

## MODELOWANIE I STEROWANIE REAKTORA ZBIORNIKOWEGO PRZEPŁYWOWEGO Z UŻYCIEM REGULATORA PID

Artur Wodołański<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Zakład Oszczędności Energii i Ochrony Powietrza, Główny Instytut Górnictwa, Plac Gwarków 1, 40-166 Katowice, e-mail: awodolazski@gig.katowice.pl

### STRESZCZENIE

W artykule przedstawiono model układu regulacji dynamiki reaktora zbiornikowego przepływowego w syntezie metanolu w układzie trójfazowym. Symulację reaktora przeprowadzono zarówno dla stanów ustalonych jak i nieustalonych. Obliczono współczynnik efektywności do osiągnięcia maksymalnej wydajności produktu z jednostki objętości reaktora. Z symulacji dynamiki reaktora w zamkniętej pętli regulacji otrzymano dane służące nastrojeniu regulatora PID (regulator proporcjonalno-całkująco-różniczkujący). Wyniki regulacji procesowej zapewniają optymalną zdolność produkcyjną reaktora wraz z eliminacją miejscowych przegrzań czy nagłych wzrostów temperatury.

**Słowa kluczowe:** regulator PID, symulacja dynamiczna, reaktor zbiornikowy przepływowy

### MODELLING AND CONTROL OF CONTINUOUS STIRRED TANK REACTOR WITH PID CONTROLLER

#### ABSTRACT

This paper presents a model of dynamics control for continuous stirred tank reactor (CSTR) in methanol synthesis in a three-phase system. The reactor simulation was carried out for steady and transient state. Efficiency ratio to achieve maximum performance of the product per reactor unit volume was calculated. Reactor dynamics simulation in closed loop allowed to received data for tuning PID controller (proportional-integral-derivative). The results of the regulation process allow to receive data for optimum reactor production capacity, along with local hot spots eliminations or temperature runaway.

**Keywords:** PID controller, dynamic simulation, continuous stirred tank reactor

### WPROWADZENIE

Reaktory zbiornikowe przepływowe są szeroko stosowane w przeprowadzaniu procesów w układzie trójfazowym zarówno w przemyśle chemicznym jak i farmaceutycznym (produkcja metanolu, Fischera-Tropscha czy kwasu tereftalowego) [Assaf et al. 1996, Dahhan et al. 1997, Zhou et al. 1999]. Zachodzące w reaktorach zbiornikowych reakcje chemiczne są egzotermiczne, przebiegają z wydzielaniem dużej ilości ciepła, które może doprowadzać do miejscowych przegrzań reaktora (z ang. „hot spot”) lub nagłych wzrostów temperatury. Ponadto oscylacje temperaturowe czy niestabilności w dynamice pracy reaktora przyczyniają się

do pogorszenia jakości uzyskiwanego produktu [Bequette 2003, Zelinka et al. 2006]. Duża zdolność produkcyjna reaktorów ciśnieniowych przyczynia się do obniżenia zarówno ich trwałości eksploatacyjnej, jak i bezpieczeństwa prowadzonego procesu. Konieczne jest odpowiednia konstrukcja, dobór materiału reaktora oraz optymalizacja parametrów procesowych w celu poprawy niezawodności pracy instalacji, w tym ograniczenia liczby jej remontów i postojów awaryjnych [Seborg et al.1989]. Przyczynia się do wzrostu zapotrzebowania na projekty nowych typów układów regulacji do reaktorów w celu zapewnienia ich niezawodności, utrzymaniu parametrów procesowych jak i długotrwałej bezpiecznej eksploatacji reaktora.

