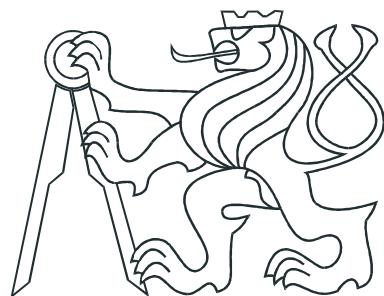


ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE  
FAKULTA ELEKTROTECHNICKÁ



DIPLOMOVÁ PRÁCE

Řízení technologického procesu  
kopolymeračního reaktoru

Praha, 2008

Autor: Aleš Kozojed

## **Prohlášení**

Prohlašuji, že jsem svou diplomovou práci vypracoval samostatně a použil jsem pouze podklady ( literaturu, projekty, SW atd.) uvedené v přiloženém seznamu.

V Praze dne

---

podpis

## **Poděkování**

Děkuji vedoucímu diplomové práce,  
panu Doc. Ing. Antonínu Stříbrskému, CSc. za jeho trpělivost a vstřícný přístup. Dále  
bych rád poděkoval panu Ing. Jaromíru Jelínkovi ze společnosti **UNIPETROL RPA,**  
**s.r.o.** za jeho neocenitelnou pomoc v otázkách polymerační jednotky a společnosti **PENTO,**  
**spol. s r.o.** za všeobecnou podporu při tvorbě této práce. Neopomenutelný dík patří mé  
rodině a přítelkyni.

# Abstrakt

Tato práce se zabývá vytvořením matematického modelu polymeracního reaktoru pro výrobu polypropylénu v plynné fázi. Primárním cílem práce je vytvoření matematického modelu popisující teplotní poměry v reaktoru. Sekundárním cílem je na vytvořený matematický model navrhnout regulátory, jejichž úkolem je stabilizace teploty v jednotlivých částech reaktoru.

V první části práce je popsána fyzikálně - chemická část polymerace propylénu, celý systém polymeracní jednotky a podrobněji popsán samotný polymerizační reaktor, který je ústředním členem celé jednotky a této práce.

Ve druhé části práce jsou odvozeny materiálová a entalpická bilance polymeracního reaktoru, jež slouží dále k odvození nelineárního matematického modelu popisujícího změnu teploty v reaktoru. Takto vytvořený model je dále linearizován. Lineární model je podroben analýze.

Ke stabilizaci teploty v reaktoru je v práci navržena sada fuzzy PD regulátorů. Třetí část práce se věnuje jejich návrhu.

Ve čtvrté části práce jsou vlastnosti navržených regulátoru ověřeny sérií simulací v softwarovém prostředí *Simulink*. Z těchto simulací vyplývá, že se podařilo navrhnout regulátory vhodné k řízení teploty namodelovaného systému. V závěru práce je diskutována případná implementace regulátoru do reálného procesu, respektive možnost jeho implementace v řídicím systému.

## **Abstract**

This thesis engages in creating the mathematical model of the polypropylene reactor for the production of polypropylene in the gas phase. The primary target of this work is to create the mathematical model which describes the temperature conditions in the polymerization reactor. Secondary target of this work is to design the regulators for the mathematical model, which was created in the primary part of this work. The main task for the designed regulators is to stabilize the temperature in the reactor.

In the first part of this work, the physical-chemistry principles of the polymerization of the polypropylene in the gas phase , the system of the polymerization unit and the polymerization reactor, the main part of the polymerization unit, are described.

In the second part of this work, the materials and energy balances of the polymerization reactor are derived. On the base of these balances, the non linear mathematical model, which describes the temperature conditions in the reactor, is derived. Non linear model is linearized in the working point of the reactor.

Fuzzy PD regulators are designed for the stabilization of the temperate in the reactor. Their design is described in the third part of this work. The regulators which were designed in the previous part are tested in the fourth part of this work. It follows from the tests that the design of all regulators was successful. All designed regulators stabilized the temperature in the reactor on the required temperature, without any important deviation. In the end of this work, the possibility of application of the designed regulators is discussed.

