

کنترل دمای راکتورهای پلیمرشدن ناپیوسته

The Temperature Control of Batch Polymerization Reactors

دکتر محمد شاهرخی - مهندس محمود پروازی نیا

دانشگاه صنعتی شریف - دانشکده مهندسی شیمی

واژه‌های کلیدی:

شبیه‌سازی، کنترل راکتور، پلیمر، تعلیق

چکیده

در این مقاله چند روش مختلف کنترل دمای یک راکتور ناپیوسته پلیمر شدن مقایسه می‌شود. در این راستا، پلیمر شدن متیل متاکریلات به صورت تعلیقی در نظر گرفته شده و از راه شبیه‌سازی کامپیوتری کنترل دمای راکتور مورد بررسی قرار گرفته است. علت انتخاب این نوع پلیمر شدن گرمادهی شدید واکنش است که کنترل آنرا مشکل می‌سازد. چهار طرح مختلف کنترل دما که در همه آنها از کنترل کننده‌های سنتی PI استفاده شده مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد که یکی از طرح‌های پیشنهادی با توجه به میزان آب مصرفی و کنترل خوب دمای راکتور می‌تواند به عنوان سیستم کنترل مناسب انتخاب شود.

مقدمه

بیشتر واکنشهای پلیمر شدن گرماده اند و نرخ آزاد شدن گرمای این واکنشها غیرخطی است، لذا کنترل چنین واکنشهایی مشکل است. اگر واکنش به صورت ناپیوسته (batch) انجام شود کنترل آن مشکلتر می‌شود. زیرا در شروع کار که دمای راکتور پایین است واکنش قابل ملاحظه‌ای انجام نمی‌شود و باید با گرم کردن راکتور، دما را به میزان مورد نظر رساند تا واکنش شروع شود. بعد از شروع واکنش و با افزایش درصد تبدیل، به مقدار گرمای آزاد شده در اثر واکنش اضافه می‌شود و در محدوده‌ای به حداکثر مقدار خود می‌رسد (محدوده ظهور پدیده زل). در این مرحله باید از راکتور گرما گرفته شود تا دما در میزان مورد نظر باقی بماند. با افزایش درصد تبدیل، نرخ گرمادهی پس از گذر از یک مقدار حداکثر کاهش می‌یابد (ظهور اثر شیشه‌ای شدن) و در محدوده پایانی واکنش ممکن است لازم باشد که برای حفظ دما در میزان مورد نظر، راکتور را گرم کرد. در این مقاله عملکرد چند طرح کنترل از راه شبیه‌سازی کامپیوتری مقایسه می‌شود.

مدل فرایند

برای محاسبه مقدار گرمای آزاد شده در اثر واکنش از یک مدل سینتیکی [1] استفاده شده است. اگر درصد تبدیل را با x نشان دهیم، بر طبق این مدل نحوه تغییرات درصد تبدیل با زمان به صورت زیر بیان می‌شود:

$$\frac{dx}{dt} = K_p (1 - x) \left(\frac{1}{K_i} \right)^{1/2} \quad (1)$$

تعریف کمیت‌های رابطه (۱) در جدول ۱ آمده است.

اشاره می‌شود که رابطه (۱) به طور مستقیم از معادلات سینتیکی مربوط به پلیمر شدن متیل متاکریلات با فرض حالت شبیه پایا (*quasi-steady-state assumption*) به دست آمده است [1].

مقایسه نتایج حاصل از این مدل با داده‌های تجربی نشان می‌دهد که مدل فوق به خوبی می‌تواند درصد تبدیل پلیمر شدن متیل متاکریلات را پیش‌بینی کند.

برای این پلیمر شدن گرمای واکنش (ΔH) برابر $52/3325 \frac{Kj}{gmol}$ می‌باشد. آغازگر مورد استفاده آزوبیس ایزوبوتیرونیتیل (*azobisisobutyro-nitril; AIBN*) بوده است.