W celu zapewnienia poprawnej regulacji pracy reaktora konieczne jest wyznaczenie ich charakterystyk dynamicznych, które umożliwią zaprojektowanie układów kontroli i regulacji pracy reaktora. Zbiornikowe reaktory przepływowe wykazują silną charakterystykę nieliniową, co w konsekwencji wymaga zaprojektowania systemu regulacji, który w odpowiedni sposób niweluje negatywny wpływ nieliniowości pracy reaktora na efektywną produkcję zakładu chemicznego [Deglon, Meyer 2006]. Sterowanie oraz kontrola pracy reaktora zbiornikowo-przepływowego wymaga kontroli temperatury, ciśnienia, natężenia przepływu reagentów czy stężenia składników reakcyjnych. Pożądany układ sterownia i regulacji umożliwia utrzymanie optymalnej zdolności produkcyjnej z jednostki objętości reaktora [Fortescue et al. 1981].

Badania modelowe nad syntezą metanolu wraz z optymalizacją parametrów procesowych przeprowadził m.in. Lovik [2001]. Wykonany model reaktora z wystarczającą dokładnością odpowiadał warunkom pseudo-stacjonarym. Veraldi [2002] badał możliwość syntezy metanolu w wymuszonym stanie nieustalonym z okresową zmianą natężenia przepływu reagentów. Graff [1990] zaproponował kinetyczny model syntezy metanolu w układzie trójfazowym. W literaturze widoczny jest brak danych w modelowaniu układów regulacji procesowej do utrzymania optymalnego składu wytwarzanych produktów.

W niniejszym artykule przedstawiono model dynamiczny regulacji temperatury oraz wydajności produkcji reaktora do syntezy metanolu przy wykorzystaniu algorytmu regulatora PID. Prze-

prowadzono obliczenia numeryczne z uwzględnieniem hydrodynamiki procesowej. Symulację przeprowadzono z użyciem środowiska obliczeniowego Simplerer. Przedstawiona analiza stanów dynamicznych pracy reaktora umożliwia dobór parametrów regulatora zapewniając skuteczną optymalizację procesu.

## MODEL STEROWANIA REAKTORA

Geometrię zaprojektowanego reaktora wraz z wężownicą chłodzącą przedstawiono na rysunku 1. W reaktorze umieszczone jest mieszadło turbinowe Rushtona. Przez dolny dystrybutor wlotowy reaktora dozowany jest gaz syntezowy, a z góry odbierany jest produkt reakcji. Do opisu hydrodynamiki układu gaz syntezowy-zawiesina katalizatora wykorzystano eulerowski model wielofazowy. Warunki symulacji modelu procesu syntezy metanolu w reaktorze trójfazowym wraz z parametrami symulacyjnymi zostały opisane w autorskiej pracy Wodołażskiego [2015].

Przy założeniu idealnego wymieszania oraz stałej objętości reaktora bilans masowy poszczególnych składników opisany jest wzorem:

$$V_r \frac{\partial C_i}{\partial t} = q_r (C_{i0} - C_i) + V_r v_i r \quad (1)$$

gdzie:  $V_r$  – objętość reaktora,  $C_i$  – stężenie molarne danego składnika,  $C_{i0}$  – stężenie molarne składnika początkowego,  $q_r$  – objętościowe natężenie przepływu mieszaniny,  $v_i$  – współczynnik stechiometryczny.

Bilans energii reaktora opisany jest wzorem:

$$V_r q_r c_{pr} \frac{\partial T_r}{\partial t} = q_r \rho_r c_{pr} (T_{r0} - T_r) - UA(T_r - T_c) + V_r (-\Delta_r H) r \quad (2)$$

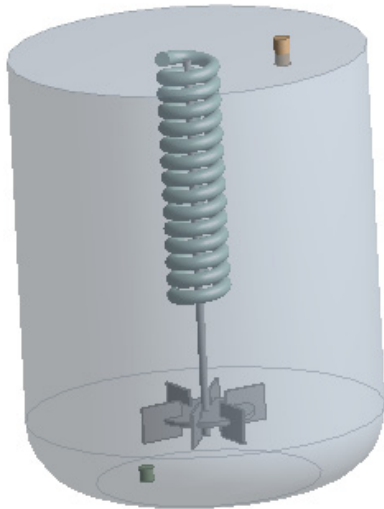
Bilans energii dla medium chłodzącego wyrażony jest z wzoru:

$$V_c q_c c_{pc} \frac{\partial T_c}{\partial t} = q_c \rho_c c_{pc} (T_{c0} - T_c) + UA(T_r - T_c) \quad (3)$$

gdzie:  $T$  – temperatura,  $q$  – gęstość,  $c_p$  – pojemność cieplna,  $\Delta_r H$  – entalpia reakcji,  $U$  – współczynnik przenikania ciepła,  $A$  – powierzchnia wymiany ciepła, indeksy dolne  $r$  i  $c$  oznaczają odpowiednio układ reakcyjny i chłodniczy.

Schemat sterowania reaktora z użyciem regulatora PID przedstawiono na rysunku 2. Regulator PID pracuje w pętli sprzężenia zwrotnego minimalizując uchyb regulacji (różnica wartości sygnału zadanego i wyjściowego) poprzez strojenie sygnału sterującego na wejściu obiektu. Wielkością regulowa-

W modelu przyjęto następujące uproszczenia: pominięto wpływ ciepła mieszania na warunki procesowe, a także przyjęto, że objętościowe natężenie przepływu reagentów nie zależy od temperatury i składu mieszaniny reakcyjnej, a całkowita ilość ciepła reakcji odbierana jest przez chłodnicę.



Rys. 1. Geometria reaktora zbiornikowego przepływowego

nią jest temperatura reaktora regulowana poprzez natężenie strumienia wpływającego reagenta do reaktora. Transmitancja operatorowa regulatora PID obliczana jest z wzoru:

$$G_c(s) = K_c \left( 1 + \frac{1}{\tau_I s} + \frac{\tau_D s}{\tau_N s + 1} \right) \quad (4)$$

gdzie: wzmacnienie  $K_c$  regulatora opisana jest wzorem:

$$K_c = \frac{\tau_1 + \tau_2 - \tau_3}{K_p \tau_c} \quad (5)$$

gdzie:  $\tau_c$  – jest parametrem strojenia regulatora otrzymanym przez minimalizację całki wartości bezwzględnej błęd regulatora dla nadążnego punktu pracy.  
 $\tau_{1-3}$  – stałe czasowe.

Do identyfikacji modelu został wykorzystana metoda rekurencyjna najmniejszych kwadratów wraz ze współczynnikiem zapominania. W celu opisu dynamiki układu został wykorzystany model ARMA zgodnie z wzorem:

$$G_c(q) = \frac{y(k)}{u(k)} = \frac{b_0 + b_1 q^{-1}}{1 + a_1 q^{-1} + a_2 q^{-2}} \quad (6)$$

Otrzymana transmitancja dyskretna dla regulatora została opisana wzorem:

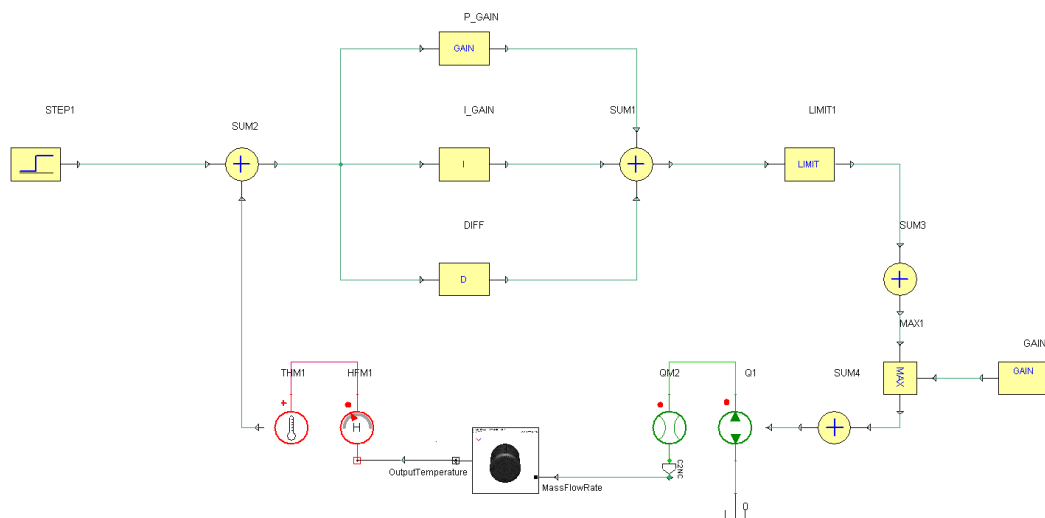
$$D(z) = \frac{1-r}{b_1} \frac{1 + a_1 z^{-1} + a_2 z^{-2}}{(1-z^{-1}) \frac{(1+b_2 z^{-2})}{b_1 b_2}} \quad (7)$$