## Seznam použitých zkratek

Zkrateka	Význam
<b>Aktivní centrum</b>	Místo na povrchu katalyzátoru, kde dochází k polymeraci, aktivní centrum je tvořeno částicemi titanu.
<b>Alkeny</b>	Nenasycené uhlovodíky, které mají mezi atomy uhlíku v molekule s otevřeným řetězcem jednu dvojnou vazbu $C = C$ . Patří mezi alifatické sloučeniny. Do této skupiny patří například etylen a propylen.
<b>C3=</b>	Propylén v plynné fázi.
$C_3H_6$	Chemická značka propylenu.
<b>Izotaktický</b>	Druh polypropylénu, ve které jsou všechny metylové skupiny umístěny na stejné straně řetězce polymeru.
$H_2$	Chemická značka vodíku.
<b>Homopolymer</b>	Polymer vyrobený z jednoho typu monomeru, například polypropylén vyrobený z propylenu.
<b>HSBR</b>	Horizontální kontinuálně míchaný reaktor pro výrobu polypropylénu v plynné fázi.
<b>Katalytický systém</b>	Katalytický systém se skládá z katalyzátoru, kokatalyzátoru a externího modifikátoru.
<b>Katalyzátor</b>	Materiál, který je použit ke změně rychlosti chemické reakce, jako je polymerace, aniž by sám prošel jakoukoliv chemickou změnou.
<b>Kokatalyzátor</b>	Chemikálie požadovaná k aktivování katalyzátoru pro polymeraci.
<b>Kvenč</b>	Kapalina použitá ke chlazení, odparu. Zde propylén.

## Seznam použitých zkratek

Zkratka	Význam
Měrná tepelná kapacity	Množství tepla potřebné k ohřátí jednoho kilogramu látky o jeden teplotní stupeň.
Monomer	Organická látka použitá jako základní stavební blok budoucího polymeru, pro polypropylen je to propylen.
Modifikátor	Chemikálie, která působí na orientaci metylových skupin v řetězci polymeru, jak jsou vestavovány do řetězce, a vytváří jednu formu polypropylenu, například izotaktickou.
PP	Polypropylen.
Polymer	Velká molekula v podobě dlouhého řetězce. Tento řetězec se skládá z mnoha malých molekul, monomerů.
$TiCl_4$	Chlorid titaničitý, forma titanu v katalyzátoru.
ITT	Index toku taveniny. Je definován jako hmotnost polymeru, která je vytlačena definovanou tryskou v přístroji pro měření rychlosti tečení za deset minut. ITT slouží k indikaci molekulové hmotnosti polymeru a tekutosti jeho taveniny. Polymery s vysokou rychlostí tečení mají nízkou viskozitu taveniny a nízkou molekulovou hmotnost.
Rozložení doby prodlení	Rozsah časů, po které se částice zdrží v reaktoru.
VSBR	Vertikální kontinuálně míchaný průtočný reaktor, nádoba, ve které jsou jednotlivé složky dokonale míchány.
Zpětně promíchávaný	Stejný význam jako dobře promíchaný.

# Seznam použitých zkratek

## Fuzzy řízení

Zkratka	Význam
<b>Z</b>	Záporná.
<b>ZS</b>	Záporná Střední.
<b>ZV</b>	Záporná Velká.
<b>NU</b>	NUlová.
<b>K</b>	Kladná.
<b>KS</b>	Kladná Střední.
<b>KV</b>	Kladná Velká.
<b>e(k)</b>	Regulační odchylka
<b>de(k)</b>	Změna regulační odchylky
<b>u(k)</b>	Akční zásah fuzzy regulátoru
$\mu$	Stupeň příslušnosti

## Stavový popis

Zkratka	Význam
<b>A, B, C, D</b>	Matici stavového popisu.
<b>x</b>	Stavový vektor.
<b>y</b>	Vektor výstupů.
<b>u</b>	Vektor řízení.

