustate corespunzător pentru a respinge perturbația de alimentare și a atinge regimul stabil în mai puțin de 1 oră. (Figura 56)



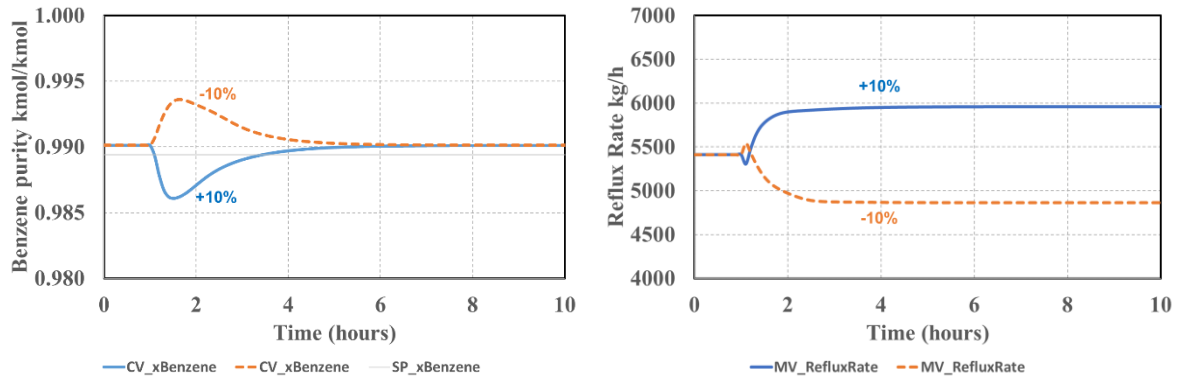


Figure 5. Răspunsul dinamic al coloanei de distilare benzen-toluen la perturbația de $\pm 10\%$ a debitului de alimentare (control PI și FF pe puritatea de benzen și toluen)

CS4: Evaluarea performanței buclă de reglarea predictiv (MPC) dezvoltat prin Identificare cu perturbație măsurată (MD).

În dezvoltarea modelului, debitul de alimentare este inclus în modelul linear al coloanei de distilare ca o perturbație măsurată (MD). Modelul identificat încorporat în buclă de reglarea predictiv al modelului prezintă o deviere în puritățile produselor în intervalul de 0,4% cu o performanță moderată a buclă de reglarea, fiind necesare aproximativ 5 ore pentru a ajusta variabilele controlate la setările lor. Variabilele manipulate (MVs) ating noul regim stabil în aproximativ 3 ore.

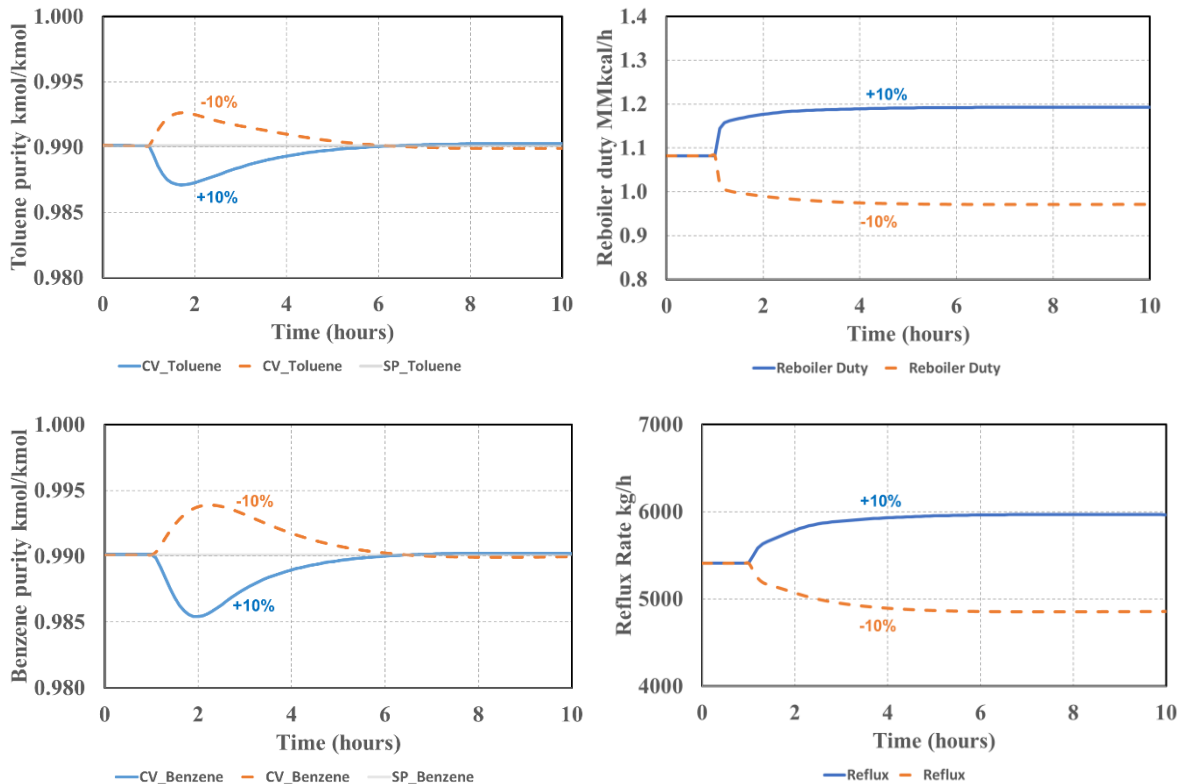


Figure 6. Răspunsul dinamic al coloanei de distilare benzen-toluen la perturbația de $\pm 10\%$ a debitului de alimentare (MPC prin Identificarea Sistematică)

CS5: Evaluarea performanței buclă de reglareului predictiv (MPC) cu liniarizarea Aspen Dynamics

Controlul predictiv bazat pe modelul linear (MPC) obține o performanță foarte bună, reușind să ajusteze puritățile produselor cu deviații foarte mici sub $<0,1\%$, iar răspunsul buclă de reglareului este foarte rapid odată cu apariția perturbației de alimentare.

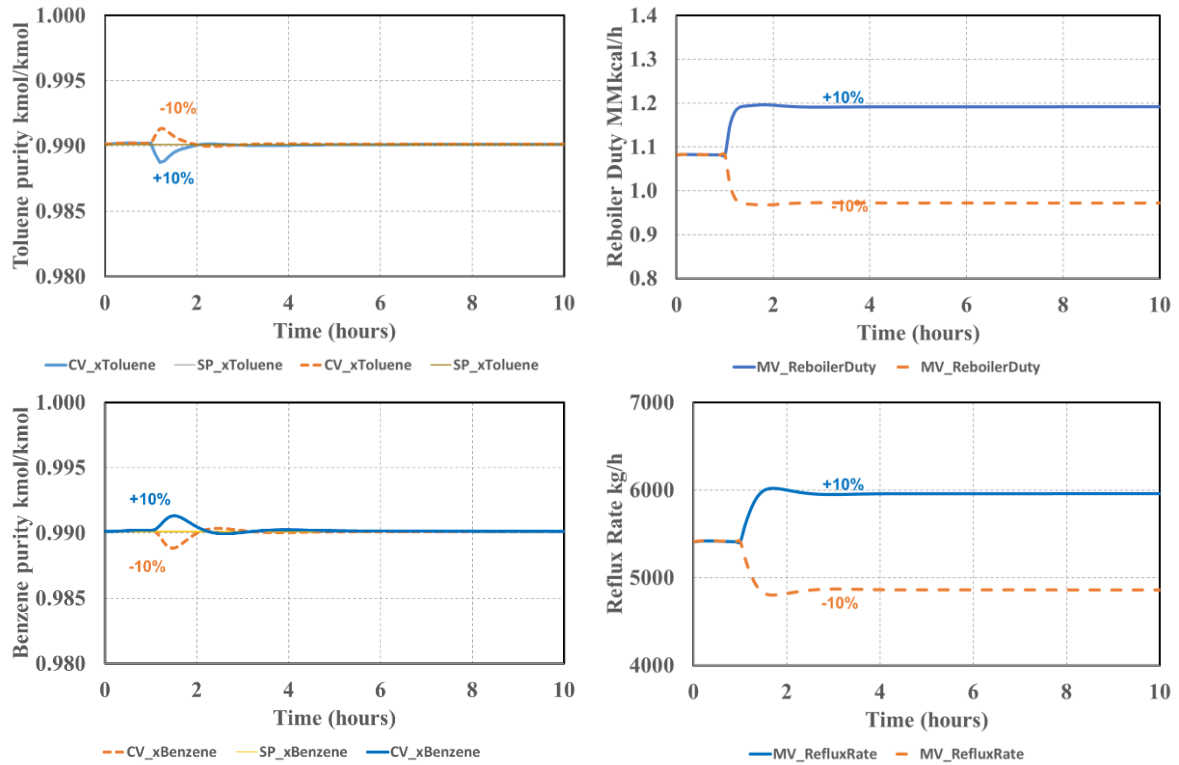


Figure 7. Răspunsul dinamic al coloanei de distilare benzen-toluen la perturbația de $\pm 10\%$ a debitului de alimentare (MPC prin liniarizarea Aspen Dynamics)

Evaluarea performanței între controlul convențional și controlul predictiv bazat pe modelul linear (MPC)

În Figura 59 până în Figura 62, răspunsurile dinamice pentru fiecare dintre cele cinci (5) structuri de control sunt comparate în ceea ce privește reglarea purității produselor.

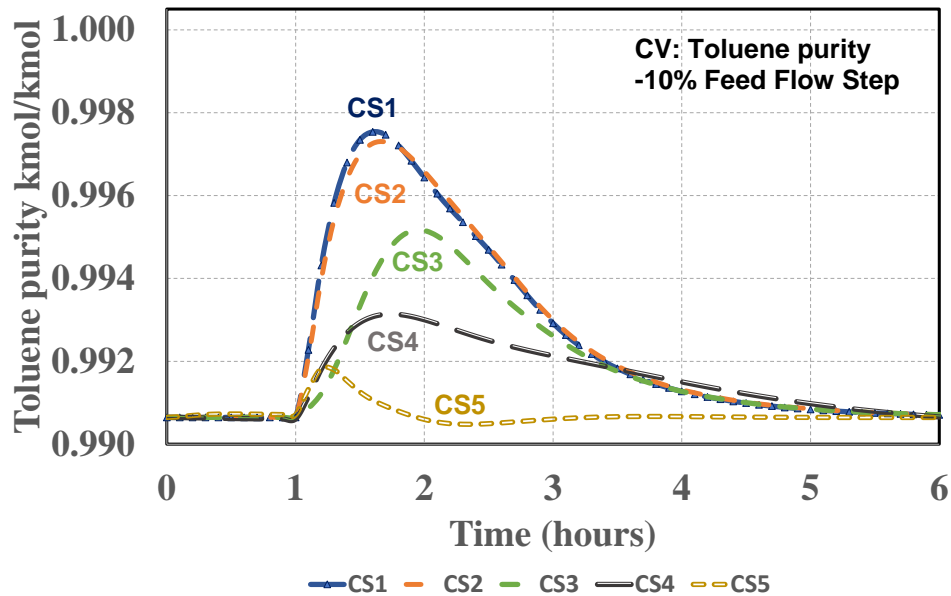


Figure 8. Răspunsurilor dinamice pentru puritatea toluenului la schimbarea de tip treaptă a debitului de alimentare cu -10%

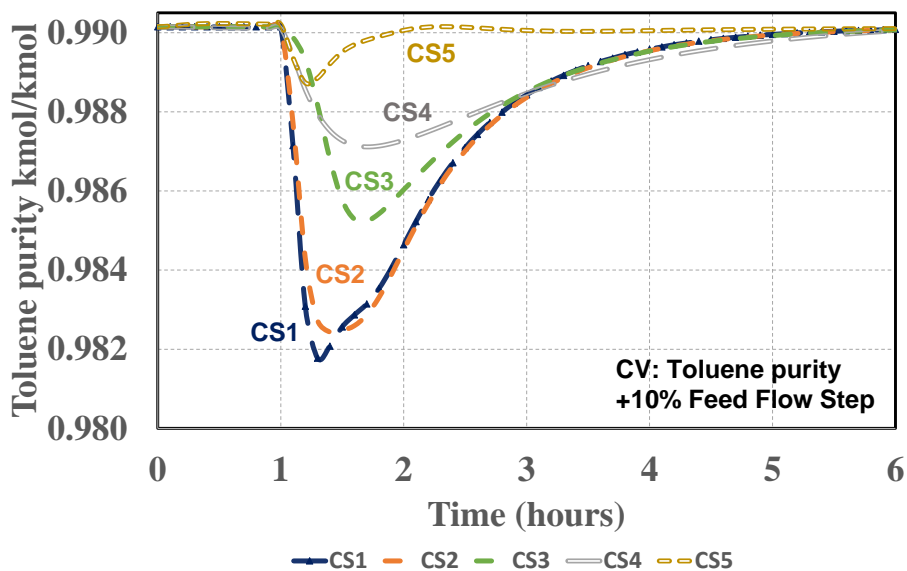


Figure 9. Răspunsurilor dinamice pentru puritatea toluenului la schimbarea de tip treaptă a debitului de alimentare cu +10%

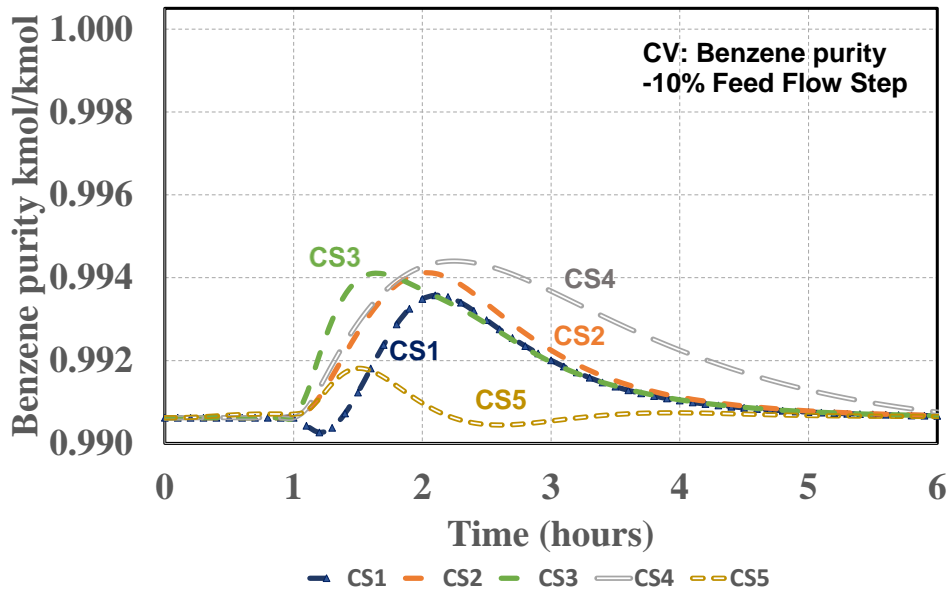


Figure 10. Răspunsurilor dinamice pentru puritatea benzenului la schimbarea de tip treaptă a debitului de alimentare cu -10%

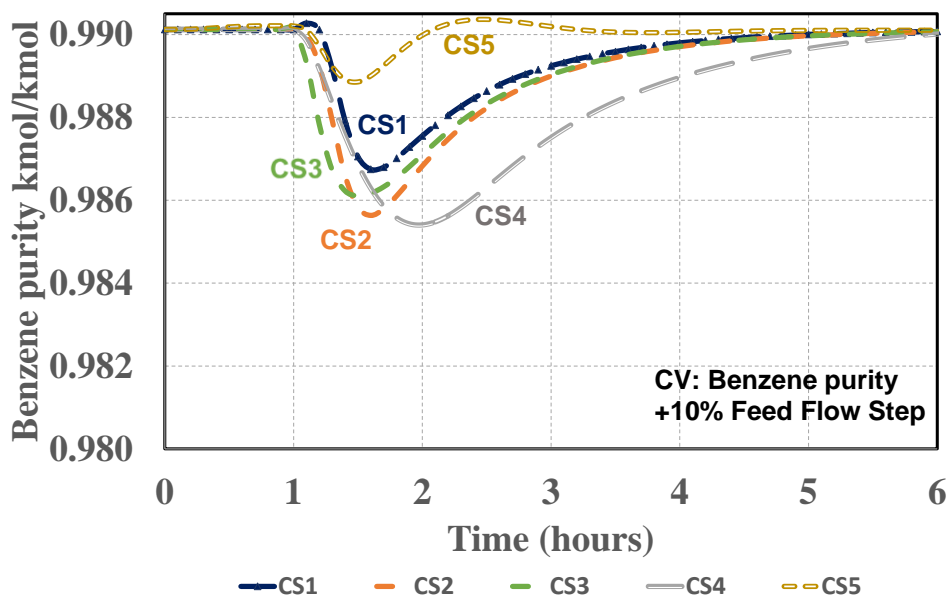


Figure 11. Răspunsurilor dinamice pentru puritatea benzenului la schimbarea de tip treaptă a debitului de alimentare cu +10%

Rezultatele din răspunsurile dinamice ale purității de toluen în raport cu variația debitului de alimentare arată o îmbunătățire progresivă în structurile de control, de la PI convențional la cele mai avansate. Într-un fel, dinamicile purității de benzen nu reflectă aceeași performanță ca în cazul toluenului și par să ilustreze un control mai eficient în ajustarea purității de benzen cu implementarea simplă a PI convențional (CS1) în comparație cu celelalte trei strategii de control (CS2, CS3, CS4). În ambele cazuri, MPC-ul proiectat cu liniarizarea modelului de la Aspen Dynamics, reprezentat de CS5, s-a dovedit a fi cel mai eficient.