gdzie:  $r$  jest parametrem strojenia regulatora opisany wzorem:

$$r = \exp(-8.29 T_s / T_r) \quad (8)$$

gdzie:  $T_s$  – czas próbkowania,  
 $T_r$  – czas regulacji.

W modelu badana była odpowiedź dynamiczna dla różnych zmian kroku czasowego regulatora. Poprzez natężenie przepływu gazu syntezowego na wlocie badano wpływ zmian stężenia metanolu oraz temperatury w reaktorze. Parametrami strojenia regulatora było jego wzmacnienie  $K_c$ , czas całkowania i różniczkowania, gdzie ich optymalne wartości zostały wyznaczone z użyciem metody najmniejszych kwadratów. Metody strojenia regulatory opierały się na podstawie analizy częstotliwościowej i stężenia produktu na wylocie reaktora.



Rys. 2. Schemat regulacji reaktora jako obiektu sterowania

## OMÓWIENIE WYNIKÓW

Symulacja numeryczna została przeprowadzona dla stanów ustalonych i nieustalonych. Na rysunku 3a przedstawiono profile prędkości roju pęcherzy gazu syntezowego podawanego na wlocie do reaktora przy wyłączonym mieszadle. Największe zmiany prędkości gazu syntezowego wzdłuż wysokości reaktora związane były z rozpadem i koalescencją pęcherzy gazowych. Przykładowe kontury objętościowe frakcji stałej katalizatora dla 60 sekundy przy prędkości obrotowej mieszadła 240 obr/min zostały przedstawione na rysunku 3b.

Prędkość krytyczna mieszadła dla frakcji zawiesiny katalizatora wynosiła około 112 obr/min. Na rys. 4a przedstawiono wpływ molowego natężenia przepływu gazu syntezowego na wydajność syntezy metanolu. W miarę zwiększenia molowego natężenia przepływu gazu syntezowego stężenie metanolu rosło osiągając maksimum dla 15 kmol/h, po czym zaczęło gwałtownie spadać, co spowodowane było zbyt krótkim czasem kontaktu gazu syntezowego z powierzchnią katalizatora. Optymalne natężenie przepływu gazu syntezowego na wlocie do reaktora było jednym z ważniejszych parametrów zapewniających pożądaną zdolność produkcyjną reaktora. Miejscowe przegrzania w reaktorze przyczyniają się do zaburzenia stabilności termicznej w układzie. Na rysunku 4b przedstawiono przykładowy wpływ ciśnienia na wydajność syntezy metanolu, którego wzrost związany jest z temperaturą procesu.

Wydajność produkcji reaktora podlega wahaniom poprzez zakłócenia, takie jak nagłe wzrosty lub spadki temperatury. Zaprojektowany regulator niweluje wpływ zakłóceń na wartości zadanych parametrów w reaktorze zapewniając stabilny przebieg procesu. Na rysunku 5 przedstawiono odpowiedź układu na wymuszenie w postaci skoku jednostkowego dla nastrojonego regulatora (5a) oraz nienastrojonego (5b). Na podstawie odpowiedzi skokowej wyznaczono czas narastania oraz opóźnienie układu. Dobrane nastawy dla regulatora PID przedstawiono w tabeli 1.