## Seznam použitých veličin

Parametr	Popis veličiny	Jednotka
$Q_{CAT}$	Průtok katalyzátoru do reaktoru <b>R1</b>	[ kg.h <sup>-1</sup> ]
$Q_{QW}$	Celkový průtok kvenče do reaktoru <b>R2</b>	[ kg.h <sup>-1</sup> ]
$Q_{QW1} - Q_{QW4}$	Průtok kvenče do zón $Z_1 - Z_4$ reaktoru <b>R2</b>	[ kg.h <sup>-1</sup> ]
$Q_{QW11} - Q_{QW43}$	Průtok kvenče do subzón $Z_{11} - Z_{43}$ reaktoru <b>R2</b>	[ kg.h <sup>-1</sup> ]
$Q_{C3=1} - Q_{C3=4}$	Průtok propylénu do zón $Z_1 - Z_4$ reaktoru <b>R2</b>	[ kg.h <sup>-1</sup> ]
$Q_{C3=11} - Q_{C3=43}$	Průtok propylénu do subzón $Z_{11} - Z_{43}$ reaktoru <b>R2</b>	[ kg.h <sup>-1</sup> ]
$Q_{PPIN01} - Q_{PPIN02}$	Průtok polypropylénu z prvního reaktoru <b>R1</b> do subzóny $Z_{11}$ a $Z_{12}$ druhého reaktoru <b>R2</b>	[ kg.h <sup>-1</sup> ]
$Q_{PPOUT01} - Q_{PPOUT02}$	Průtok polypropylénu z druhého reaktoru <b>R2</b>	[ kg.h <sup>-1</sup> ]
$Q_{PP11} - Q_{PP43}$	Průtok polypropylénu ze subzón $Z_{11} - Z_{43}$ druhého reaktoru <b>R2</b>	[ kg.h <sup>-1</sup> ]
$Q_R$	Průtok reaktorového plynu z druhého reaktoru <b>R2</b>	[ kg.h <sup>-1</sup> ]
$Q_{R11} - Q_{R43}$	Průtok reaktorového plynu ze subzón $Z_{11} - Z_{43}$ druhého reaktoru <b>R2</b>	[ kg.h <sup>-1</sup> ]
$R_P$	Obecné množství vyrobeného polypropylénu vztázené na kilogram katalyzátoru	[ kg.kg <sup>-1</sup> .h <sup>-1</sup> ]
$R_{PR1} - R_{PR1}$	Množství polypropylénu vyrobené na kilogram katalyzátoru v reaktorech <b>R1</b> a <b>R2</b>	[ kg.kg <sup>-1</sup> .h <sup>-1</sup> ]
$R_{PR11} - R_{PR43}$	Množství polypropylénu vyrobené na kilogram katalyzátoru v jednotlivých v subzónách $Z_{11} - Z_{43}$ reaktoru <b>R2</b>	[ kg.kg <sup>-1</sup> .h <sup>-1</sup> ]
$k_{R1}$	Parametr množství vyrobeného polypropylénu v reaktoru <b>R1</b>	[ kg.h <sup>-1</sup> ]