Structurile de control menționate mai sus sunt evaluate prin utilizarea mai multor metode de calcul pentru caracterizarea performanței sistemului și identificarea celei mai performante structuri de control.

Pierderea medie pătratică (MSE) este calculată pentru puritățile produselor în raport cu fiecare structură de control pentru a ilustra performanța și răspunsul la control pentru aceeași perturbație a alimentării, adică $\pm 10\%$ din debitul de alimentare. Performanța buclă de reglării este evaluată folosind MSE pentru fiecare structură de control în parte.

Eroarea integrală pătrată (ISE) reprezintă o altă măsură de evaluare a performanței sistemului prin integrarea erorii pătrate a sistemului pe întreaga durată a eșantionului (interval fix de timp).

În practica industrială, deoarece este foarte important să se mențină calitățile produsului și să nu se depășească sau, mai rău, să se genereze produse care nu îndeplinesc specificațiile, performanța buclă de reglării este evaluată prin devierea maximă a variabilelor controlate, denumită aici eroare maximă de vârf, PE.

Cu toate acestea, eroarea maximă de vârf, PE, identifică devierea maximă, fără a furniza informații legate de fluctuații sau capacitatea de a atinge punctul de setare. Prin urmare, o altă metodă comună de evaluare a răspunsului la control și a preciziei este dată de eroarea absolută integrală, IAE.

IAE determină suma zonelor deasupra și sub țintă (punct de setare), astfel încât penalizează toate erorile în mod egal, indiferent de direcție.

Table 2. Rezultatele performanței buclă de reglării purității de toluen (timp = 20 h)

Toluene	CS1		CS2		CS3		CS4		CS5	
	+	-	+	-	+	-	+	-	+	-
MSE x 10 ⁻⁵	0.25	0.28	0.27	0.25	0.10	0.11	0.065	0.065	0.003	0.003
ISE x 10 ⁻⁵	5.20	5.70	5.53	5.10	2.20	2.25	1.30	1.30	0.05	0.05
PE x 10 ⁻²	0.69	0.83	0.77	0.67	0.49	0.46	0.30	0.25	0.12	0.12
IAE x 10 ⁻²	1.20	1.15	1.15	1.20	0.79	0.84	0.76	0.73	0.12	0.15

Table 3. Rezultatele performanței buclă de reglării purității de benzen (time=10 h)

Benzene	CS1		CS2		CS3		CS4		CS5	
	+	-	+	-	+	-	+	-	+	-
MSE x 10 ⁻⁵	0.04	0.04	0.08	0.07	0.07	0.07	0.15	0.15	0.003	0.004
ISE x 10 ⁻⁵	0.87	0.88	1.58	1.41	1.50	1.42	2.92	2.92	0.068	0.077
PE x 10 ⁻²	0.30	0.34	0.45	0.35	0.40	0.35	0.30	0.38	0.125	0.121
IAE x 10 ⁻²	0.50	0.46	0.62	0.64	0.62	0.64	1.00	1.03	0.124	0.159

Aceleași rezultate sunt determinate matematic, așa cum este ilustrat și grafic în Figura 59 până în Figura 62. Structura de control cea mai performantă s-a dovedit a fi buclă de reglarea predictiv al modelului (CS5) proiectat cu modelul liniarizat de către Aspen Dynamics.

Bibliografie selectivă

Aspen Plus & Dynamics, version 10, User Manual, 2016, www.aspentech.com.

Babu J., Brosilow C., Techniques of Model-Based Control, Prentice Hall International Series in the Physical and Chemical Engineering Sciences, 2001

Bequette B.W., Process Dynamics – Modeling, Analysis and Simulation, Prentice Hall International Series in the Physical and Chemical Engineering Sciences, 1998

Dimian A. C, Bîldea C. S., Chemical Process Design – Computer Aided Case Studies, WILEY-VCH Verlag GmbH & Co, 2008.

Camacho E.F., and Bordons C., - Model Predictive control 2nd Edition, Springer, London, 2007.

Garcia C.E. and D.M. Prett – Model predictive control: theory and practice – a survey, Automatica, Vol 25, No 3, pp.335-348, 1989.

<https://www.kalmanfilter.net/interimSummary.html>

Lennart Ljung, System identification – Theory for user, Prentice Hall Inc., Englewood Cliffs, New Jersey, 1999

Luyben L. W., Distillation Design and Control Using Aspen™ Simulation, John Wiley & Sons, Inc., 2006.

MathWorks – Help Center. <https://www.mathworks.com/help/mpc/ug/choosing-sample-time-and-horizons.html>

Model Predictive Control Toolbox User's Guide, 1995-2005, The MathWorks Inc. <https://www.mathworks.com>

Agachi, P.S.; Nagy, Z.K.; Cristea, M.V.; Imre-Lucaci, A. Model Predictive Control. In Model Based Control, 1st ed.; Wiley-VCH: Stuttgart, Germany, 2006; pp. 15–63.

Garriga, J.L.; Soroush, M. Model Predictive Control Tuning Methods: A Review. Ind. Eng. Chem. Res. 2010, 49, 3505–3515.

Skogestad, S. Dynamics and control of distillation columns: A tutorial introduction. Trans. IChemE 1997, 75, 539–562.

Skogestad, S. Advanced control using decomposition and simple elements. Annual Review in Control 56, Elsevier, 2023.

Nimmo I., Moscatelli J., Accurately Determine Console Operator Workload, Chemical Processing, July 13 2005.

Peterson D., Human Error Reduction and Safety Management, 3rd Edition, WILEY, 1996.

Proiectarea instalației de metateza a 2-butenei

Rezumat

Ca răspuns la o cerere crescută de propilenă, devin tot mai de interes soluțiile alternative pentru conversia produselor secundare în olefine cu valoare ridicată. Cu toate că procesele bine-cunoscute pentru obținerea propilenei, precum piroliza și cracarea catalitică în strat fluidizat, reprezintă opțiuni viabile, o altă alternativă este reprezentată de metateza olefinelor.

Produsul secundar 2-butena, obținut din instalația de cracare catalitică, a fost folosit ca materie primă pentru metateza olefinelor. Pe baza unei abordări conceptuale de proiectare, sinteza proceselor prin abordare ierarhică a fost aplicată pentru mai multe alternative de proces pentru determinarea diagramei de proces "optimă" economic, care să genereze cel mai mare venit pentru o debit fix a materiei prime.

Optimizarea economică a instalației este investigată și structurată în două părți, respectiv pentru secțiunea de preîncălzire și pentru secțiunea de distilare. Funcția obiectiv pentru optimizare este costul total anual, TAC (Total Annual Cost).

Proiectarea conceptuală a instalației de metateză a 2-butenei

Acest capitol prezintă proiectarea conceptuală a unui proces de metateză a olefinelor pornind de la 2-butenă provenită dintr-o instalație FCC (cracare catalitică fluidizată). Această fracție este un produs secundar de valoare redusă, în mod obișnuit trimisă la rezervorul de amestecare pentru GPL (gaz petrolier lichefiat), însă în acest caz, ar putea fi îmbunătățită pentru a deveni un produs mai valoros. Baza proiectării se referă la caracterizarea materiei prime, stoichiometria, cinetică și termodinamică. Reacția de metateză poate avea loc în prezența unui catalizator de oxid de wolfram, transformând butenele în produse olefinice valoroase între C2 și C6, în special propilenă. Vor fi identificate mai multe scheme alternative ale procesului de metateză a olefinelor pentru producția de propilenă. Aceste alternative vor fi evaluate economic folosind o abordare ierarhică. În final, proiectarea detaliată a celei mai rentabile și promițătoare alternative va fi prezentată.

Identificarea alternativelor de schemă tehnologică

În această studiu de caz, se analizează utilizarea unei fracții de alimentare cu valoare redusă, nBB, provenită dintr-o instalație FCC, compusă în principal din 70% 2-butenă și 30% n-butan inert. Cu un debit de 5,7 tone/oră al fracției C4 în toate alternativele de proces, două categorii principale de scheme tehnologice sunt examinate. Prima categorie, denumită Structura Instalației 1 (US1), implică recircularea materialului nereactionat, și opțiunile de eliminare a inertilor. Studiul asupra US1a indică faptul că o conversie ridicată și utilizarea unei fracții mari de purjare conduc la randamente mai mari. Cea de-a doua categorie, denumită Structura Instalației 2 (US2), cuprinde alternative în care se urmărește obținerea unor niveluri ridicate de conversie, dar separarea și recircularea reactantului nu sunt urmărite din cauza costurilor mari. Produsele rezultate includ componente valoroase precum etilena, propilena, pentena și hexena, iar fluxurile secundare conțin butene și n-butan, cu diferite abordări privind eliminarea inertului.

Scheme tehnologice cu recirculare (US1)

În schema Reacție - Separare - Recirculare (US1a), efluentul reactorului este direcționat către o secțiune de separare. Aici, componentele cele mai valoroase (etilena, propilena, pentena, hexena) incluse în debitul de PRODUSE sunt separate și eliminate din instalație, în timp ce reactantul este recirculat. Cu toate acestea, trebuie remarcat faptul că separarea dintre 2-butenă/n-butan (cu o volatilitate relativă de 0,9) pare să fie dificilă. Specific pentru structurile cu recirculare, eliminarea unei fracții din recirculare care conține inertul reprezintă cea mai simplă soluție pentru a evita acumularea de n-butane (Figura 66).

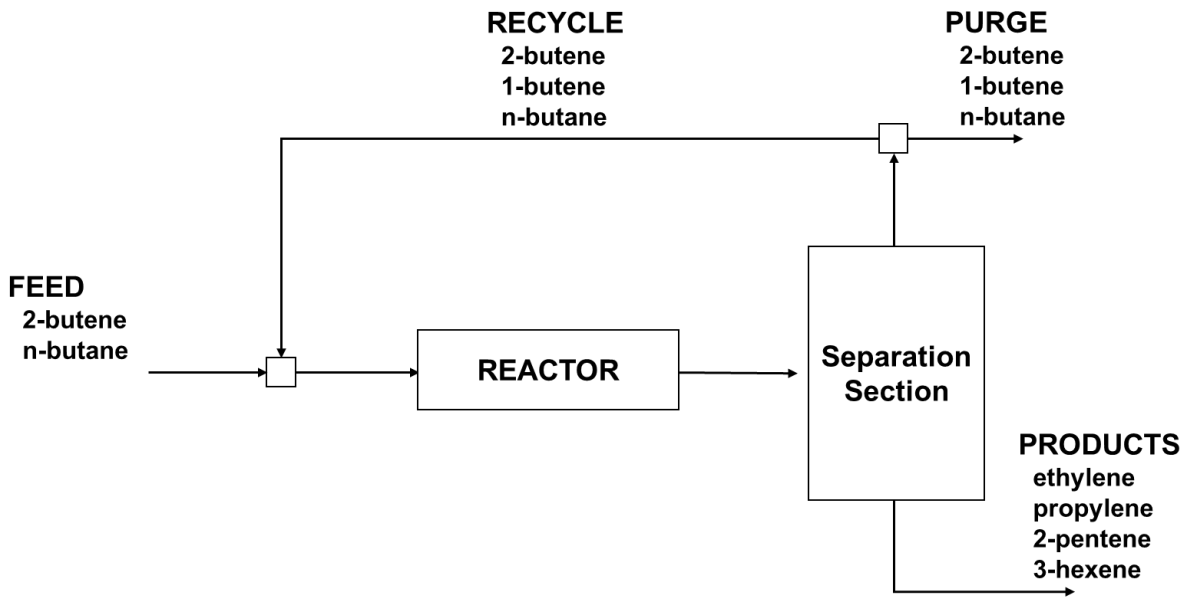


Figure 12. Reactor – Separare – Reciclu, cu purja (US1a).

O soluție pentru a procesa reactantul util din fracția de purjare este să se realizeze o separare a reactanților, și anume 2-butena și 1-butena, de inertul n-butane. Sunt propuse două opțiuni posibile pentru această separare, deoarece poate fi efectuată fie în interiorul buclei de recirculare, fie înainte de bucla de recirculare în procesul de sus (Figura 67 și Figura 68).

Structura Reacție – Separare – Reciclu (US1b) constă în adăugarea unei secții de separare în bucla de recirculare pentru a elimina inertul din sistem (Figura 67).

Structura Reacție – Separare – Reciclu (US1c) asigură îndepărtarea inertului înainte de intrarea în instalație (Figura 68), evitând astfel acumularea de inert.