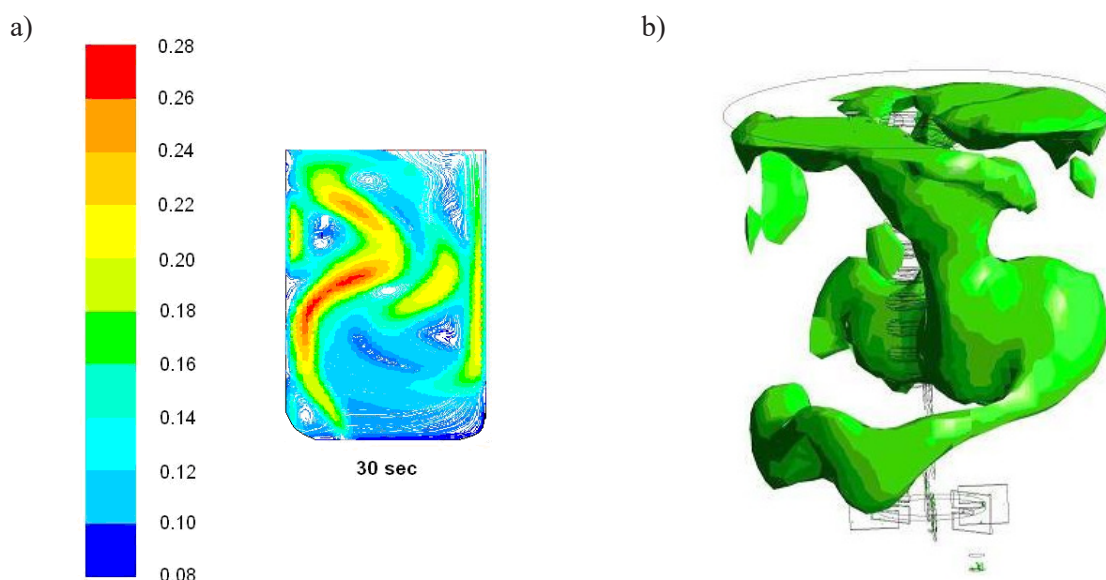
Na rysunku 5b pokazano odpowiedź układu na wymuszenie skokowe z błędnie dobranymi nastawami regulatora, co pokazuje, że wartość procesowa nie osiąga wartości zadanej, a temperatura procesu spada, co w konsekwencji obniża wydajność produkcji.

Stężenie metanolu na wyjściu z reaktora jest regulowane poprzez masowe natężenie przepływu gazu syntezowego na wlocie do reaktora. Transmittancja układu regulacji dla natężenia przepływu wyniosła:

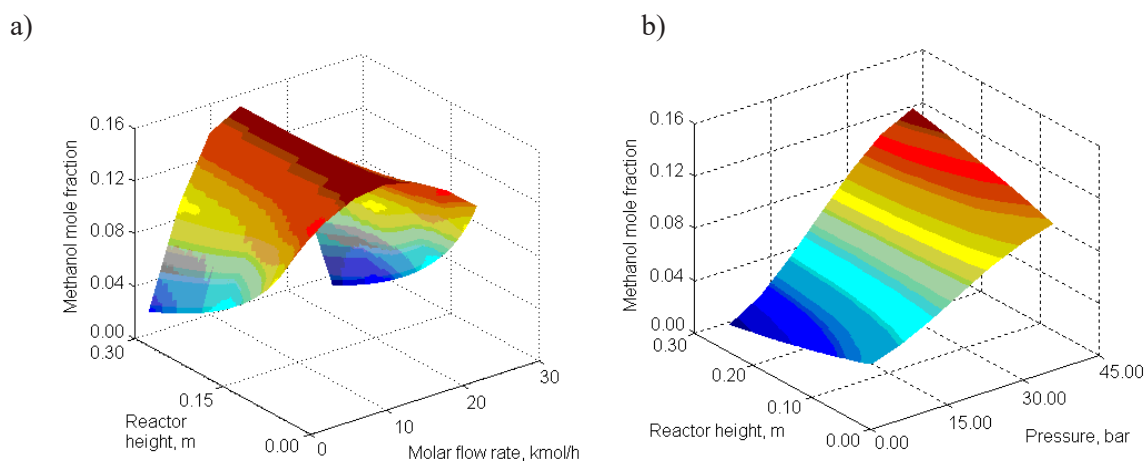
$$G(s) = \frac{196e - 0.1753}{2.86s + 1} \quad (9)$$