موازنه انرژی برای داخل راکتور

با فرض اختلاط کامل و ثابت ماندن گرمای ویژه مخلوط تعلیقی داریم:

$$P_m V_m C_{p_m} \frac{dT}{dt} = Au (T_j - T) + Q \quad (2)$$

که در آن Q نرخ گرمزایی واکنش می‌باشد که برابر است با:

$$Q = (-\Delta H) M_p V_p \frac{dx}{dt}$$

در معادله (۲) V_m حجم مخلوط تعلیقی و V_p حجم فاز پلیمری است که در آن واکنش انجام می‌شود و لذا داریم:

$$V_m = V_a + V_p \quad (3)$$

در رابطه (۲) u ضریب کلی انتقال گرماست که برای محاسبه آن از رابطه زیر استفاده شده است.

$$U = \frac{1}{\frac{1}{h_i} + \frac{dA_i}{KA_m} + \frac{A_i}{A_j h_o}} \quad (4)$$

روابط زیر برای محاسبه h_o و h_i یعنی ضرایب انتقال گرما در داخل راکتور و داخل ژاکت، پیشنهاد شده است [2].

$$(5) \text{ برای } Re > 10^4$$

Key Words:

Simulation, Control, Reactor, Polymer, Suspension

$$C = \frac{m_i C_{p_i}}{Au + m_i C_{p_i}} = 0.96 \quad (14)$$

با توجه به معادلات فوق نمودار جعبه‌ای فرایند به صورت زیر خواهد بود:



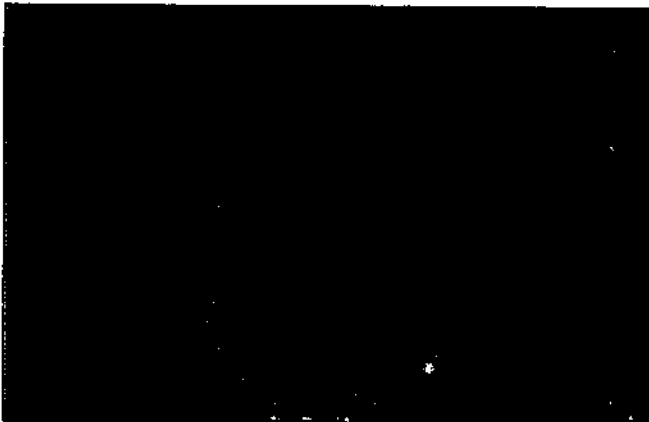
شکل ۱ - نمودار جعبه‌ای فرایند

طرح‌های مختلف کنترل

چهار طرح مختلف کنترل در شبیه‌سازی کامپیوتری مورد استفاده قرار گرفته‌اند. این طرح‌ها در شکل‌های ۲ تا ۶ نشان داده شده‌اند. در تمامی طرح‌ها سیال انتقال گرما آب است و از دو جریان آب گرم و سرد برای تنظیم دمای آب ورودی به ژاکت استفاده می‌شود.

طرح ۱

در این طرح با اختلاط آب 150°C و 25°C دمای آب ورودی به ژاکت تنظیم می‌شود. حداکثر دبی هر یک از جریانها $\frac{4}{5}\text{Kg}$ می‌باشد و با توجه به یکسان بودن محدوده عملکرد شیرها (۳-۱۵psi) که همپوشانی کامل دارند، شدت جریان آب ورودی به ژاکت ثابت است. شیر آب گرم هوا باز (air-to-open) و شیر آب سرد هوا بسته (air-to-close) می‌باشد.



شکل ۲ - طرح ۱، استفاده از آب داغ و آب سرد برای کنترل دمای راکتور

$$\frac{D_c h_c}{K} = 0.027 Re_c^{0.18} Pr_c^{0.33} \left(\frac{\mu}{\mu_w}\right)^{0.14} \left(1 + \frac{3}{5} \left(\frac{D_c}{D_f}\right)\right)$$

در این رابطه Re_c عدد رینولدز برای داخل ژاکت است و از رابطه

$$Re_c = \frac{\rho V D_c}{\mu}$$

به دست می‌آید.