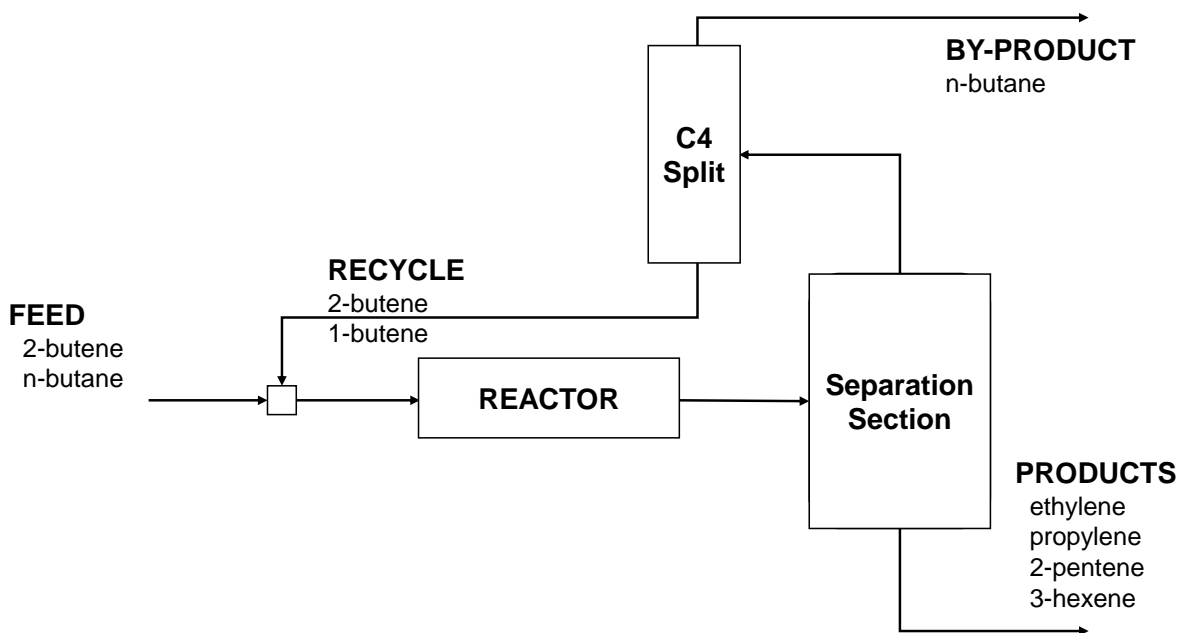


Figure 13. Reacție – Separare – Reciclu. Inertul este separat și eliminat după reactor (US1b)

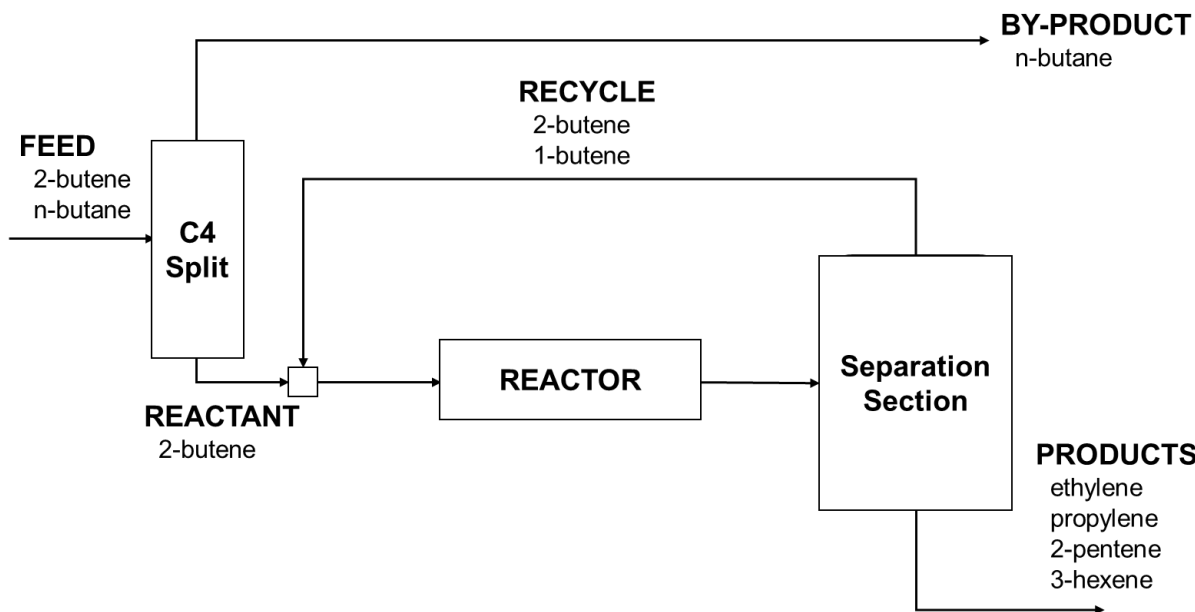


Figure 14. Reacție – Separare - Reciclu. Inertul este separat și eliminat înainte de reactor (US1c).

Scheme tehnologice fără recirculare (US2)

Au fost evaluate două alternative pentru structurile unităților fără recirculare (US2).

Structura Reacție – Separare (US2a) constă într-o configurație simplă în care inertul este separat înainte de intrarea în reactor, astfel evitându-se supradimensionarea reactorului și secțiunilor de separare (Figura 69). Indiferent de costul ridicat asociat cu separarea inertului, această alternativă ar putea fi economică datorită prețului atractiv al n-butanului de înaltă puritate (vezi Tabelul 13) și costului mai scăzut al instalațiilor în aval.

Structura Reacție – Separare (US2b), în care inertul rămâne în instalație și nu este separat de celălalt amestec de C4 (Figura 70). Aceasta reprezintă cea mai simplă alternativă de proces.

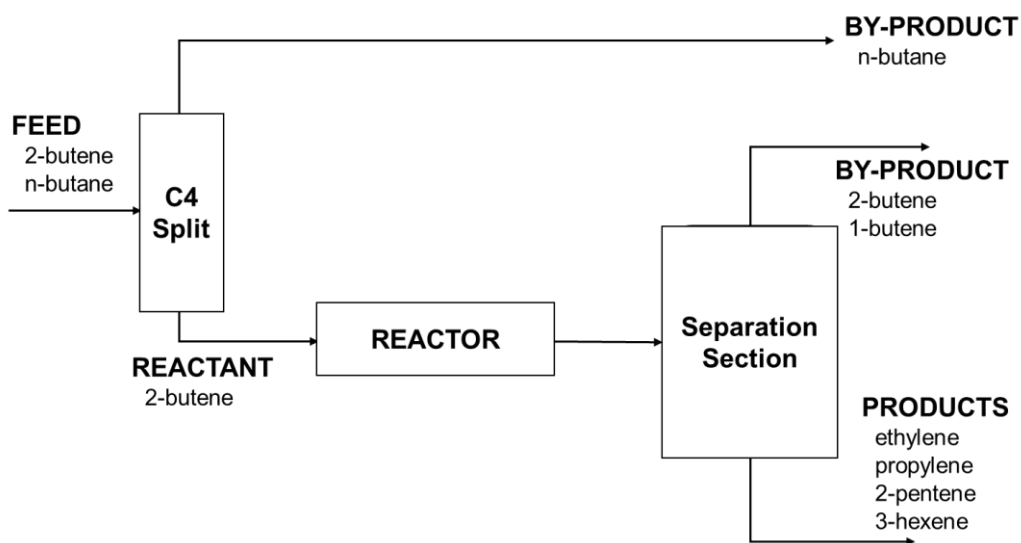


Figure 15. Reacție – Separare, inertul este eliminat înainte de reactor (US2a).

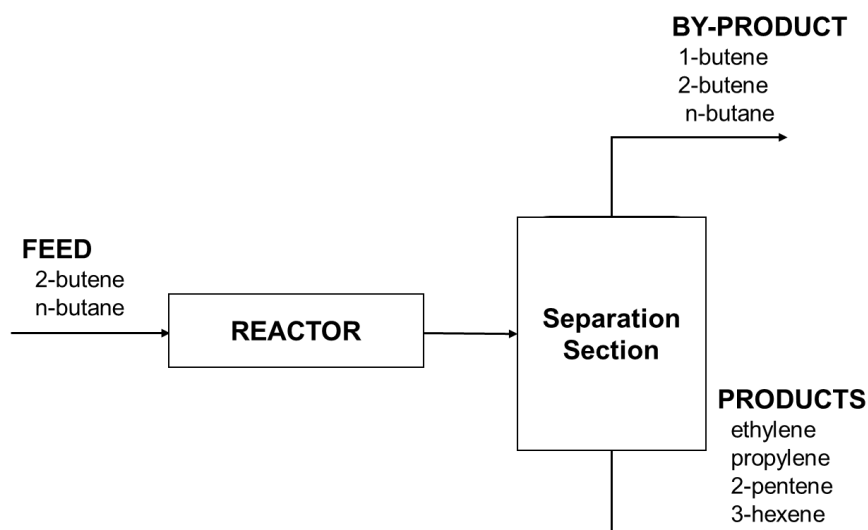


Figure 16. Reacție – Separare (US2b).

Evaluarea economică a alternativelor de proces

Primul nivel de analiză detaliată, și anume, analiza intrare-ieșire, a relevat că procesul ar putea fi profitabil, deoarece veniturile obținute din vânzarea propilenei, produsul cel mai scump, depășesc costul materiei prime. Atunci când selectivitatea transformării chimice și costurile asociate cu reactorul au fost luate în considerare prin intermediul unui model cinetic al reactorului, s-a obținut valoarea optimă a conversiei reactorului. Așa cum era de așteptat, conversia optimă este ridicată, situându-se în jurul valorii de 90%. Evident, această valoare reduce pierderea de material proaspăt cu purjarea. Cu toate acestea, rezultatele la acest nivel de analiză nu au fost suficient de concludente pentru a permite selectarea unei alternative. Detalii suplimentare erau necesare prin luarea în considerare a costurilor de investiții și de operare legate de echipamentele de separare. Rezultatele sunt prezentate pentru fiecare alternativă de proces studiată.

Rezultatele evaluării economice a alternativelor de schemă tehnologică

Alternativele de proces au fost evaluate într-o abordare ierarhică (Dimian et al., 2014), în scopul de a determina soluția cea mai rentabilă, condiția fiind potențialul economic EP (economic potential).

Obiectivul abordării ierarhice este de a respinge alternativele cu un potențial economic scăzut în stadiile incipiente ale proiectării conceptuale, concentrându-se, în consecință, doar asupra alternativelor cele mai promițătoare

Scheme tehnologice cu recirculare

US1a: Reacție – Separare - Reciclu (A + B + I)

Un studiu de sensibilitate s-a efectuat pentru o temperatură fixă a reactorului la 550°C și o presiune de 1 bar, cu un diametru constant al reactorului de 3 metri. Deoarece parametrii cinetici au fost determinați într-un interval de temperatură cuprins între 350÷550°C și o presiune de 1 bar, nu s-a făcut extrapolare dincolo de temperatura/ presiunea maximă. O fracție variabilă de purjare, denumită P , a fost introdusă pentru a stabili proiectarea optimă cu privire la potențialul economic. Rezultatele arată că, la o lungime dată a reactorului, o conversie mai mare a reactantului se obține prin creșterea fracției de purjare (Figura 71). Acest lucru poate fi explicat prin faptul că recircularea (care conține cantități mari de inert) reduce atât timpul de ședere al reactantului în reactor, cât și concentrația de reactant.

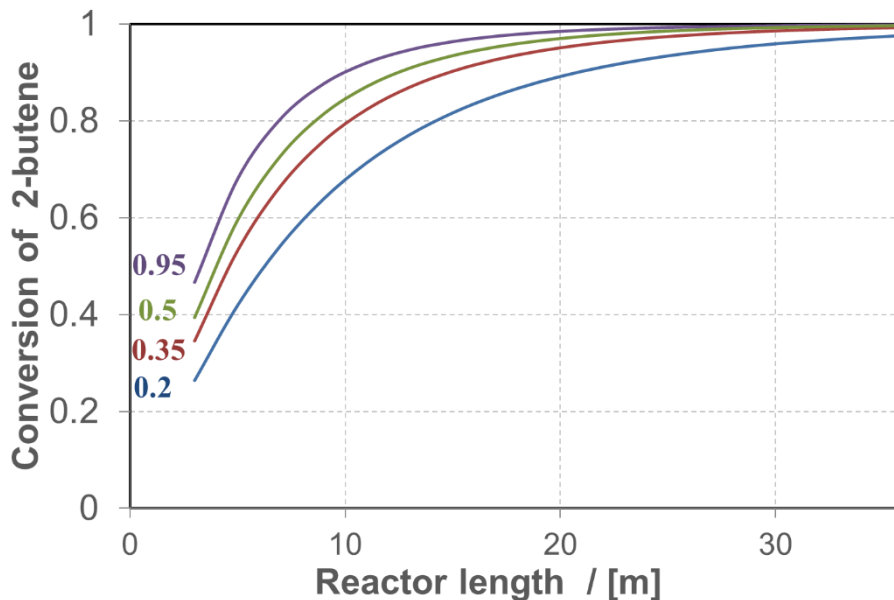


Figure 17. Conversia 2-butena în funcție de lungimea reactorului (diametrul = 3 m), pentru diferite valori ale fracției de purjare P

Pe măsură ce se recirculă mai mult inert, sunt necesare reactoare mai mari pentru a atinge un anumit nivel de conversie, cu un efect negativ asupra cheltuielilor de capital (CAPEX) și a costurilor de operare (OPEX). Rezultatele din Figura 72 arată că, pe măsură ce fracția de purjare P crește, instalația devine mai profitabilă. Un aspect interesant observat este că, la nivelurile următoare de analiză, potențialul economic scade cu mai mult de 50% față de EP1a inițial.

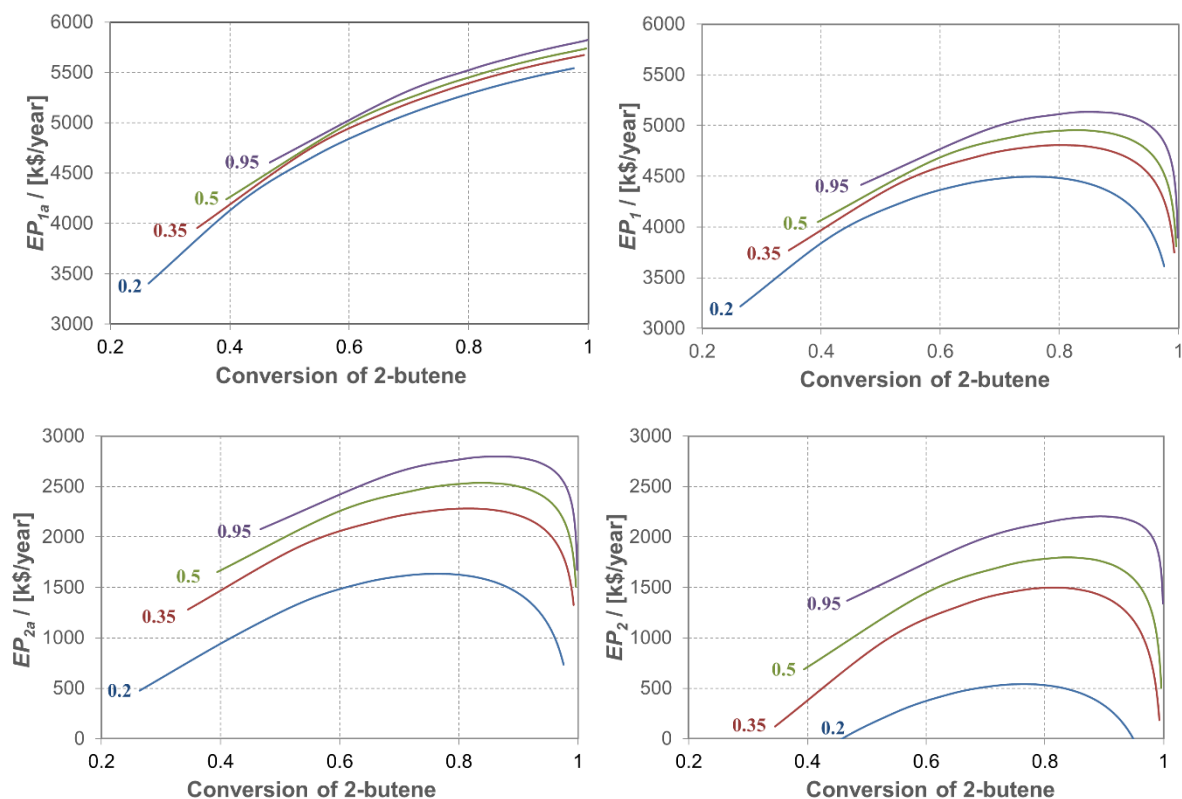


Figure 18. Potențialul economic versus conversia, la diferite fracții de purjare (US1a).

O fracție mare de purjare, $P=0,95$, generează un potențial economic de $EP_2 = 2250$ k\$/an, în timp ce conversia 2-butenei este $X_A = 90\%$, pentru o lungime a reactorului de $D = 3$ m, $L_R = 9$ m ($63,6$ m³). Cu toate acestea, pentru o fracție mai mică de purjare (de exemplu, $P = 0,2$), profitul scade considerabil de la un EP_1 inițial de 4500 k\$/an la $EP_2 = 500$ k\$/an la cel mai detaliat nivel. Altfel spus, alternativa de proces a trecut de la o soluție economică la un proiect cu abia profitabil

US1b: Reacție – Separare - Reciclu (A+B) cu separarea inertului după reactor

A doua alternativă presupune separarea inertului (n-butanului) de reactanți într-o coloană de distilare în avalul secțiunii de reacție. Se așteaptă costuri suplimentare pentru OPEX și CAPEX pentru această coloană de distilare, deoarece volatilitățile componentelor cheie sunt foarte apropiate. Cu toate că prețul n-butanului de înaltă puritate depășește costul materiei prime, separarea n-butanului de 2-butenă este atât de dificilă încât costurile asociate depășesc beneficiul. Rezultatele sunt prezentate în Figura 73.