Transmittancja układu do regulacji temperatury w reaktorze wyniosła:

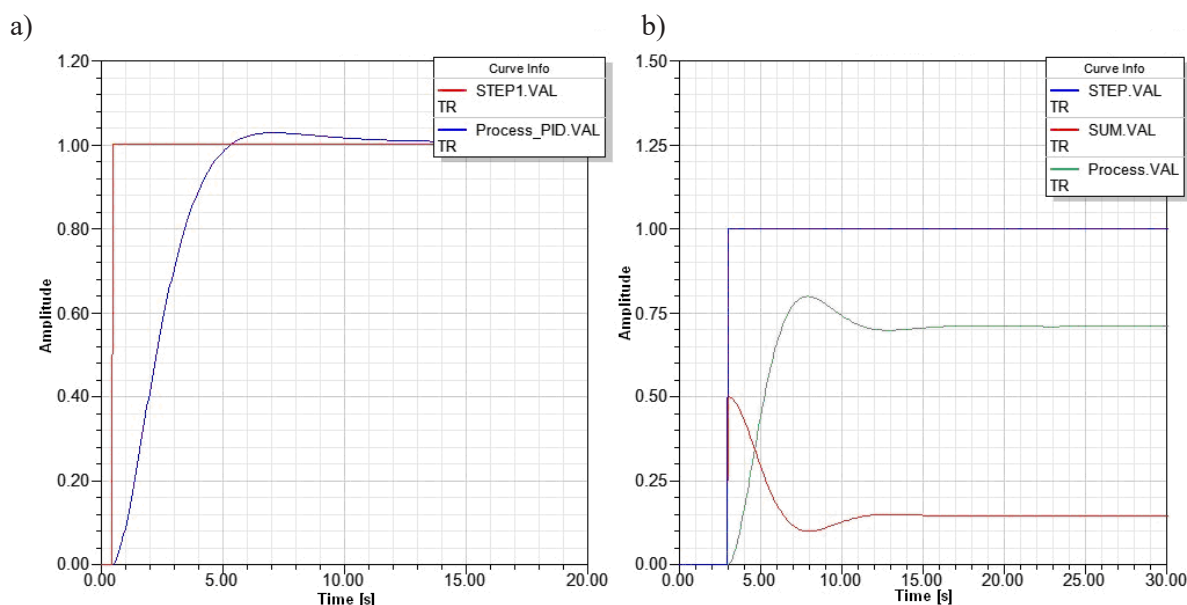
$$G(s) = \frac{271e - 0.8217}{29.1s + 1} \quad (10)$$



Rys. 3. Profile prędkości pęcherzy gazu syntezowego na wlocie do reaktora dla 30 sekundy (3a); kontury udziału objętościowego cząstek stałych zawiesiny katalizatora (3b)



Rys. 4. Wpływ molowego natężenia przepływu gazu syntezowego na wydajność syntezy metanolu wzdłuż wysokości reaktora (4a); wpływ ciśnienia na wydajność syntezy metanolu wzdłuż wysokości reaktora (4b).