(۶ - الف) برای $Re_c > 400$:

$$\frac{h_c D_c}{K} = 0.72 (Re_c)^{0.17} (Pr_c)^{0.33} \left(\frac{\mu}{\mu_w}\right)^{0.14}$$

(۶ - ب) برای $Re_c > 400$:

$$\frac{h_c D_c}{K} = 0.52 (Re_c)^{0.17} (Pr_c)^{0.33} \left(\frac{\mu}{\mu_w}\right)^{0.14}$$

در روابط ۶ الف و ب Re_c عدد رینولدز داخل راکتور است و از

$$Re_c = \frac{\rho N D_c}{\mu}$$

موازنه انرژی برای داخل ژاکت

با فرض اختلاط کامل در ژاکت داریم:

$$\rho_j V_j C_{p_j} \frac{dT_j}{dt} = -Au(T_j - T) + m_j C_{p_j}(T_j - T) \quad (7)$$

m_j دبی آب ورودی به ژاکت است و تعریف بقیه کمیتها در جدول ۱ ارائه شده است.

نمودار جعبه‌ای فرایند

برای به دست آوردن نمودار جعبه‌ای فرایند، از معادلات موازنه

انرژی در داخل راکتور و ژاکت تبدیل لاپلاس می‌گیریم:

$$T(s) = \frac{1}{\tau_p s + 1} = T_f(s) + \frac{a}{\tau_p s + 1} Q(s) \quad (8)$$

که τ_p ثابت زمانی راکتور و a به صورت زیر تعریف شده‌اند:

$$\tau_p = \frac{\rho_m V_m C_{p_m}}{Au} = 49.0 \text{ sec} \quad (9)$$

$$a = \frac{1}{Au} = 1/4.7 \times 10^{-2} \text{ } ^{\circ}\text{C} \cdot \text{sec} \quad (10)$$

از تبدیل لاپلاس معادله موازنه انرژی داخل ژاکت داریم:

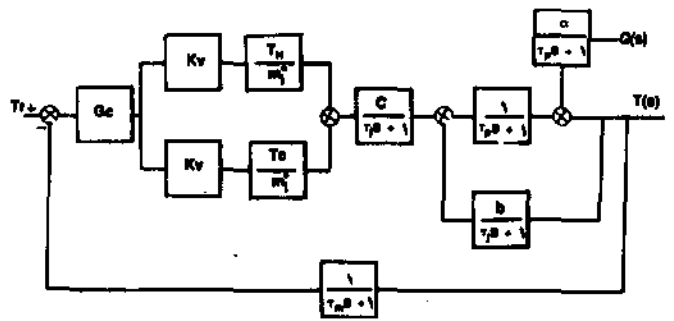
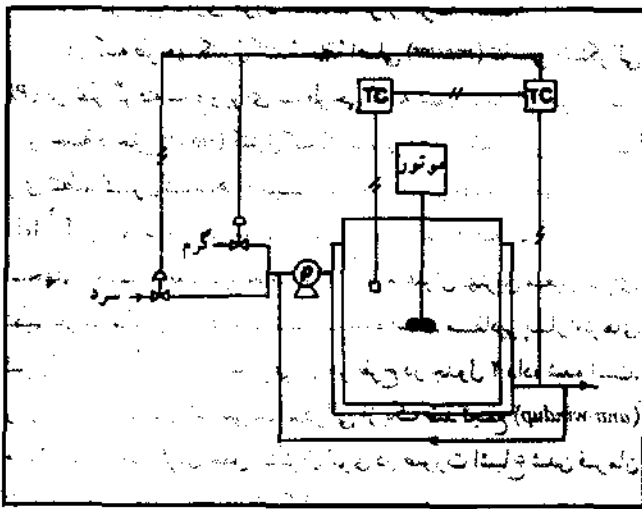
$$T_f(s) = \frac{b}{\tau_f s + 1} T(s) + \frac{c}{\tau_f s + 1} = T_m(s) \quad (11)$$

که τ_f ثابت زمانی ژاکت و b و c به صورت زیر تعریف شده‌اند:

$$\tau_f = \frac{\rho_f V_f C_{p_f}}{Au + m_i C_{p_i}} = 11/88 \text{ sec} \quad (12)$$

$$b = \frac{Au}{Au + m_i C_{p_i}} = 0.96 \quad (13)$$

نمودار جعبه‌ای طرح ۱ برای تجزیه و تحلیل دقیق‌تر در زیر آمده است.