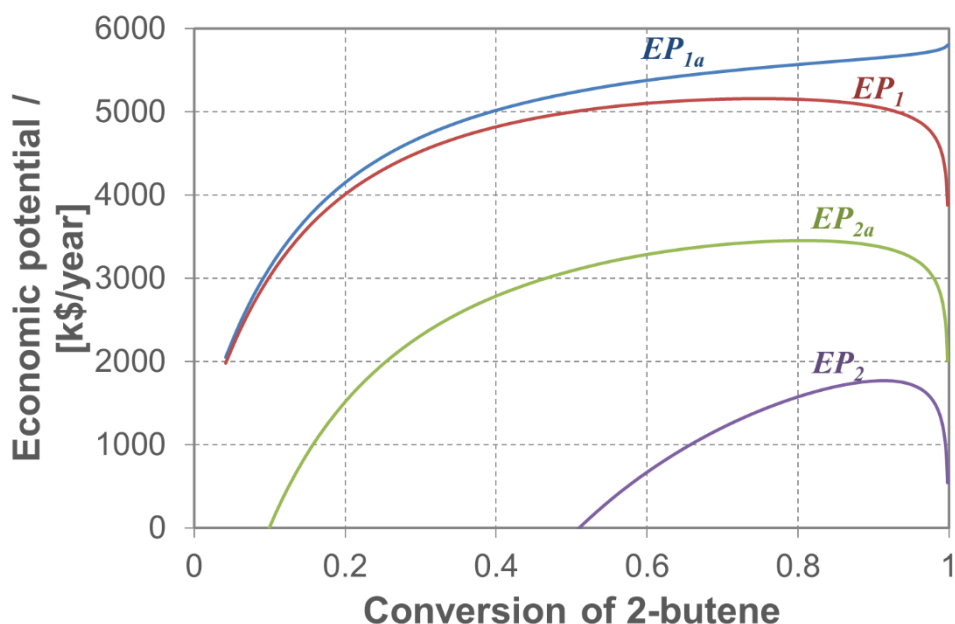


Figure 19. Potențial economic vs. conversia 2-butenei pentru US1b.

Analiza de sensibilitate arată că adăugarea unei noi coloane de distilare implică costuri mai mari și afectează dramatic potențialul economic final EP2. Separarea inertului (n-butan) și recircularea doar a reactanților (2-butena, 1-butena) nu are un efect pozitiv asupra costului total al instalației, în comparație cu alternativa anterioară US1a. Optimul este caracterizat de o lungime a reactorului de $L_R=9$ m, un diametru $D=3$ m și o conversie de $X_A=87\%$. La nivelul cel mai detaliat, se obține un potențial economic mai scăzut, de aproximativ 21% ($EP_2=1773$ k\$/an).

US1c: Reacție – Separare – Reciclu (A+B), cu separarea inertului înainte de reactor

În comparație cu celelalte două opțiuni prezentate mai sus, acest caz este interesant deoarece separarea inițială a inertului în amonte de reactor ar putea avea un efect pozitiv, eliberând echipamentul ulterior de circulația inutilă a inertului. Cu toate acestea, este și provocator deoarece separarea n-butanului / 2-butena este foarte dificilă din cauza volatilităților similare ale acestora. Când a fost determinat potențialul economic pentru diferite valori ale conversiei, s-a constatat (Figura 74) că structura US1c returnează un potențial economic maxim (EP_2) de doar 273 k\$/an. Explicația este că separarea inertului n-butan de 2-butena este foarte dificilă (din cauza volatilității relative scăzute), necesitând o coloană mare și un consum ridicat de utilități.

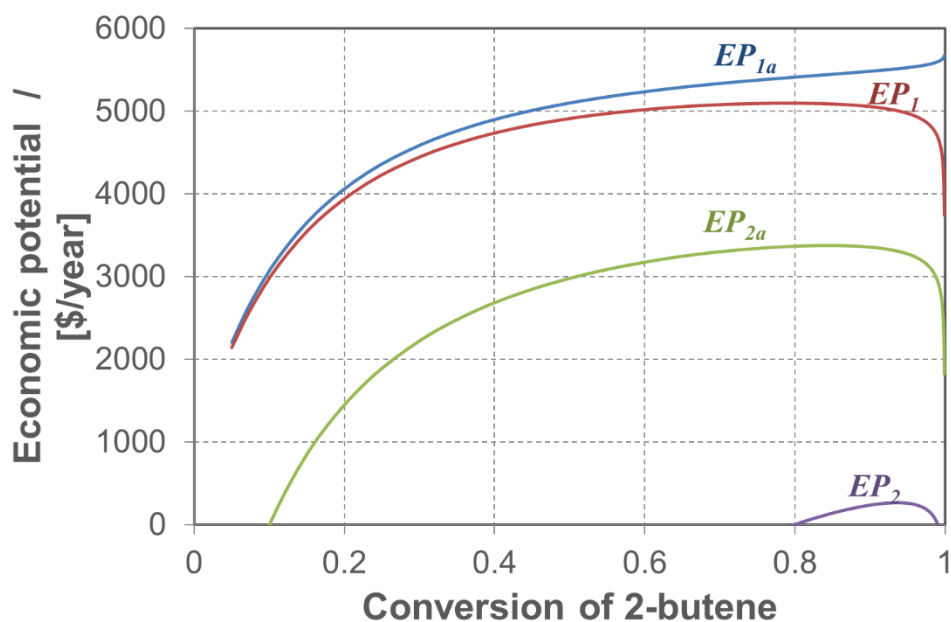


Figure 20. Potențial economic vs. conversia 2-butenei pentru US1c.

Scheme tehnologice fără recirculare

US2a: Reacție - Separare cu eliminarea inertului înainte de reactor

Alternativa de proces US2a generează un potențial economic ($EP_2=288$ k\$/an) similar cu cel observat pentru US1c (273 k\$/an). Motivul constă în faptul că regiunea optimă pentru US1c corespunde unei valori destul de mari de conversie, determinând o recirculare redusă, având astfel un impact redus asupra veniturilor. Similar cu varianta US1c, costurile pentru separarea inertului sunt foarte mari, afectând negativ profitabilitatea. Rezultatele sunt ilustrate la diferite niveluri de evaluare (Figura 75).

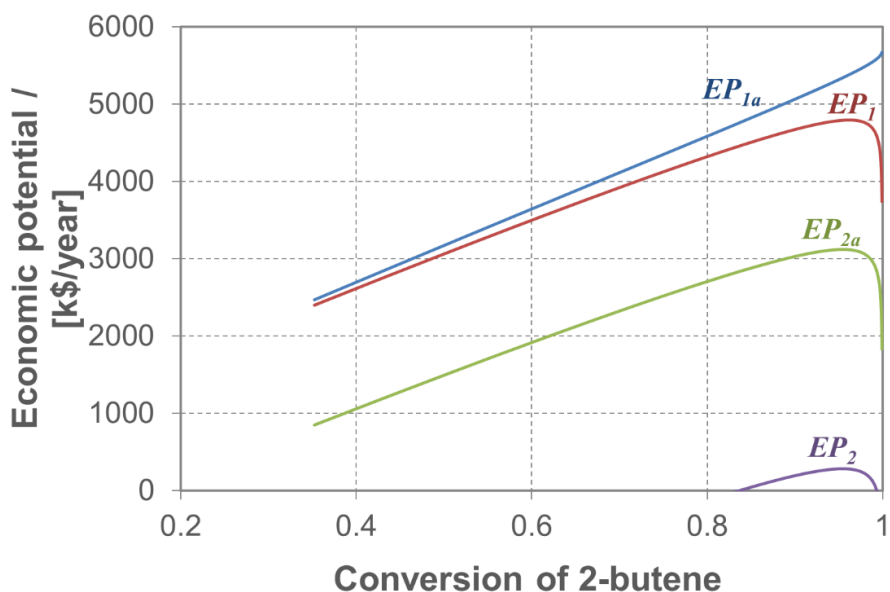


Figure 21. Potențial economic vs. conversia 2-butena pentru US2a

US2b: Reacție - Separare

În configurația fără recirculare, impactul asupra potențialului economic a fost analizat la diferite nivele și reprezentat pe un singur grafic (Figura 76). Declinul progresiv al potențialului economic a fost observat pentru EP1 și EP2a, similar cu celelalte opțiuni descrise anterior. Cea mai mare influență a fost constatată în cazul includerii costurilor echipamentelor de separare, generând o reducere a veniturilor de aproape 50%.

Surprinzător, această alternativă de proces s-a dovedit a fi cea mai profitabilă, generând 2300 k\$/an, în concordanță cu rezultatele obținute pentru alternativa US1a (Reacție – Separare – Reciclu), unde inertul a fost eliminat printr-o purjare de 95%.

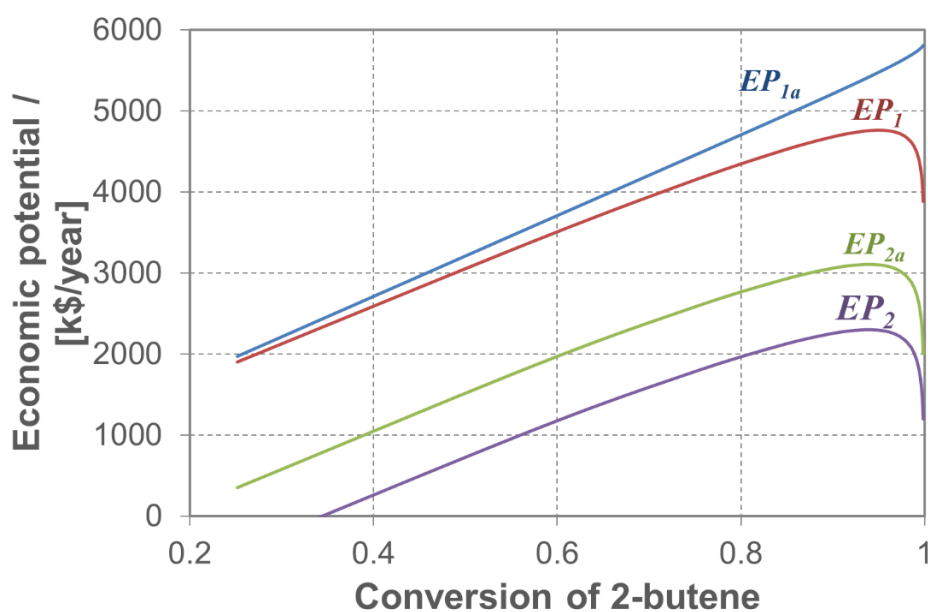


Figure 22. Economic potential vs conversion of 2-butene for US2b

Rata de profitabilitate a investiției (ROI) a fost calculată pentru a exprima profitul anual generat de capitalul investit

$$\%ROI = \frac{\text{Annual net profit}}{\text{Invested capital}} \cdot 100\% = \frac{EP2}{CAPEX} \cdot 100\% \quad (0.4)$$

Rezumatul cu regiunile optime din analiza economică pentru cele cinci alternative de schemă tehnologică studiate este prezentat în Tabelul 15. Cea mai mare rată de profitabilitate a investiției (ROI) de 35% este obținută de schema tehnologică Reacție – Separare US2b.

Table 4. Rezultatele soluțiilor optime de schemă tehnologică pentru procesul de metateză a olefinelor

	US1a (P = 0.95)	US1a (P = 0.2)	US1b	US1c	US2a	US2b
Optimal conversion X_A	90%	80%	87%	92%	96%	93%
Economic potential EP2 / [k\$/year]	2250	500	1773	273	288	2300
Return of investment ROI	32%	7%	26%	4%	4%	35%

Optimizarea economică a instalației

Secțiunea de preîncălzire a materiei prime este evaluată cu obiectivul selectării temperaturii optime a cuptorului pentru a minimiza TAC, având în vedere o perioadă de recuperare de 3 ani, conform standardelor industriale. Costurile adiționale, precum construcția, instrumentația, conductele și activitățile de punere în funcțiune, justifică o perioadă de recuperare conservatoare.

Variabilele de optimizare includ aria de transfer de căldură a schimbatorului de incalzire materie prima – effluent reactor (FEHE) și sarcina cuptorului, având impact asupra cheltuielilor de capital și consumului de gaz de combustie. Calculațiile de sensibilitate în Aspen Plus au relevat că temperatura optimă de intrare în cuptor este de 450°C, minimizând TAC la 305 k\$/an.

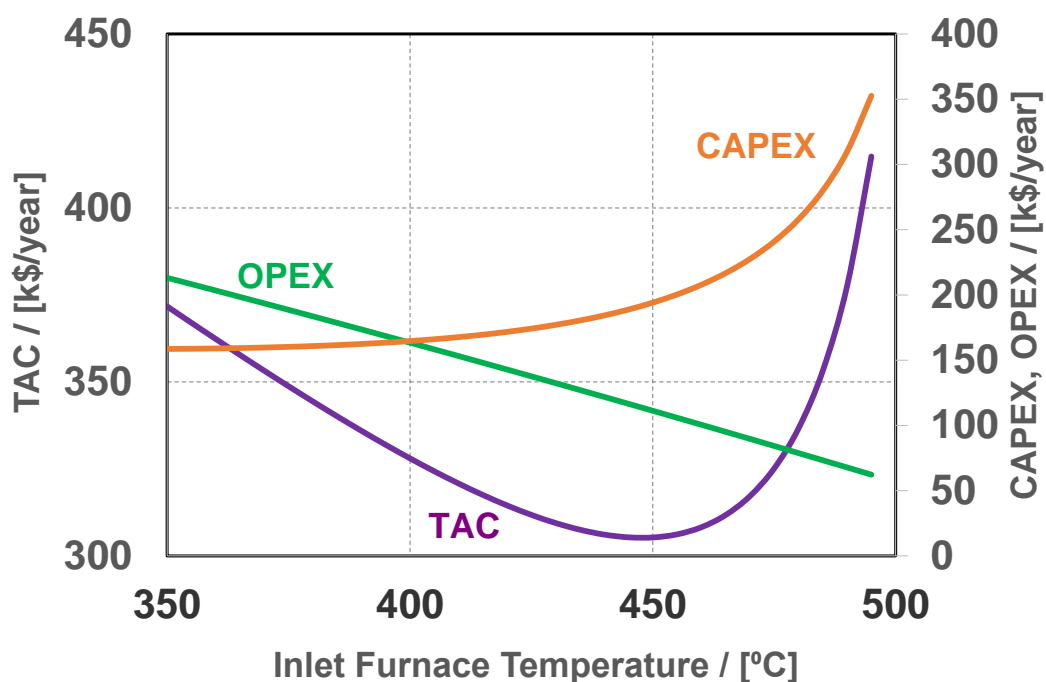


Figure 23. Furnace inlet temperature versus TAC, OPEX, CAPEX

A doua etapă a studiului de optimizare se referă la reducerea consumului de energie, și anume, coloanele de distilare. Schema simplificată a procesului (Figura 78) arată secțiunile luate în considerare pentru studiul de optimizare. Optimizarea coloanelor a constat în determinarea costului annual total minim (TAC) în funcție de mai multe obiective, cum ar fi: presiunea de la varful coloanei, temperatura de alimentare, numărul de talere pentru coloana de distilare, locația talerului de alimentare, condensarea laterală sau refierbator lateral. Ecuațiile de cost sunt implementate în FORTRAN din Aspen Plus pentru calculele economice.