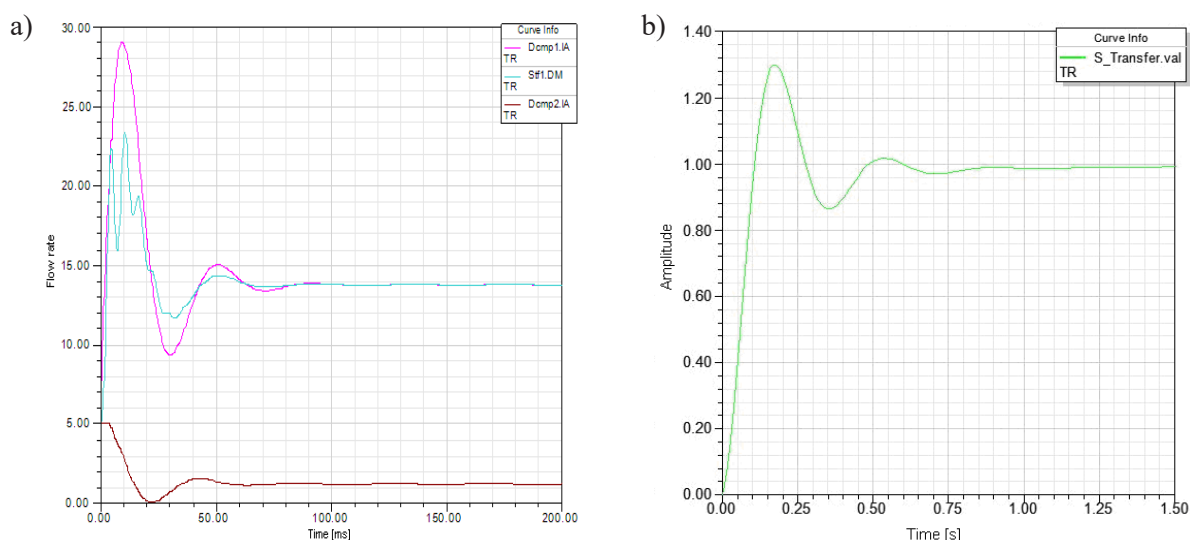
Rys. 5. Odpowiedź układu na skok jednostkowy otrzymany z symulacji: nastrojonego regulatora PID (5a) oraz nienastrojonego (5b)

Tabela 1. Nastawy regulatora PID

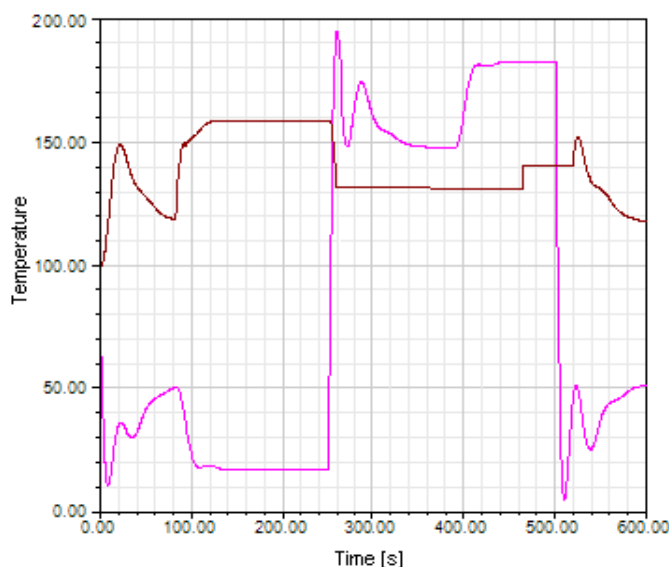
$K_C$	$\tau_i$	$\tau_D$	Rząd obiektu
1.5691	0.3852	0.04215	Inercja I rzędu
0.8571	0.6734	0.04112	Inercja II rzędu