شکل ۲ - نمودار جعبه‌ای طرح ۱

در این شکل Kv بهره شیر کنترل بوده و برابر $\frac{1}{m}$ می‌باشد بقیه پارامترها در جدول ۱ معرفی شده‌اند. (G_c تابع تبدیل کنترل کننده می‌باشد)

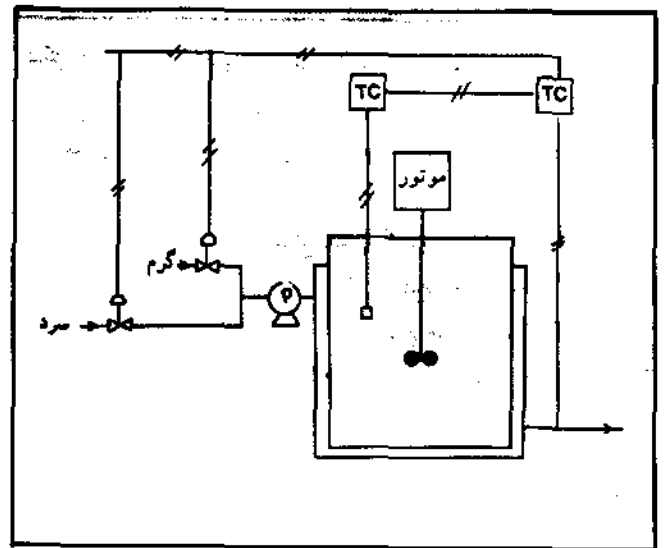
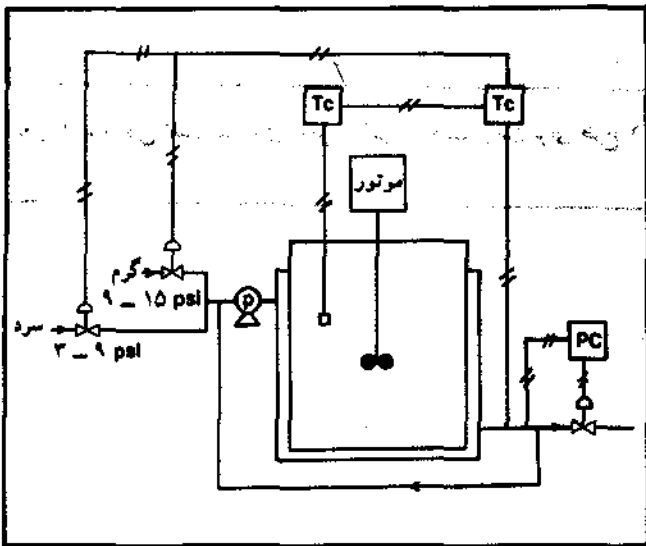
شکل ۵ - طرح ۳، طرح ۲ با نسبت برگشت ثابت از آب داخل ژاکت

طرح ۲

برای کاهش بیشتر میزان مصرف آب، در طرح ۲ محدوده عملکرد شیرهای کنترل را متفاوت اختیار کرده‌ایم. شیر کنترل جریان آب گرم در محدوده ۹-۱۵ psi از فرمان (signal) کنترل کننده عمل می‌کند و شیر کنترل جریان آب سرد در محدوده ۹-۳ psi کار می‌کند. بنا بر این شیرها همپوشانی ندارند. در این طرح مقدار جریان برگشتی متغیر است ولی دبی آب ورودی به ژاکت ثابت می‌باشد ($\frac{4Kg}{s}$). این عمل با قرار دادن یک کنترل کننده فشار روی جریان خروجی از ژاکت انجام می‌گیرد

طرح ۲

طرح ۲ مانند طرح ۱ می‌باشد با این تفاوت که کنترل دما به صورت متوالی (cascade) است. از کنترل متوالی برای بهبود عملکرد سیستم کنترل استفاده گردیده است.



شکل ۴ - طرح ۲، طرح ۱ با کنترل متوالی

شکل ۶ - طرح ۴، طرح ۳ با این تفاوت که محدوده عملکرد شیرهای کنترل متفاوت است و میزان جریان برگشتی نیز متغیر است

طرح ۲

در این طرح برای صرفه‌جویی بیشتر در مصرف آب سرد و گرم، به طرح ۲ یک جریان برگشتی ثابت آب اضافه شده است. با استعنا نسبت برگشتیهای مختلف آب و با توجه به منحنی کنترل دما، نسبت برگشت ۲۰٪ انتخاب گردیده است. دمای آب خروجی از ژاکت اندازه‌گیری می‌شود تا دینامیک ژاکت نیز ملحوظ گردد [3]. (یعنی اینکه حلقه داخلی تابع تبدیل ژاکت را نیز در بر گیرد).