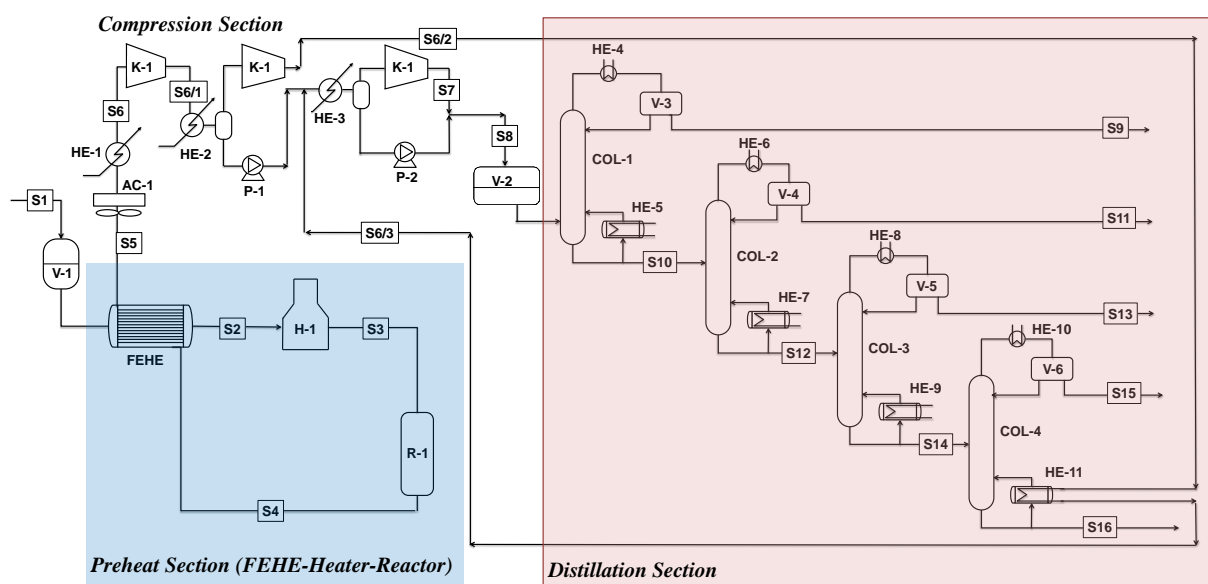


Figure 24. Schema tehnologică simplificată pentru procesul de metateză a 2-butenei.

Bibliografie selectivă

Andrei, M.A., Bildea, C.S. Conceptual design of propylene production by metathesis of 2-butene, UPB Sci. Bull., series B, 80(1), 47-62, 2018.

Bhuiyan, T. I., Arudra, P., Hossain, M., Akhtar, M., Aitani, A., Abudawoud, R., Al-Khattaf, S. Kinetics modelling of 2-butene metathesis over tungsten oxide containing mesoporous silica catalyst, The Canadian Journal of Chemical Engineering, 92(7), 2014, 1271-1282.

Chauvin, Y., 2007. Olefin Metathesis: the Early Days (Nobel Lecture 2007), Adv. Synth. Catal., 349, 27-33.

Dimian, A.C., Bildea, C.S., 2018, Energy efficient methanol-to-olefins process,

Chemical Engineering Research and Design, <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2017.11.009>

Dimian, A.C., 2003. Integrated Design and Simulation of Chemical Processes, Elsevier

Dimian, A.C., Bildea, C.S., Kiss, A.A., 2014, Integrated Design and Simulation of Chemical Processes (second edition), Elsevier.

Dimian, A.C., Bildea, C.S., Chemical Process Design – Computer Aided Case Studies, Wiley 2008.

Douglas, J., Conceptual Design of Chemical Processes, McGraw-Hill, 1988

Lefebvre, F., 2002. Applications of the olefin metathesis reaction to industrial processes, in E. Khosravi, Szymanska-Buzar (eds), Ring Opening Metathesis Polymerisation and Related Chemistry, Springer.

Luyben, W.L., 2011. Principles and Case Studies of Simultaneous Design, chapter Economic Optimization, John Wiley & Sons, Inc..

https://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/2005/

Controlul procesului de metateză a 2-butenei

Rezumat

Acest capitol prezintă comportamentul dinamic și răspunsul sistemului de control al procesului de metateză a 2-butenei, utilizând simularea dinamică în Aspen Dynamics. Două strategii de control sunt implementate: controlul convențional cu reglare după abatere (feedback) și controlul predictiv pe bază de model (MPC). Sunt detaliate etapele de dezvoltare a structurilor de control și ajustarea buclelor de reglare. Se evaluează comportamentul tranzitoriu al instalației cu o singură trecere, Reacție-Separare, pentru variații ale debitului de +/-10%, iar rezultatele sunt prezentate grafic.

Controlul liniar predictiv pe bază de model (LMPC) este configurat pentru a acționa direct asupra valorilor de referințe ale buclele de reglare. Acest lucru se realizează prin co-simulare între Aspen Dynamics și Simulink/MATLAB. Performanța strategiei de control bazată pe model este comparată cu răspunsul în buclă deschisă al instalației dinamice utilizând indici de eficiență. LMPC ajustează debitele produselor, în special pentru etilena și propilena. În acest proces, LMPC depășește performanța controlului conventional.

Control tradițional al procesului

Control structure description

Dinamica și controlul instalației au fost evaluate cu simularea dinamică în Aspen Dynamics. Buclele de reglare au fost adăugate automat de software-ul Aspen, însă pentru control eficient, s-au introdus și alte bucle de reglare. Amestecul de alimentare, direcționat către secțiunea de reacție, trece prin schimbul de căldură FEHE și cuptor. Temperatura de intrare în reactor este ajustată prin buclă de reglare de temperatură în funcție de sarcina cuptorului. Deoarece reacția necesită presiune scăzută și temperatură înaltă, un compresor asigură circulația produselor în faza de vapori. Căldura de la efluent reactorului este recuperată și preîncălzește materia primă, și apoi este răcită înainte de intrarea în compresor. Un buclă de reglare de temperatură menține temperatura de intrare în compresor ajustând răcitorul de aer și cel de apă. Căldura generată în compresor este recuperată în reparatorul de de-pentanizare. Efluentul comprimat este direcționat către secțiunea de distilare.

În secțiunea de distilare, fiecare coloană are bucle de control pentru presiune și nivel. Prima coloană separă etilena, iar temperatura de reflux este controlată indirect, influențând debitul de reflux. Alte trei coloane urmează, fiecare având un control în cascadă pentru menținerea purității produsului. Controlul nivelului se bazează pe timp mort și este eficient pentru rapoarte mici între reflux și fierbere. Toate buclele de reglare sunt de tip PI, iar cele de compoziție sunt ajustate cu teste de relee-feedback.

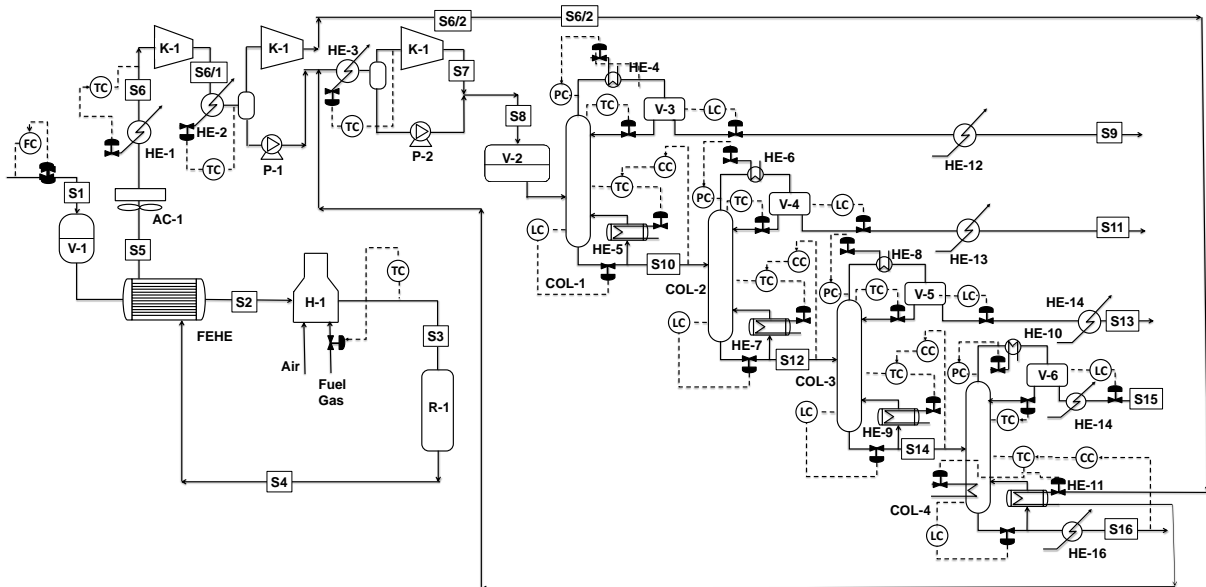


Figure 25. Procesul de metateză al 2-butenei - schemă de flux și control pe întreaga instalație

Răspunsul dinamic al întregii instalații

A fost investigată controlabilitatea și flexibilitatea dinamică a instalației, luând în considerare debitul molar de alimentare ca perturbație.

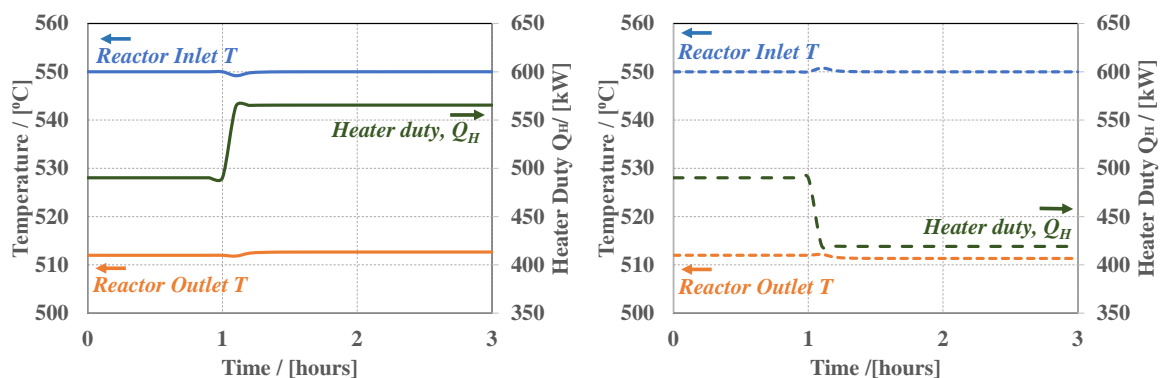
Răspunsul dinamic și stabilitatea reactorului au fost investigate în urma variațiilor de $\pm 10\%$ ale debitului de alimentare (FF). Rezultatele sunt prezentate în Figura 83, unde liniile continue reprezintă o creștere de 10% a debitului de alimentare, iar liniile întrerupte reprezintă o scădere de 10% a debitului de alimentare proaspăt. Starea nominală stabilă a fost menținută timp de 1 oră, iar apoi a urmat perturbarea debitului de alimentare. Temperatura de intrare a reactorului (550°C) a fost menținută în mod corespunzător de bucla TC, ajustând sarcina cuptorului. Se poate observa că sistemul de control a reușit să aducă procesul la o nouă stare stabilă în câteva minute de la perturbație, cu o variație a temperaturii de ieșire a reactorului de mai puțin de 1°C la variația debitului de alimentare de $\pm 10\%$, menținând aceeași temperatură de intrare a reactorului. Așa cum era de așteptat, conversia inițială a 2-butenei a fost $x_{2B/P} = 90.4\%$ crescută la $92,2\%$ cu un flux de alimentare mai mic (de exemplu, -10% FF) și a reacționat în direcția opusă la un flux de alimentare mai mare (de exemplu, $+10\%$ FF), cu aceeași deviere a conversiei, respectiv $88,5\%$.

Variația randamentului (η) a fost studiată luând în considerare propilena (C_3) ca produs de interes și 2-butena ca reactiv.

$$x_{2B} = 1 - \frac{F_{2B,in}}{F_{2B,out}} \quad (1.1)$$

$$\eta_{C_3/2B} = \frac{F_{C_3}}{F_{2B,in}}$$

Unde, $F_{2B,in}$ și $F_{2B,out}$ reprezintă fluxurile molare de 2-butena la intrarea și ieșirea reactorului, iar F_{C_3} reprezintă debitul molar de propilenă la ieșirea reactorului. Mai mult reactant proaspăt ($F_{2B,in}$) alimentat în sistem scade randamentul (η) cu aproximativ $0,5\%$, cu efectul opus pentru reducerea reactivului proaspăt.



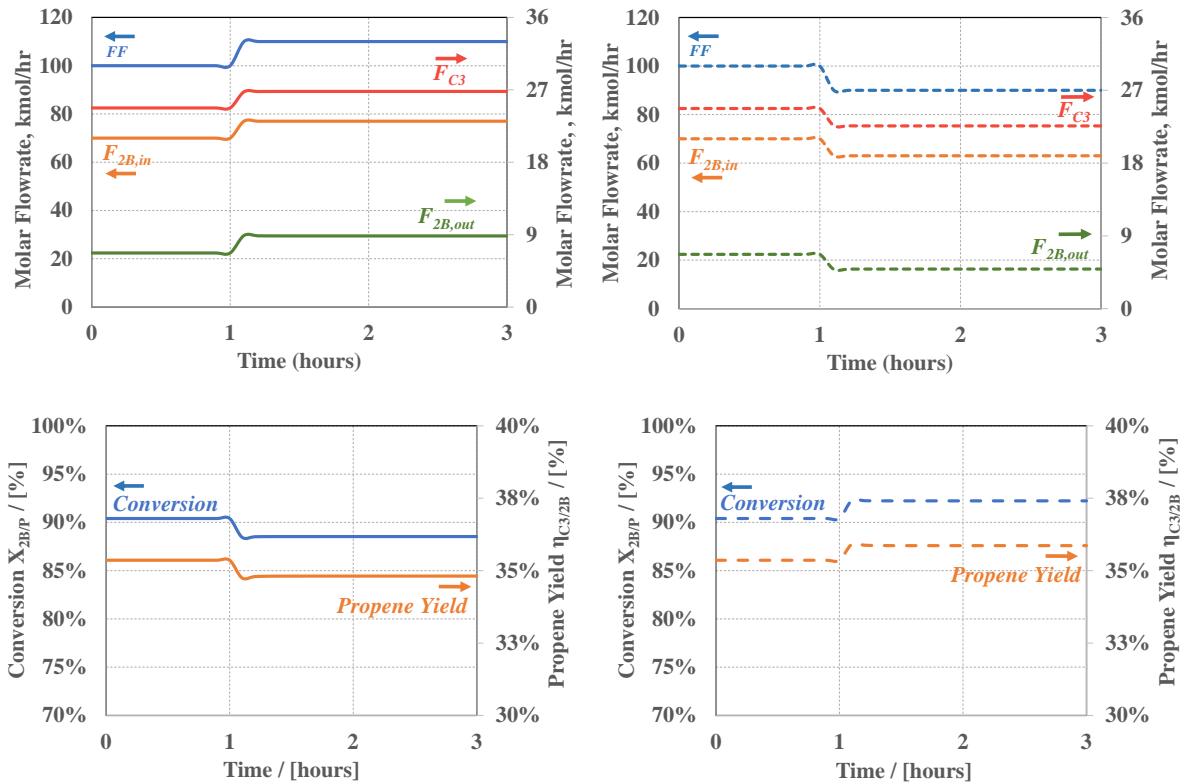


Figure 26. Rezultatele și performanța dinamică a reactorului în urma perturbării debitului de alimentare (linii continue +10%FF și linii întrerupte -10%FF)

Deoarece reacția este endotermică, obiectivul a fost și de a investiga dacă există vreo posibilitate de "stingere" a reactorului. Din fericire, nu s-a constatat nicio problemă de acest gen, și desigur, nu s-a evaluat nicio problemă referitoare la creșterea bruscă de temperatură sau reacții neregulate, caracteristice reacțiilor exoterme. Variabilele studiate pentru perturbarea debitului de alimentare au fost sarcina cuptorului, temperatura de intrare și ieșire a reactorului.

Un alt factor important este controlul separării asupra specificațiilor produselor.

Prima coloană COL-1 separă etilena pe la varf, iar restul produselor constând în olefine C2+ în blazul coloanei. Starea de regim stabil a fost menținută timp de 1 oră, după care debitul de alimentare de 100 kmol/h a fost variat cu +/- 10%. Instalația a atins o nouă stare stabilă în mai puțin de cinci ore, iar compoziția etilenei în partea superioară x_{D1} , a fost bine menținută la 99,9% fracțiune molară fără oscilații semnificative. Impuritatea de etilenă în partea de jos a coloanei x_{B1} a fost foarte bine menținută, având un efect neglijabil asupra compozițiilor din blaz. Se poate remarca faptul că buclă de reglare dual de compoziție, temperatură și compoziție a avut o performanță foarte bună.