Na rysunku 6a przedstawiono odpowiedź regulatora na wartość zadaną natężenia przepływu gazu syntezowego wynoszącego 14 kmol/h na wlocie reaktora. Dynamika zmian ma charakter oscylacyjny z czasem regulacji około 90 milisekund. Odpowiedź układu na skok jednostkowy w fazie rozruchu reaktora pokazano na rysunku 6b. Czas dostrajania regulatora wynosił niecałą sekundę. Porównanie

przebiegów temperatury procesu z i bez regulatora przedstawiono na ryunku 7. Przebieg procesu bez regulacji powoduje nagły wzrost temperatury w reaktorze co skutkuje gwałtownym spadkiem wydajności produktu. Oddziaływanie regulatora w przebieg procesu odgrywa znacząca rolę w redukcji zakłóceń. Brak efektywnej regulacji znacznie obniża bezpieczeństwo procesowe w tym trwałość eksploatacyjną reaktora.



Rys. 6. Odpowiedź układu na wartość zadaną natężenia przepływu gazu: w fazie pracy reaktora (6a), w fazie rozruchu reaktora (6b)



Rys. 7. Temperatura procesu z udziałem i bez udziału regulatora PID

## PODSUMOWANIE

Zaprojektowany model regulatora PID skutecznie utrzymuje wartość temperatury w reaktorze na zadanym poziomie. Pozwala to utrzymać wymaganą jakość produkcji wraz z zapewnieniem bezpieczeństwa prowadzonego procesu. Skuteczna regulacja wydłuża okres eksploatacji reaktora, co z kolei przyczynia się to do zwiększenia niezawodności pomniejszając ryzyko awarii reaktora. Kluczową rolę w strojeniu regulatora odgrywa czas regulacji i narastania. Odpowiednio dobrane parametry pracy regulatora niwelują błędy w stanie ustalonym jak i zapobiegają przeregulowaniu całego układu zapewniając zwiększenie stabilności prowadzonego procesu.

## LITERATURA

1. Assaf E.M, Giordano R.C, Nascimento C.A.O. 1996. Thermal runaway of ethylene oxidation reactors: prevision through neural network. *Chemical Engineering Science*, 51, 3107–3112
2. Bequette B.W. 2003. *Process control: modeling, design and simulation*. Prentice Hall, Upper Saddle River.
3. Dahhan A., Larachi M, Dudukovic M.P. 1997. High-pressure trickle bed reactors: A review. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 36, 3292.
4. Deglon D.A., Meyer C.J. 2006. CFD modeling of stirred tanks: Numerical considerations. *Minerals Engineering*, 19(10), 1059–1068
5. Fortescue T.R, Kershenbaum L.S, Ydstie B.E. 1981, Implementation of self-tuning regulator with

- variable forgetting factor. *Automatica*, 17, 831–835
6. Graaf G.H., Scholtens H, Stamhuis E.J, Beenackers A.A.C.M, 1990. Intra-particle diffusion limitation in low-pressure methanol synthesis. *Chemical Engineering Science*, 45, 773–783.
  7. Lovik I., 2001. Modeling, estimation and optimization of the methanol synthesis with catalyst deactivation. Ph.D. Thesis, Norwegian University of Science and Technology.
  8. Seborg D.E., Edgar T.F, Mellichamp D.A. 1989. *Process dynamics and control*. Wiley, New York, 580–581.
  9. Velardi S, Barresi A.A, Antonello A. 2002. Methanol synthesis in a forced unsteady-state reactor network. *Chemical Engineering Science*, 57, 2995–3004.
  10. Wodołański A. 2015. Numerical modelling of methanol synthesis. Part 2. CFD simulation in a three-phase slurry reactor, *Chemical Industry*, 12(94), 2256–2262.
  11. Zelinka I, Vojteset J, Oplatkova Z. 2006. Simulation study of the CSTR reactor for control Purposes. *Proceedings of 20th European Conference on modelling and Simulation*.
  12. Zhou X.G, Liu L, Yuan W.K. 1999. Optimization and control of wall cooled fixed bed reactor. *Chemical Engineering Science*, 54, 2739–2744.