## Seznam použitých veličin

Parametr	Popis veličiny	Jednotka
$k_{11} - k_{43}$	Parametr množství vyrobeného polypropylénu v subzónách $Z_{11} - Z_{43}$	[ kg.h <sup>-1</sup> ]
$W_{i_x}$	Energie, energetický tok, $i$ označuje číslo subzóny, $x$ jednu ze složek I. - IX.	[ kJ.h <sup>-1</sup> ]
$k_{R1}$	Parametr množství vyrobeného polypropylénu v reaktoru <b>R1</b>	[ kg.h <sup>-1</sup> ]
$k_{11} - k_{43}$	Parametr množství vyrobeného polypropylénu v subzónách $Z_{11} - Z_{43}$ reaktoru <b>R2</b>	[ kg.h <sup>-1</sup> ]
$T_{11} - T_{11}$	Teploty v subzónách $Z_{11} - Z_{43}$ reaktoru <b>R2</b>	[ K ]
$T_M$	Teplota tání polypropylénového prášku	[ K ]
$T_B$	Pracovní teplota v reaktoru <b>R2</b>	[ K ]
$T_{VAP}$	Teplota varu kvenče při $P = 2.2 \text{ MPa}$	[ K ]
$T_{REF}$	Referenční teplota v druhém reaktoru <b>R2</b>	[ K ]
$T_{QW}$	Teplota kvenče na vstupu do reaktoru <b>R2</b>	[ K ]
$T_{C3=}$	Teplota propylénu na vstupu do reaktoru <b>R2</b>	[ K ]
$T_{PP}$	Teplota polypropylénu vstupujícího do reaktoru <b>R2</b>	[ K ]
$C_{PS}$	Měrná tepelná kapacita polypropylénu	[ kJ.kg <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup> ]
$C_{PG}$	Měrná tepelná kapacita propylénu	[ kJ.kg <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup> ]
$C_{PML}$	Měrná tepelná kapacita kvenče	[ kJ.kg <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup> ]
$\Psi$	Celková tepelná kapacita reaktoru <b>R2</b>	[ kJ.K <sup>-1</sup> ]
$\Psi_{VL}$	Celková tepelná kapacita reaktorového plynu v reaktoru <b>R2</b>	[ kJ.K <sup>-1</sup> ]
$\Psi_{PB}$	Celková tepelná kapacita práškového lože v reaktoru <b>R2</b>	[ kJ.K <sup>-1</sup> ]
$\Delta H_R$	Polymerační teplo	[ kJ.kg <sup>-1</sup> ]
$\Delta H_{VAP}$	Měrné výparné teplo kvenče	[ kJ.kg <sup>-1</sup> ]

## Seznam použitých veličin

Parametr	Popis veličiny	Jednotka
$V$	Objem reaktoru <b>R2</b>	[ $m^3$ ]
$P$	Tlak v reaktoru <b>R2</b>	[ $MPa$ ]
$\epsilon$	Mezerovitost práškového lože reaktoru	[ $-$ ]
$\rho_{PP_B}$	Sypná hustota polypropylénu	[ $kg.m^{-3}$ ]
$\rho_{PP_T}$	Hustota polypropylénu	[ $kg.m^{-3}$ ]
$\rho_{C3=}$	Hustota propylénu	[ $kg.m^{-3}$ ]
$M_{PP}$	Molekulová hmotnost propylénu	[ $kg.mol^{-1}$ ]
$f$	Objemový zlomek práškového lože reaktoru	[ $-$ ]
<b>R2</b>		
$m_{PB}$	Hmotnost polypropylénového prášku tvořícího práškové lože reaktoru <b>R2</b>	[ $kg$ ]
$\mathfrak{R}$	Universální plynová konstanta	[ $MPa.m^3.mol^{-1}.K^{-1}$ ]
$L_Q$	Parametr zpětného toku	[ $-$ ]

vložit originální zadání!!!!!!

# Obsah

<b>Seznam obrázků</b>	<b>xiv</b>
<b>Seznam tabulek</b>	<b>xvii</b>
<b>1 Úvod</b>	<b>1</b>
<b>2 Technologický popis modelu</b>	<b>3</b>
2.1 Fyzikálně chemický popis polymerace . . . . .	3
2.2 Propylénová polymerační jednotka . . . . .	7
<b>3 Model reaktoru</b>	<b>12</b>
3.1 Bilance reaktoru . . . . .	15
3.1.1 Materiálová bilance HSBR reaktoru . . . . .	17
3.1.2 Entalpická bilance . . . . .	18
3.2 Nelineární model reaktoru . . . . .	24
3.2.1 Kinetický model . . . . .	27
3.2.2 Technologické podmínky . . . . .	32
3.3 Lineární model . . . . .	34
<b>4 Fuzzy řízení</b>	<b>35</b>
4.1 Fuzzy PD regulátor . . . . .	36
4.2 Fuzzyfikace . . . . .	37
4.2.1 Funkce příslušnosti fuzzy PD regulátorů . . . . .	38
4.3 Tvorba pravidel . . . . .	43
4.3.1 Pravidla fuzzy PD regulátoru . . . . .	43
4.4 Infereční mechanismus . . . . .	45
4.4.1 Defuzzyfikace . . . . .	47
4.5 Nastavení fuzzy PD regulátoru . . . . .	49