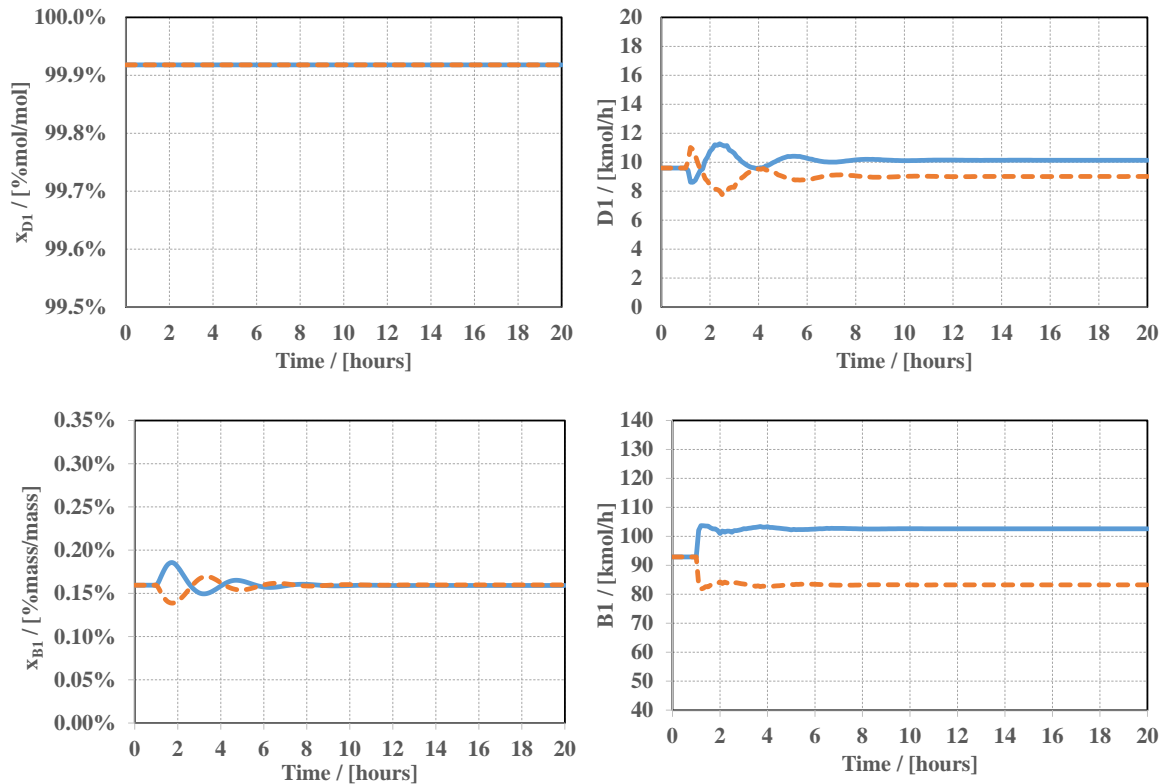
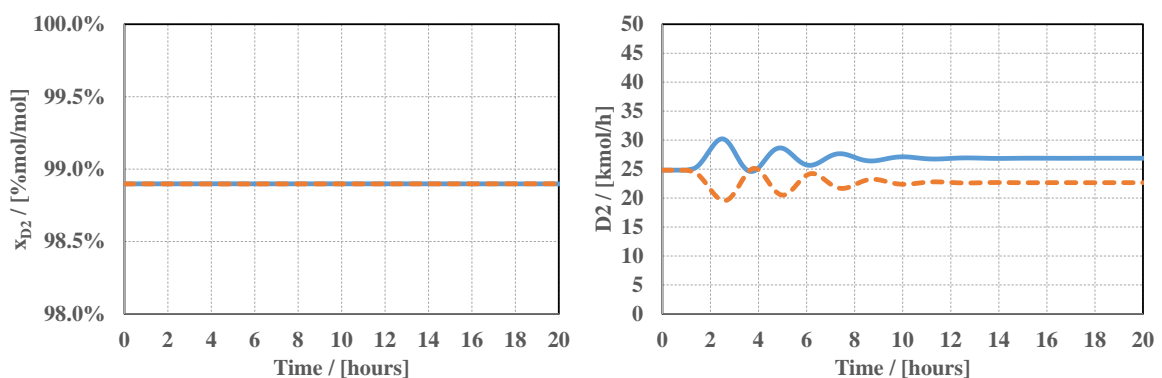


Figure 27. Perturbațiile de alimentare pentru COL-1 cu schimbări bruste ale alimentării (linii continue +10%; linie punctată -10%)

În a doua coloană de distilare, COL-2, produsul de propilenă este separat pe la partea superioară. Specificația de puritate a propilenei x_{D2} de 99% fracțiune molară a fost bine menținută fără efecte vizibile asupra purității propilenei. Debitele de distilat și blaz (D2, B2) au arătat oscilații minore. Propilena transferată în blazul coloanei COL-2 a fost neglijabilă datorită bunei performanțe a buclă de reglareaului de compoziție cascaded cu temperatura.



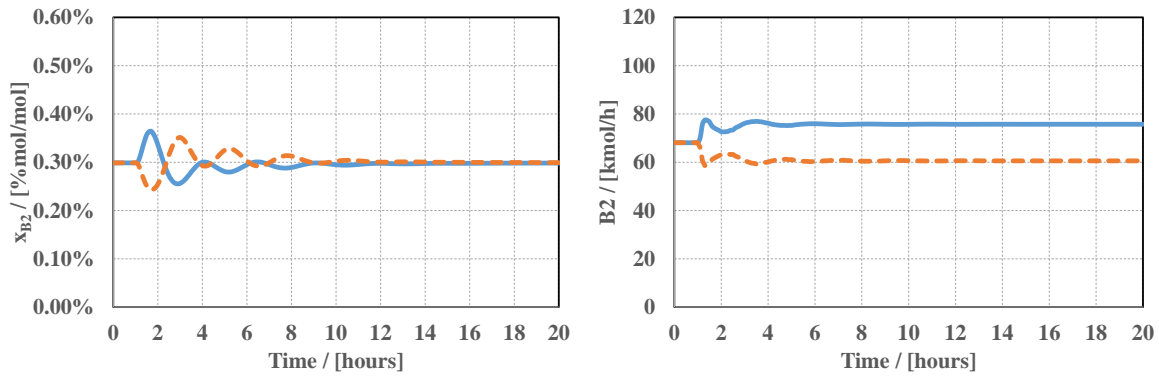


Figure 28. Perturbațiile de alimentare pentru COL-2 cu schimbări bruște ale alimentării (linii continue +10%; linie punctată -10%)

Așa cum era de așteptat, timpul de retenție în fiecare vas influențează și adaugă un interval de timp mai mare pentru coloanele ulterioare pentru ajustare. Pentru coloana de distilare, COL-3, un nou regim staționar este atins după aproximativ 6 ore de la inițierea variației de alimentare la 1 oră. Debitul de distilat D3 constă într-un amestec C4 (2-butena, n-butane și 1-butene), iar concentrația impurităților este menținută în distilat, pentru a evita contaminarea cu produse mai grele (de exemplu, pentenă C5). Impuritatea din distilat este bine menținută cu buclă de reglare de temperatură, arătând insensibilitate la variațiile de alimentare. Compoziția fundului este controlată printr-un buclă de reglare de compoziție-temperatură setat pentru minimizarea concentrației de 2-butena în baza coloanei COL-3, x_{B3} . Compoziția blazului este ajustată destul de rapid, în 6 ore.

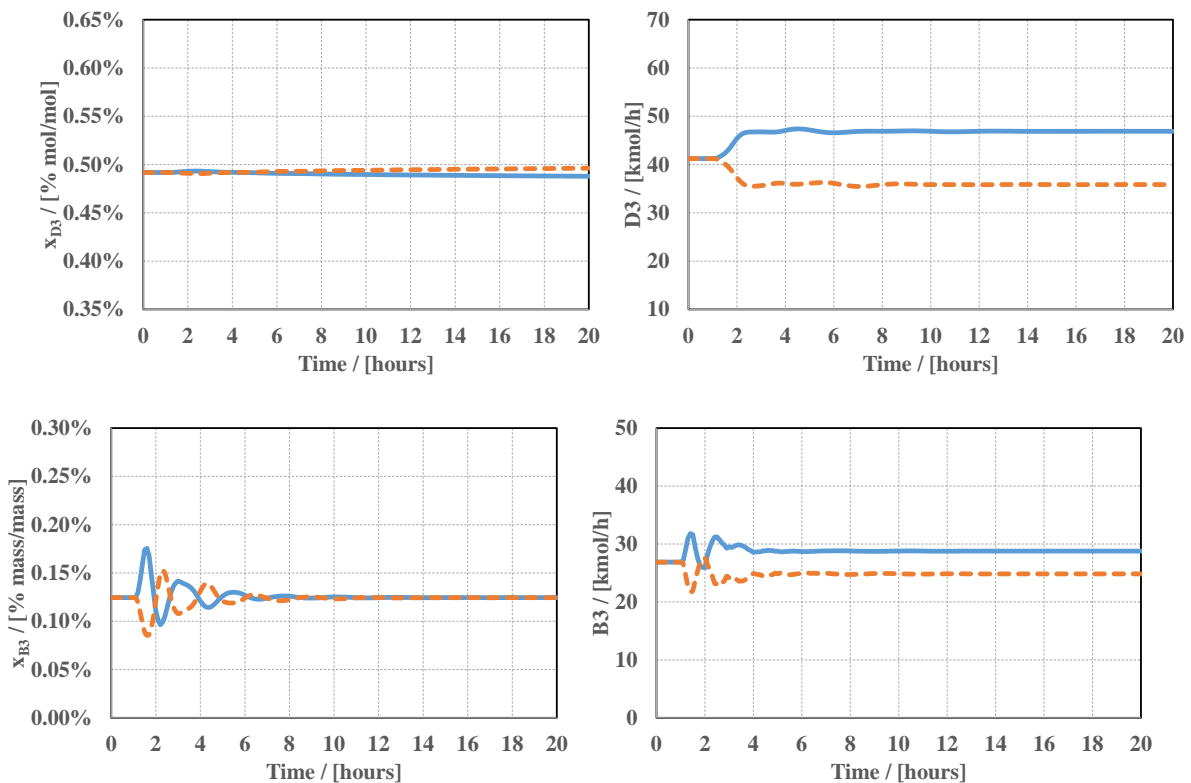


Figure 29. Perturbațiile de alimentare pentru COL-3 cu schimbări bruște ale alimentării (linii continue +10%; linie punctată -10%)

Comportamentul dinamic al COL-4 arată o performanță bună, chiar dacă timpul până la atingerea stării stabile este în jur de 9-10 ore, în mare parte datorită perturbațiilor provenite de la coloana de distilare în amonte, COL-3. Compoziția C5 în vârful coloanei, x_{D4} , este menținută destul de constantă la 99% fracție molară, în timp ce compoziția hexenei C6 în produsul din blaz prezintă câteva oscilații care, după câteva ore, revin la specificația de 99% fracțiune molară.

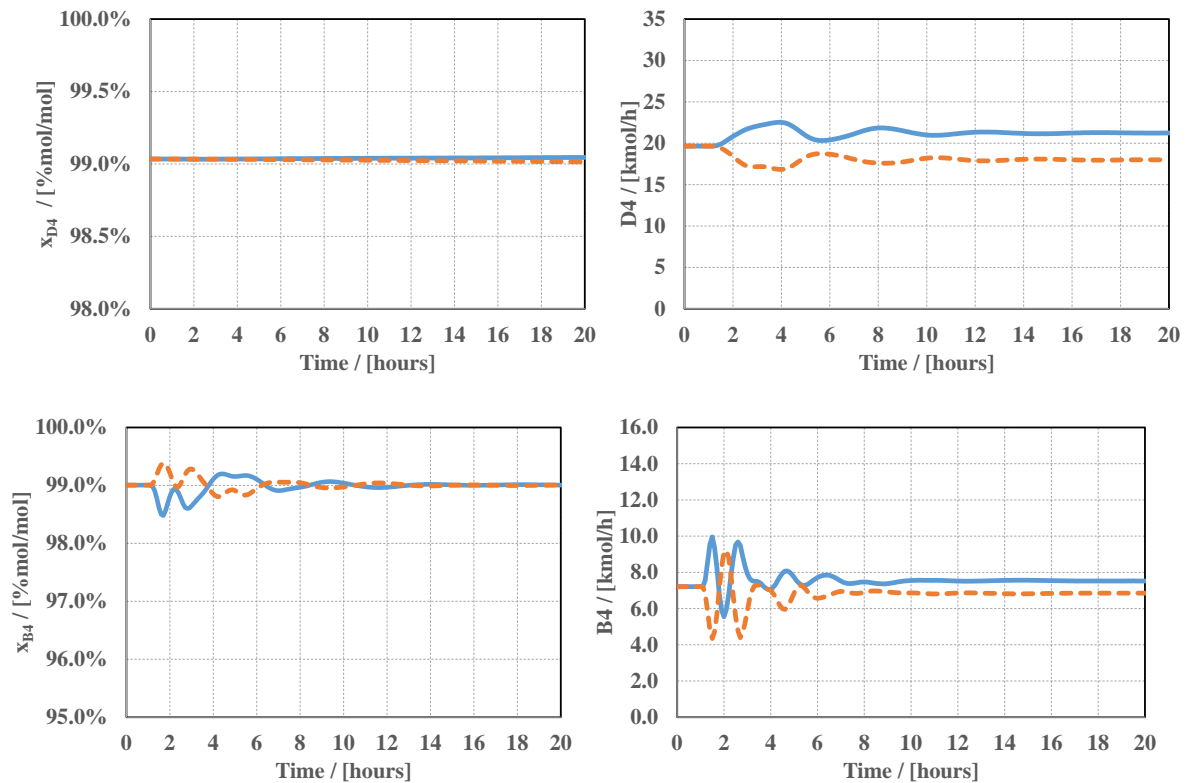


Figure 30. Perturbațiile de alimentare pentru COL-4 cu schimbări bruște ale alimentării (linii continue +10%; linie punctată -10%)

Control predictiv bazat pe model

Proiectarea și acordarea buclă de reglareaului predictiv de model liniar (LMPC)

Sistemele de control predictiv de model sunt proiectate pe baza unui model matematic al instalației. Modelul linear folosit în sistemul de control conține matrici de stare, determinate prin identificare de process în buclă deschisă, folosind datele de intrare-ieșire generate din simularea dinamică Aspen. Formularea și validarea modelului spațiu-stare sunt realizate în MATLAB, iar mediul de co-simulare între Aspen Dynamics și MATLAB/Simulink este utilizat pentru a facilita conexiunea dintre simularea dinamică și blocul de control predictiv de model din Simulink.

În aplicațiile industriale, testele de treaptă în direcții opuse (teste de impuls) sunt în mod obișnuit executate pe instalația în funcțiune pentru a identifica un model de proces valid necesar proiectării buclă de reglării predictiv de model (MPC). În acest caz, simularea dinamică din Aspen Dynamics acționează ca instalație "reală" pentru a extrage datele de proces necesare pentru configurarea și aplicarea unui sistem MPC 2 x 2 prin co-simularea Aspen Dynamics și MATLAB/Simulink. În mod particular, pentru acest studiu, teste de impuls sunt efectuate pentru două variabile de intrare cu răspunsuri în buclă deschisă, debitul de alimentare și temperatura la intrarea reactorului, respectiv denumite variabile manipulate (MV). Debitul de etilenă și de propilenă reprezintă variabilele de ieșire sau controlate (CV); aceste ținte de producție sunt controlate/setate de utilizator prin intermediul MPC-ului. Lista variabilelor manipulate și controlate este prezentată mai jos. Implementarea modelului linear predictiv (LMPC) este realizată într-o structură cu două nivele, respectiv nivelul de bucle PID descentralizate "tradiționale" care stabilizează variabilele principale ale procesului, și LMPC care ajustează valorile de referință ale buclilor de reglare.