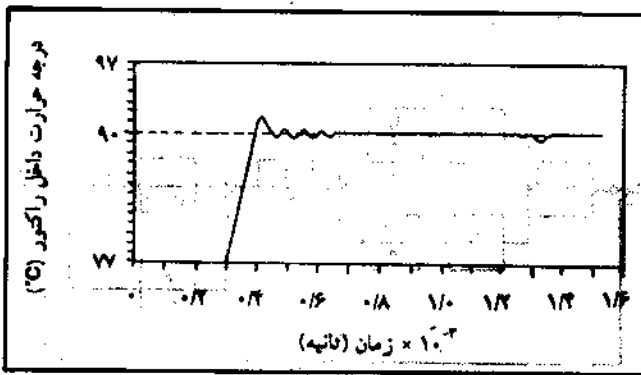
شبیه‌سازی کامپیوتری

برای مقایسه عملکرد چهار طرح پیشنهادی، پلیمر شدن مستیل

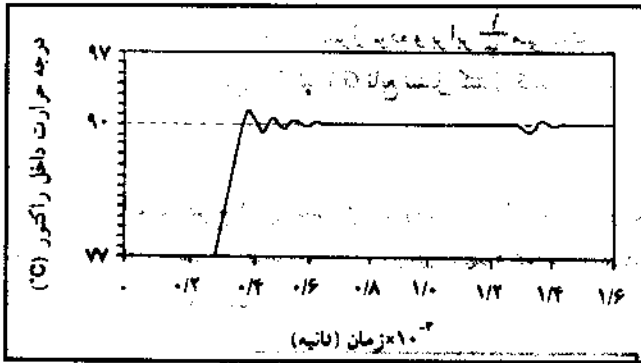
متاکریلات در شبیه‌سازی مورد استفاده قرار گرفته است.

در کلیه طرحها کنترل‌کننده حلقه اصلی (master) تناسبی انتگرالی (PI) در نظر گرفته شده و برای سه طرحی که به صورت متوالی می‌باشند، برای حلقه داخلی (slave) کنترل‌کننده تناسبی (P) منظور گردیده است. برای تنظیم کنترل‌کننده‌ها چندین تابع هدف از جمله $\int \dot{e} dt$ و $\int e^2 dt$ از راه شبیه‌سازی مورد بررسی قرار گرفته‌اند که با توجه به پاسخهای به دست آمده، تابع هدف $\int \dot{e} dt$ به عنوان بهترین معیار برای تنظیم پارامترهای کنترل‌کننده انتخاب شده است. مقادیر پارامترهای کنترل‌کننده‌ها و میزان آب مصرفی در هر طرح در جدول ۲ داده شده است. برای کنترل‌کننده‌های تناسبی - انتگرالی از یک ضد تجمع (anti-windup) به صورت متوقف کردن عمل انتگرال‌گیری در صورت اشباع شدن فرمان کنترل‌کننده استفاده شده است [4].

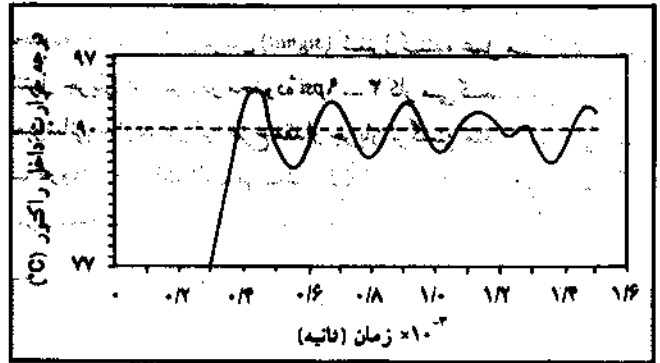
دمای اولیه راکتور $25^{\circ}C$ و دمای مطلوب $90^{\circ}C$ در نظر گرفته شده است. ثابت زمانی عنصر اندازه‌گیری دمای راکتور ۱۵ ثانیه و برای داخل ژاکت ۱۰ ثانیه در نظر گرفته شده است. نتایج شبیه‌سازی در شکل‌های ۷ تا ۱۰ نشان داده شده‌اند.