Table 5. Valorile de intrare/ieșire în instalații de măsură de inginerie

Input/ Output	Nominal value	Minimum	Maximum	Dimensionless Nominal value	Type
Feed flow / [kmol/h]	100	75	125	50	Manipulated variable (MV1)
Reactor inlet temperature / [°C]	550	450	650	50	Manipulated variable (MV2)
Ethylene flow / [kmol/h]	9.6	4.8	14.4	50	Controlled variable (CV1)
Propylene flow / [kmol/h]	24.5	16.1	33.5	50	Controlled variable (CV2)

Răspunsul celor două ieșiri este înregistrat, iar un model liniar este obținut din datele de simulare input-output. Ulterior, cele două modele liniare sunt concatenate într-un singur model liniar final folosind MATLAB. Ordinea modelului identificat este de 24, iar verificarea stabilității este efectuată; în special, se verifică valorile proprii ale matricei A. În Figura 88 sunt afișate rezultatele din modelul identificat și datele de simulare, unde este utilizată metoda ciclului de creștere alternând schimbarea pasului în direcții opuse cu +/-10% din variabila de intrare.

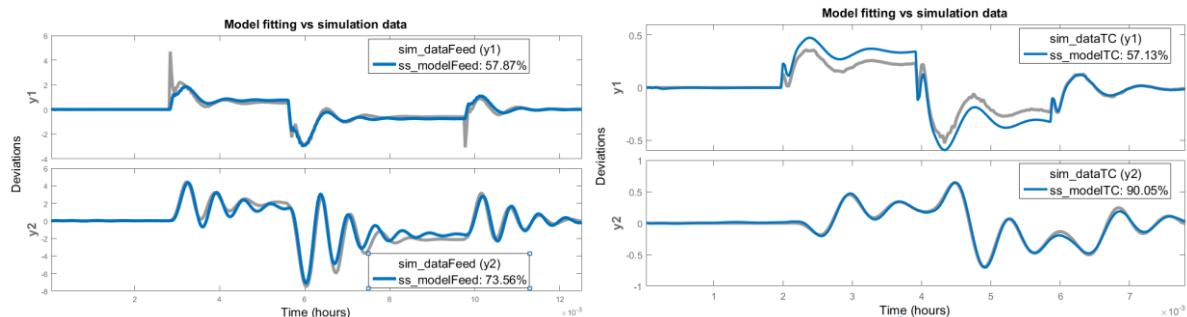


Figure 31. Model fitting vs simulation data (left – temperature model, right – feed model)

Modelele sunt dezvoltate pe baza abaterilor de la valorile nominale pentru a simplifica complexitatea modelului procesului și, în consecință, controlerul bazat pe model. Rezultatele

arată o bună acuratețe între estimările modelului (ss_modelFeed și ss_modelTC) și datele de ieșire ale simulării procesului (sim_dataFeed și sim_dataTC).

Pentru acest studiu, este utilizat mediul Simulink în co-simulare cu Aspen Dynamics pentru a facilita conexiunea între simularea dinamică și buclă de reglare bazată pe model configurată în MATLAB/Simulink. MATLAB apelează simulatoarele de proces folosind serverul de automatizare ActiveX și permite conexiunea prin mediul Simulink și Aspen Dynamics. Problemele de compatibilitate între cele două software-uri, MATLAB și Aspen Dynamics, ar trebui să fie luate în considerare cu atenție, altfel comunicarea nu este realizată.

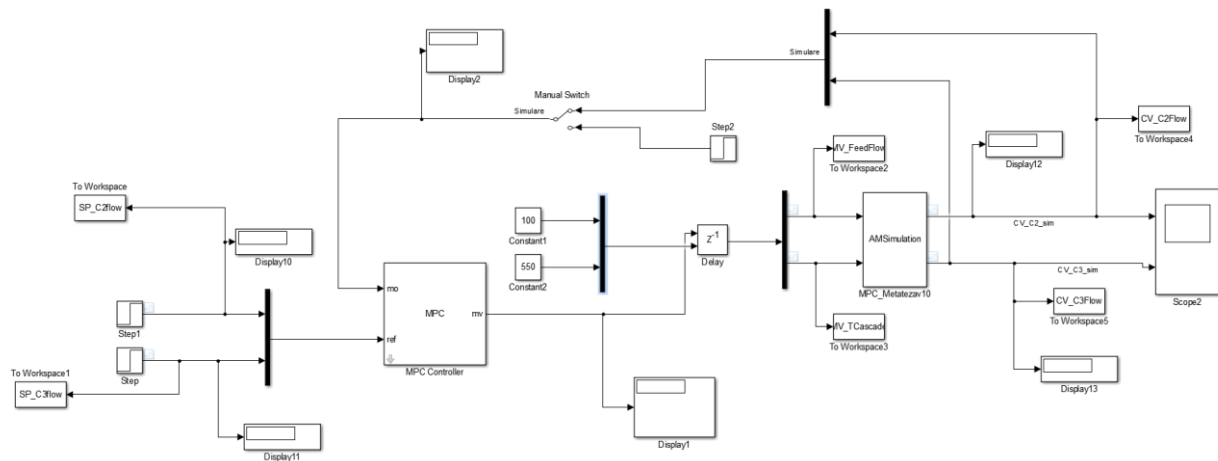


Figure 32. Schema Simulink al modelului predictiv conectat la simularea dinamică Aspen.

Performanța răspunsului dinamic al întregii instalații

Performanța controlerului predictiv MPC este evaluată prin teste de reglare a perturbațiilor de tip pas aplicate variabilelor controlate, generate după 1 oră de regim stabil. Două seturi de date sunt generate, pentru o schimbare bruscă de +10% (linie continuă albastră) aplicată simultan ambelor variabile controlate (de exemplu, debitul de etilenă și debitul de propilenă) și un alt test constând într-o schimbare de -10% (linie punctată portocalie) la aceleași două (2) variabile controlate, respectiv debitul de etilenă și debitul de propilenă. Performanța LMPC este comparată cu răspunsul în buclă deschisă din datele de simulare dinamică. În testul în circuit deschis, variabilele manipulate, debitul de alimentare și temperatura de intrare a reactorului, sunt modificate prin aplicarea unui pas astfel încât variabilele de ieșire (debitul de C2 și debitul de C3) să fie echivalente cu +/-10% din valorile lor de regim stabil. În acest fel, cele două strategii de control pot fi evaluate prin indici de performanță precum Eroarea Pătratică Integrală (ISE), Eroarea Medie Pătratică (MSE), Eroarea Absolută Integrală (IAE), Eroarea Maximă (PE) sau depășire, în scopul evaluării performanței.

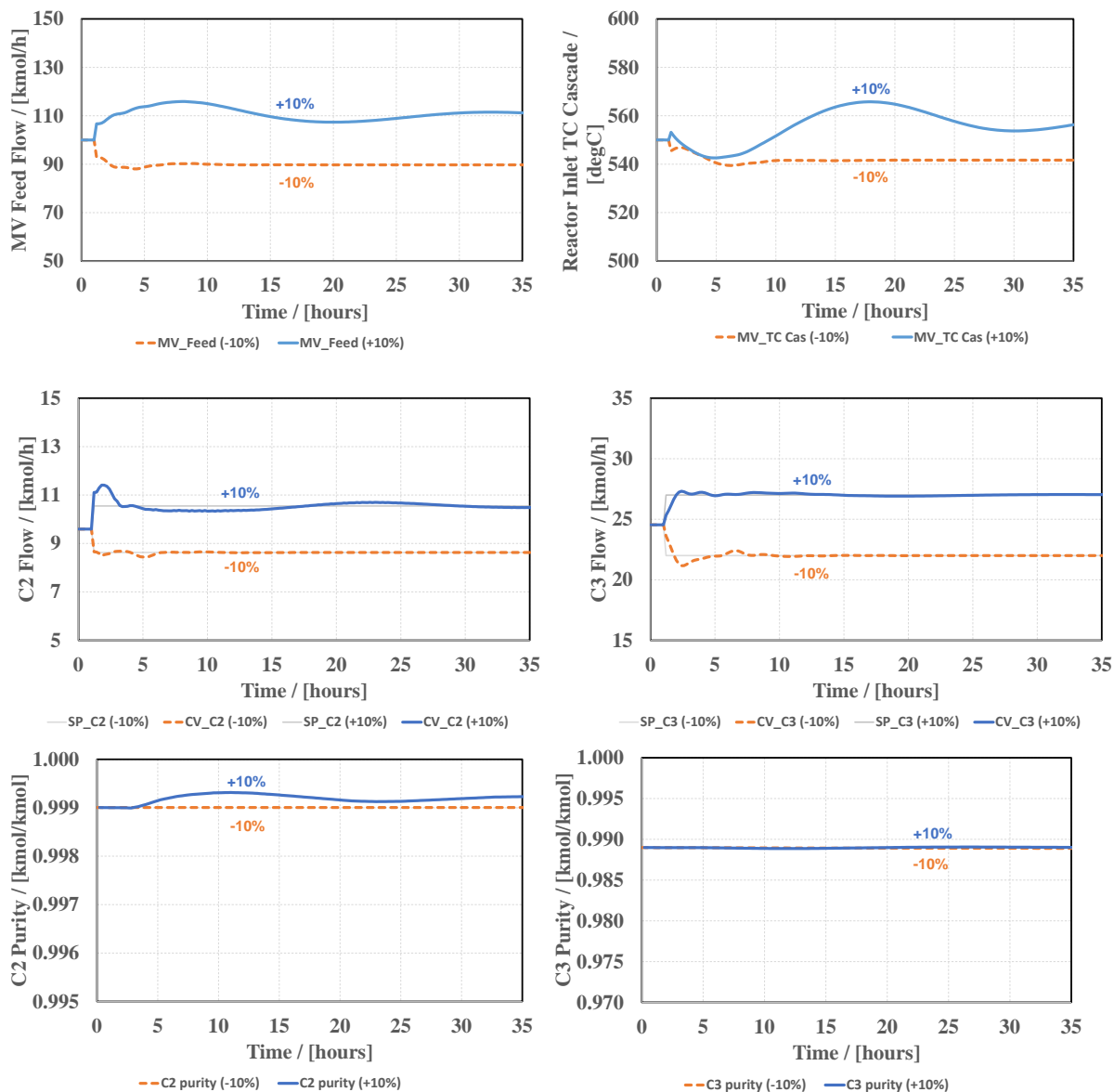


Figure 33. LMPC - Profiluri ale debitelor și purităților variabilelor controlate, debitul de alimentare și temperatura de intrare a reactorului

În Figura 90, controlerul avansat arată o atingere stabilă și rapidă a debitelor setate de producție într-o perioadă rezonabilă (<5 ore). Depășirea valorilor setate ale debitelor este neglijabilă, confirmată și de controlul adecvat al purităților produselor de etilenă și propilenă. Oscilațiile debitului de alimentare și ale temperaturii de intrare a reactorului sunt de așteptat, deoarece aceste variabile sunt modificate de către model pentru a atinge noile ținte ale debitelor de producție. Se observă că pentru o modificare de +10% a debitului de producție, modelul orientează temperatura inițială a reactorului într-o direcție opusă și după câteva ore, LMPC corectează această variabilă manipulată în direcția corectă, astfel încât ambele ținte ale variabilelor controlate să fie atinse.

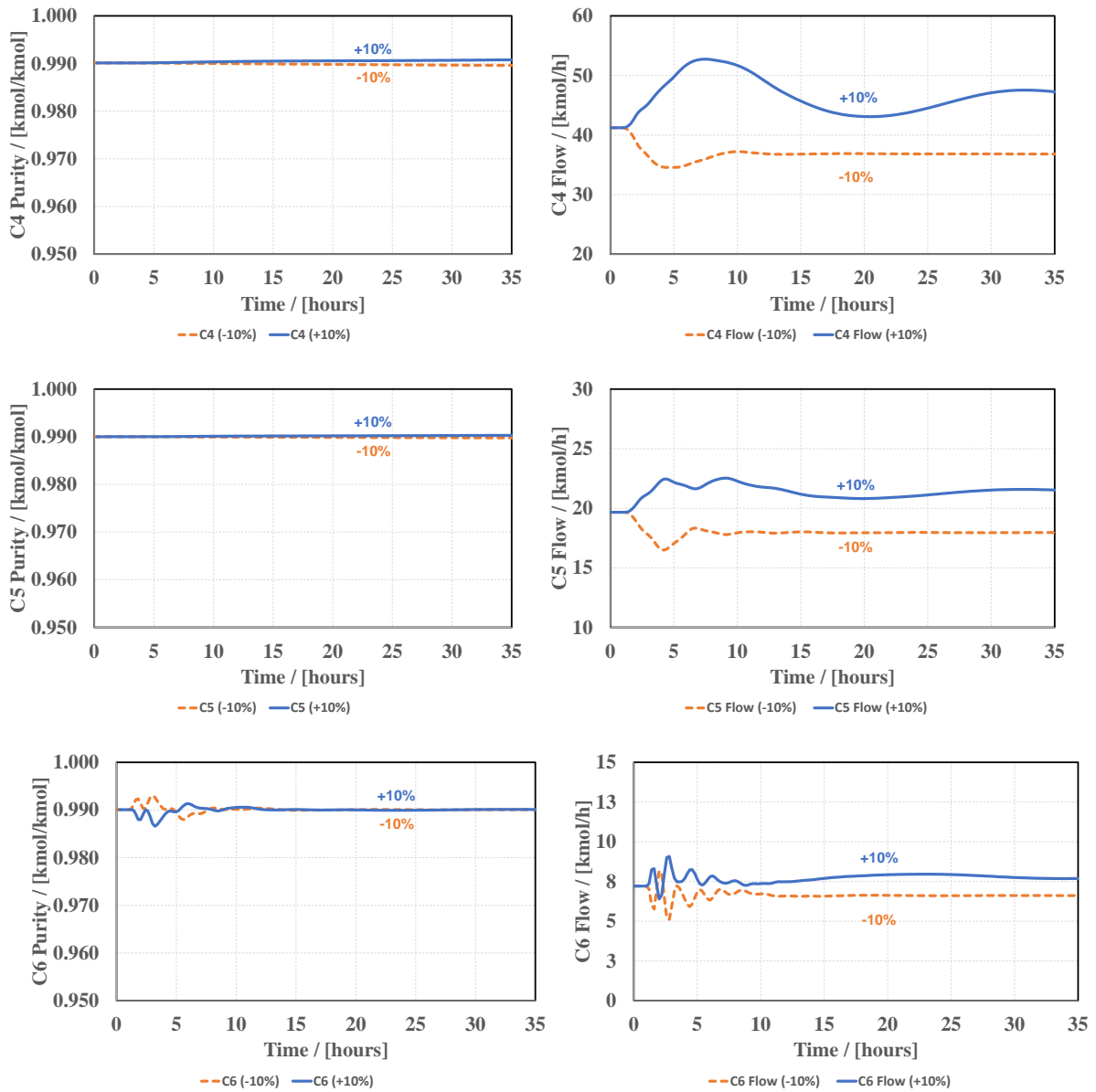
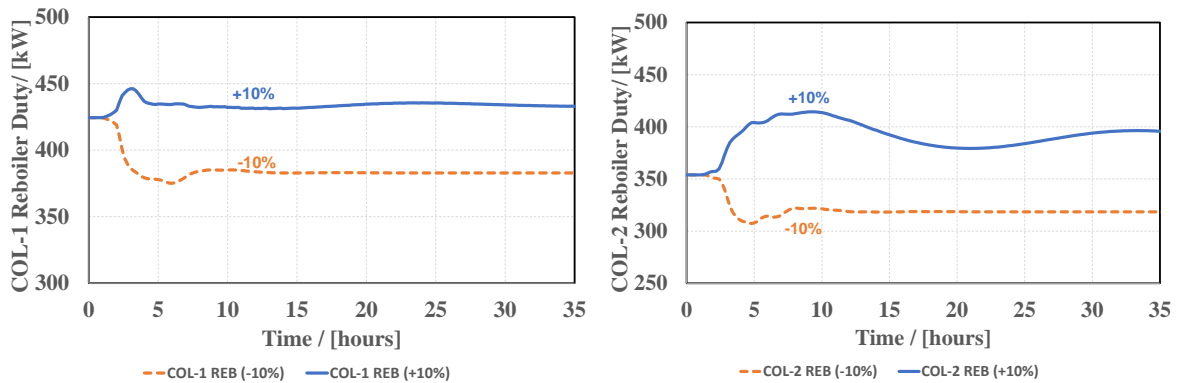