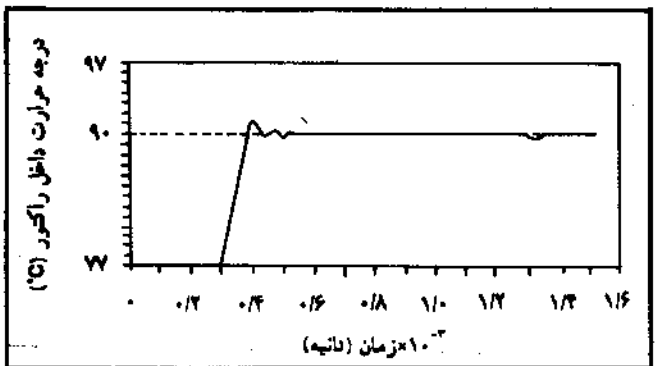
شکل ۹ - منحنی تغییرات دمای داخل راکتور بر حسب زمان برای طرح ۳



شکل ۱۰ - منحنی تغییرات دمای داخل راکتور بر حسب زمان برای طرح ۴



شکل ۷ - منحنی تغییرات دمای داخل راکتور بر حسب زمان برای طرح ۱



شکل ۸ - منحنی تغییرات دمای داخل راکتور بر حسب زمان برای طرح ۲

اشاره می‌شود که در تمام طرحها نوسانات دما در حدود زمانهای $1/2 \times 10^{-3}$ تا $1/4 \times 10^{-3}$ ثانیه مربوط به ظهور اثرزل است.

جدول ۱ - معرفی پارامترهای موجود در معادلات و شکلها.

A = سطح انتقال گرمایی ژاکت و راکتور

A_i = سطح داخلی انتقال گرما

A_o = سطح خارجی انتقال گرما

A_m = سطح متوسط انتقال گرما 0.9693

$$a = 1/41 \times 10^{-3} \frac{J}{Cs}$$

$$b = 0.04$$

$$c = 0.96$$

Cp_m : ظرفیت گرمایی مخلوط تعلیقی

Cp_j : ظرفیت گرمایی آب داخل ژاکت

$d = 0.005$ m ضخامت جداره راکتور

$D_T = 0.295$ قطر راکتور

$$D = \frac{D_T}{3}$$

قطر بروانه

$D_o = 0.78$ m قطر معادل (برای داخل ژاکت)

$$\mu = \frac{\text{Kg}}{\text{m.s}} \text{ گر انرژی در دمای دیواره: } \mu =$$

تایم زمانی عنصر اندازه گیر دمای داخل راکتور $\tau_m = 15 \text{ s}$

قدر مطلق خطا $|\theta| = |T - T_R|$

تایم زمانی زاکت $\tau_f = 11/88 \text{ s}$

تایم زمانی راکتور $\tau_p = 490 \text{ s}$

ردیف	ظرف	بهره کنترل	تایم زمانی	کنترل کننده	میزان مصرف	میزان مصرف
		(%)	(s)	(%)	۱۵۰°C آب	۲۵°C آب
					Kg	Kg
۱	۱/۲-۹۰۰	۱۰	۲	۲	۳۳۹۷	۲۶۰۲
۲	۲/۱۶۲-۱۰۰	۹۰	۲۷	۲۱	۳۳۲۱	۲۶۶۲
۳	۲/۱۳۱-۱۰۰	۷۵	۲۲	۲۵	۲۷۵۰	۲۱۳۷
۴	۲/۵۸۷-۱۰۰	۲۸	۷۵	۷۱	۱۸۳۰	۶۸۱

جدول ۲ - مقدار تابع هدف: پارامترهای کنترل کننده و میزان آب مصرفی برای طرحهای مختلف