Figure 34. LMPC – Profiluri ale debitelor de produs și purități (C4, C5, C6)



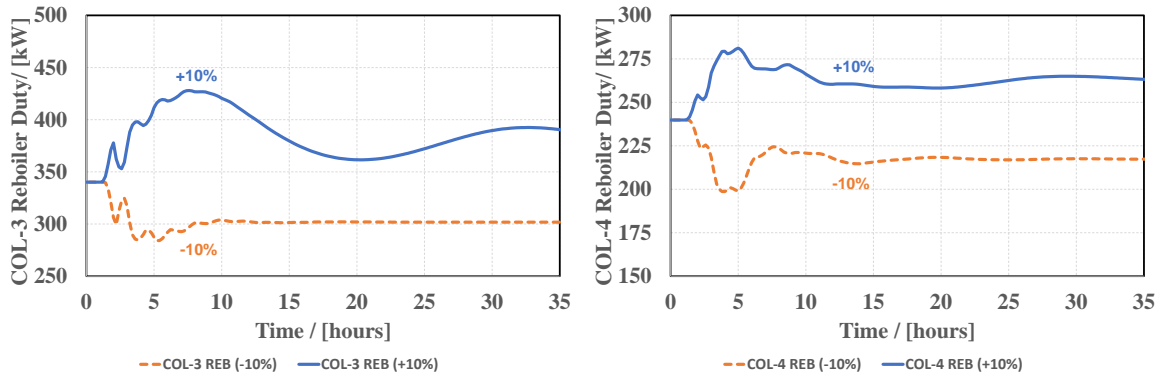
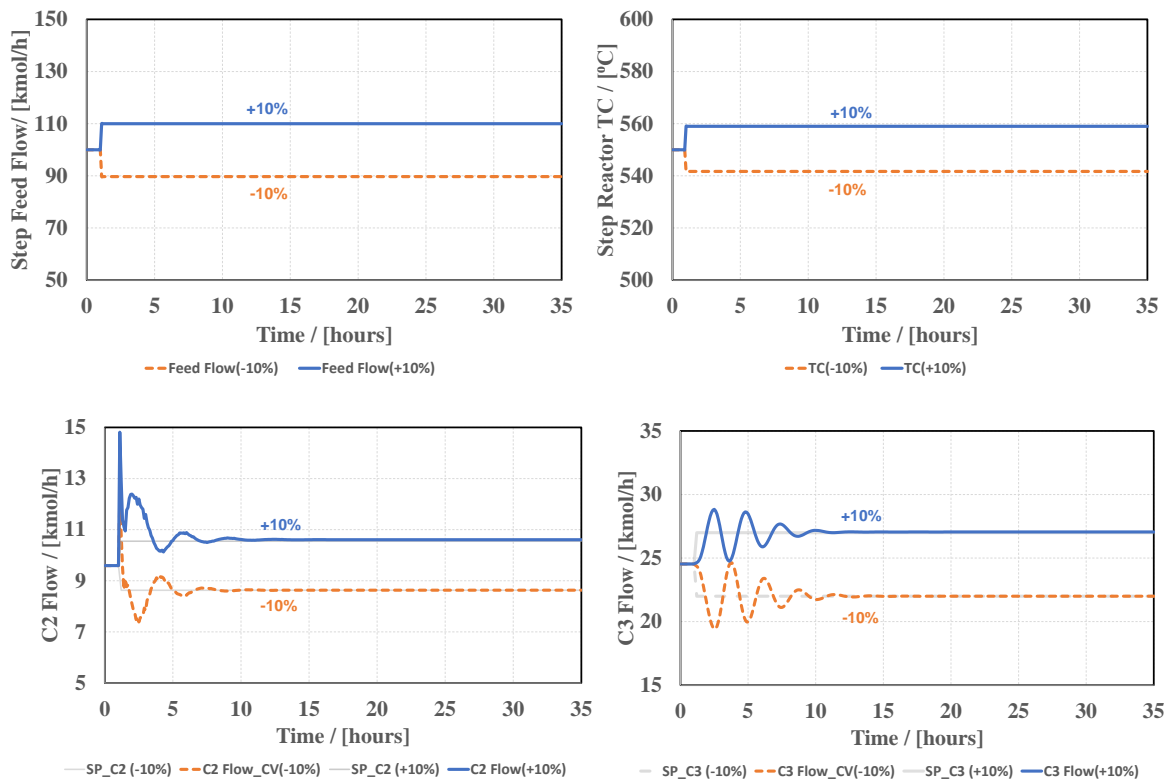


Figure 35. LMPC – Profilurile sarcinilor refierbatoarelor coloanelor

În mod remarcabil, răspunsul la modificarea cu -10% (reprezentat de linia portocalie întreruptă) este mai rapid în comparație cu modificarea cu +10%. Acest lucru indică faptul că este mai ușor să scadă debitul de producție.

Performanța LMPC este comparată cu răspunsul în buclă deschisă utilizând datele din simularea dinamică. În testul în buclă deschisă, variabilele manipulate, valorile de referință ale debitului de alimentare și temperaturii de intrare a reactorului, sunt modificate prin aplicarea unei excitații de tip treaptă astfel încât variabilele de ieșire (debitul C2 și debitul C3) să se schimbe cu +/-10% din valorile lor de referință (așa cum se întâmplă în testele cu LMPC). În acest fel, cele două strategii de control pot fi comparate prin intermediul indicilor de performanță precum Eroarea Pătratică Integrală (ISE), Eroarea Pătratică Medie (MSE), Eroarea Absolută Integrală (IAE), Eroarea Maximă (PE) sau overshoot (depășire). Rezultatele sunt prezentate în Figura 93 și Figura 94.



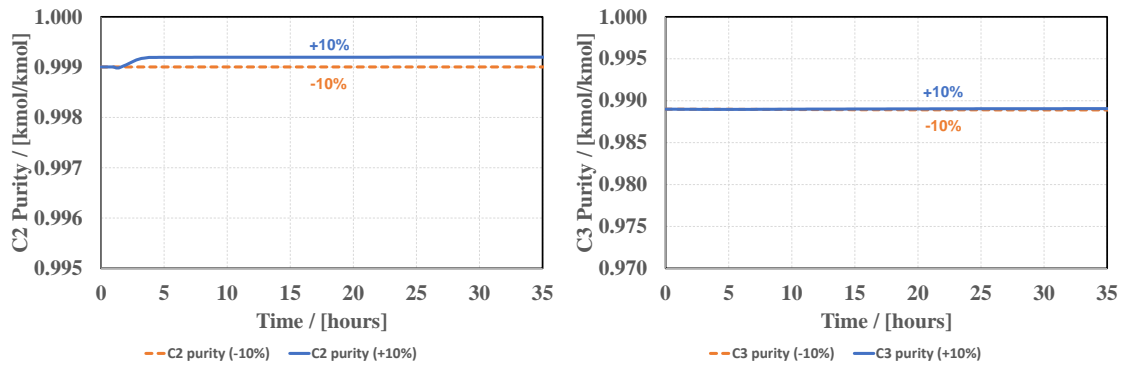


Figure 36. Buclă deschisă – Profiluri ale fluxurilor și purităților variabilelor de control, debitului de alimentare și temperaturii de intrare a reactorului.

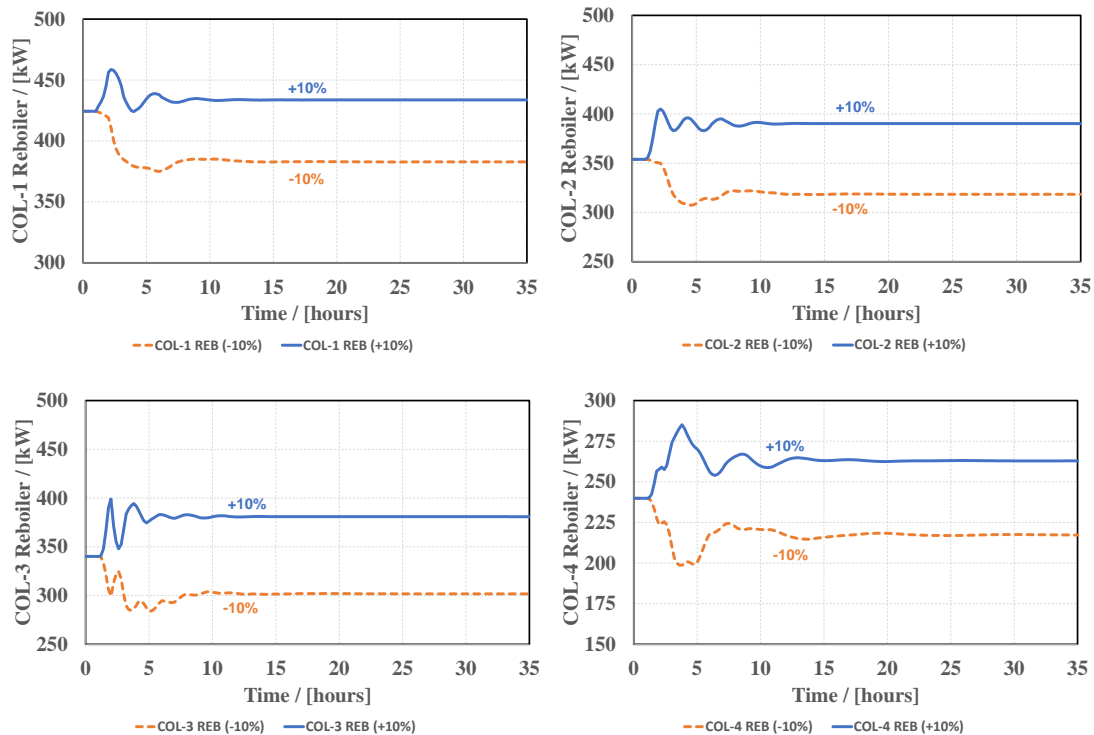


Figure 37. Buclă deschisă – Profilurile sarcinilor refierbatoarelor coloanelor

În Figura 93 și Figura 94, răspunsurile în buclă deschisă demonstrează un control rezonabil cu unele oscilații până la atingerea țintelor de debit de producție după aproximativ 15 ore, urmate de un regim de stare stabilă. Debitul de etilenă prezintă un overshoot de aproximativ 50% în comparație cu valoarea setată; totuși, buclele de reglare de tipul PI ajustează eficient și rapid eroarea. Pe durata acestor teste, buclele de reglare de tipul PI mențin eficient puritățile de produs ale etilenei și propilenei la valorile lor setate respective pentru ambele strategii de control. Cu toate că instalația de metateză a 2-butenei este neliniară, rezultatele arată că buclă de reglare predictiv liniar pe bază de modele depășește răspunsul în buclă deschisă.

Pentru a caracteriza performanța sistemului și a identifica strategia de control cea mai eficientă, sunt luate în considerare mai mulți indici de performanță. Pierderea medie a erorii pătratică (MSE) este utilizată pentru a ilustra performanța și răspunsul la control pentru aceeași schimbare treaptă de +/-10% în debitul de producție pe o perioadă de 30 de ore. MSE reprezintă

suma diferențelor pătratice dintre valorile estimate și reale ale producției, împărțită la numărul de ore testate.

În plus, eroarea pătrată integrală (ISE) este folosită ca o altă măsură pentru a evalua performanța sistemului, calculată prin integrarea pătratului erorii de control pe aceeași perioadă (prin aplicarea regulii trapezoidale, cu un pas fix de 0,2 ore). În practica industrială, performanța controlerului este adesea evaluată pe baza deviației maxime a variabilelor controlate, denumită eroare maximă (PE). Cu toate acestea, în timp ce PE identifică deviația maximă, nu oferă informații despre fluctuații sau capacitatea de a atinge punctul setat. Prin urmare, eroarea absolută integrală (IAE) este folosită în mod obișnuit pentru a evalua răspunsul și controlerului. IAE calculează suma zonelor deasupra și sub punctul de referință, penalizând erorile în mod egal indiferent de direcție.

Rezultatele prezentate în Tabelul 35 indică în mod constant că LMPC prezintă performanțe semnificativ mai bune în comparație cu răspunsurile în buclă deschisă, demonstrând capacitățile sale superioare de control.

Table 6. Indicatori ale performanței asociate strategiilor de control

Method	U.M	Controlled variable 1: C2 Flow (y_1)				Controlled variable 2: C3 Flow (y_2)			
		MPC	Open Loop	MPC	Open Loop	MPC	Open Loop	MPC	Open Loop
		-10%	-10%	+10%	+10%	-10%	-10%	+10%	+10%
ISE	(kmol/h) ² ×h	0.05	3.16	1.34	6.19	1.7	15.8	1.3	10.6
MSE	(kmol/h) ²	0.01	1.05	0.22	2.06	0.3	5.3	0.2	3.5
IAE	(kmol/h) ×h	0.50	5.63	4.80	9.35	2.8	20.8	3.3	16.2
PE	kmol/h	0.20	3.57	0.86	4.26	1.6	2.7	1.7	2.4

Bibliografie selectivă

Agachi, P.S.; Nagy, Z.K.; Cristea, M.V.; Imre-Lucaci, A. Model Predictive Control. In Model Based Control, 1st ed.; Wiley-VCH: Stuttgart, Germany, 2006; pp. 15–63.

Meenaksi, S.; Almuthaliba, A.; Vijayageetha, V. MIMO Identification and Controller design for Distillation Column. *Int. J. Innov. Res. Electr. Electron. Instrum. Control Eng.* 2013, 1, 44–48.

Chinpraasit, J.; Panjapornpon, C. Model predictive control of vinyl chloride monomer process by Aspen Plus Dynamics and MATLAB/Simulink co-simulation approach. *IOP Conf. Ser. Mater. Sci. Eng.* 2020, 778, 012080.

Andrei, M.A.; Bildea, C.S. Optimization and control of propylene production by metathesis of 2-butena. *Processes* 2023, 11, 1325.

Skogestad, S. The Dos and Don'ts of Distillation Column Control. *Chem. Eng. Res. Des.* 2007, 85, 13–23.

Luyben, W. Evaluation of criteria for selecting temperature control trays in distillation columns. *J. Process Control* 2016, 16, 115–134.

Dimian, A.C.; Bildea, C.S.; Kiss, A.A. Process Synthesis by the Hierarchical Approach. In *Integrated Design and Simulation of Chemical Processes*, 2nd ed.; Elsevier: Amsterdam, The Netherlands, 2014; pp. 253–300.

Lucrări publicate si participari la conferințe științifice:

Andrei, A.M., Bildea, C.S., Linear Model Predictive Control of Olefin Metathesis Process, PROCESSES, vol 11, issue 7, article number 2216, 2023. IF 3.5, Q2 Engineering, Chemical.

Andrei, A.M., Bildea, C.S., Linear Model Predictive Control of Olefin Metathesis Process, PROCESSES, vol 11, issue 5, article number 1325, 2023. IF 3.5, Q2 Engineering, Chemical.

Andrei, A.M., Bildea, C.S., Conceptual design of propylene production by metathesis of 2-butena, UPB Sci. Bull. Series B – Chemistry and Materials Science, vol 80, issue 1, pag. 47-62, 2018. IF 0.5, Q4 Engineering, Multidisciplinary.

Andrei, A.M., Bildea, C.S., CONCEPTUAL DESIGN OF PROPYLENE PRODUCTION BY METATHESIS OF 2-butena. International Symposium of Chemical Engineering and Materials SICHEM 2016 University Politehnica of Bucharest, Romania, 8 September, oral presentation.

Andrei, A.M., Bildea, C.S., Economic optimization and dynamic control of propylene production by metathesis of 2-butena, International Symposium of Chemical Engineering and Materials SICHEM 2018 University Politehnica of Bucharest, Romania, 6 – 7 September, poster presentation.

Andrei, A.M., Bildea, C.S., Plantwide control of the olefin metathesis process, 21st Romanian International Conference on Chemistry and Chemical Engineering, Mamaia - Constanta, Romania, oral presentation.