نتیجه گیری

در طرح ۱ ملاحظه می شود که یک کنترل کننده تناسبی انترگالی به تنهایی قادر به کنترل دما نیست. در طرح ۲ وجود کنترل کننده متوالی باعث بهبود قابل توجه کنترل دما شده است. طرح ۲ از نقطه نظر کنترل دما بسیار خوب عمل می کند اما میزان آب سرد و گرم مصرفی در آن بالاست. برای کاهش میزان مصرف آب، طرح ۳ با نسبت برگشت ثابت آب داخل زاکت پیشنهاد شد. نسبت برگشت ۲۰٪ است و علت انتخاب این مقدار عدم توانایی کنترل دما در نسبتهای برگشت بیشتر است. در این نسبت برگشت، حدوداً ۲۰٪ در میزان آب مصرفی صرفه جویی می گردد. چنانچه نسبت برگشت از این حد تجاوز کند نوسانات در پاسخ باقی می ماند. برای صرفه جویی بیشتر در میزان آب مصرفی طرح ۴ پیشنهاد شد. در این طرح نسبت برگشت آب متغیر است و به همین دلیل می توان از گرمای واکنش برای حفظ دمای راکتور استفاده کرد و در نتیجه میزان مصرف آب سرد و گرم کاهش قابل توجهی پیدا می کند علاوه بر صرفه جویی در مصرف آب، کنترل دمای راکتور نیز در حد خوبی است. میزان مصرف آب در هر یک از طرحها در جدول ۲ ارائه شده است.

با توجه به نتایج شبیه سازی می توان طرح ۴ را به عنوان طرح بهینه انتخاب کرد. در پایان یادآور می شود که اگرچه از راه شبیه سازی کامپیوتری می توانیم طرح مناسبی را برای کنترل دمای راکتور انتخاب کنیم. ولی در عمل همواره مشکلاتی چون خطای وسیله اندازه گیری و نداشتن مدل فرایند وجود دارد که باید آنها را در نظر گرفت.

استفاده از کنترل کننده های پیچیده تر مانند کنترل کننده پیش خور (feed forward) و کنترل کننده های تطبیقی (adaptive) موضوع کارهای آتی است. بقیه در صفحه ۱۵۲

$$f = - 2/51 + 0/487 \text{ بازده آغاز گر}$$

$$I_0 = 0/02 \frac{\text{gmol}}{\text{L}} \text{ غلظت اولیه آغاز گر}$$

$$K : \frac{\text{J}}{\text{s.m.} \cdot \text{C}} \text{ رسانندگی گرمایی سیال داخل راکتور و داخل زاکت}$$

$$K_0 = 47/925 \frac{\text{J}}{\text{s.m.} \cdot \text{C}} \text{ رسانندگی گرمایی جدارة راکتور}$$

$$K_1 = \left(\frac{\text{J}}{\text{s}} \right) \text{ ثابت سرعت آغازی}$$

$$K_p = \left(\frac{\text{L}}{\text{gmol}} \right) \text{ ثابت سرعت انتشار}$$

$$K_i = \left(\frac{\text{L}}{\text{gmol}} \right) \text{ ثابت سرعت پایانی}$$

$$K_v = \frac{1}{3} \frac{\text{Kg}}{\text{s psi}} \text{ بهره شیر کنترل}$$

$$M_0 = 8899/99 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3} \text{ غلظت اولیه مونومر}$$

$$N = 2 \frac{\text{cycle}}{\text{s}} \text{ دور پروانه داخل راکتور}$$

$$P_r = \frac{C_p \mu}{k} \text{ عدد پرانتل}$$

T: دمای داخل راکتور (°C)

T_f: دمای داخل زاکت (°C)

T_i: دمای آب ورودی به زاکت (°C)

T_H = ۱۵۰ °C دمای آب گرم

T_c = ۲۵ °C دمای آب سرد

T_R = ۹۰ °C دمای مطلوب

$$U = 733 \frac{\text{J}}{\text{m}^2 \cdot \text{C} \cdot \text{s}} \text{ ضریب کلی انتقال گرما}$$

V_f: حجم زاکت (m³)

V_{mo} = ۰/۱ m³ حجم اولیه مخلوط تعلیقی

V_m = ۰/۰۲۵ m³ (فاز پلیمری) حجم اولیه فاز باسیده

ρ_m (Kg/m) جرم مخصوص مخلوط تعلیقی

ρ_f (Kg/m) جرم مخصوص آب داخل زاکت

μ: گر انرژی (Kg/m.s)