<b>5 Simulace</b>	<b>50</b>
5.1 Odezva modelu na jednotkový skok . . . . .	51
5.2 Odezva modelu na pulzní změnu poruchové veličiny . . . . .	57
5.3 Odezva modelu na náhodnou změnu poruchy . . . . .	62
5.4 Test regulátorů na změnu reference . . . . .	67
<b>6 Závěr</b>	<b>74</b>
<b>Literatura</b>	<b>77</b>
<b>A Simulinková simulační schémata zapojení</b>	<b>I</b>
<b>B Obsah přiloženého CD</b>	<b>XV</b>
<b>C Seznam použitého softwaru</b>	<b>XVIII</b>

# Seznam obrázků

2.1	Izotaktická a ataktická forma polypropylénového řetězu . . . . .	4
2.2	Zjednodušené schéma zapojení polymeračních reaktorů . . . . .	7
2.3	Druhý polymerační reaktor . . . . .	9
2.4	Systém druhého polymeračního reaktoru . . . . .	10
2.5	Rozmístění vstupů kvenče a propylénu do reaktoru . . . . .	11
3.1	Rozložení HSBR reaktoru na sérii VSBR reaktorů . . . . .	12
3.2	Příklad doby prodlení v VSBR reaktoru . . . . .	13
3.3	Materiálová bilance zóny $Z_1$ . . . . .	17
3.4	Měrné skupenské výparné teplo propylénu . . . . .	19
3.5	Procesní data skutečného polypropylénového reaktoru, subzón $Z_{11} - Z_{23}$ .	29
3.6	Procesní data skutečného polypropylénového reaktoru, subzón $Z_{31} - Z_{43}$ .	29
3.7	Histogram celkové výroby polypropylénu . . . . .	30
4.1	Základní obecná struktura fuzzy regulátoru . . . . .	35
4.2	Struktura fuzzy PD regulátoru . . . . .	36
4.3	Implementace fuzzy PD regulátoru ve <i>Fuzzy Logic Toolbox</i> . . . . .	37
4.4	Rozsah vstupních funkcí příslušnosti všech fuzzy PD regulátorů . . . .	39
4.5	Rozsah výstupních funkcí příslušnosti fuzzy regulátorů, subzóny $Z_{11}, Z_{12}$	40
4.6	Rozsah výstupních funkcí příslušnosti fuzzy regulátorů, subzóny $Z_{13}, Z_{21}$	40
4.7	Rozsah výstupních funkcí příslušnosti fuzzy regulátorů, subzóny $Z_{22}, Z_{23}$	41
4.8	Rozsah výstupních funkcí příslušnosti fuzzy regulátorů, subzóny $Z_{31}, Z_{32}$	41
4.9	Rozsah výstupních funkcí příslušnosti fuzzy regulátorů, subzóny $Z_{33}, Z_{41}$	42
4.10	Rozsah výstupních funkcí příslušnosti fuzzy regulátorů, subzóny $Z_{42}, Z_{43}$	42
4.11	Inferenční mechanismus . . . . .	46
4.12	Příklady jednotlivých metod defuzzyfikací . . . . .	48
4.13	Realizace fuzzy PD regulátoru v <i>simulinku</i> . . . . .	49

5.1	Průtok katalyzátoru $Q_{CAT}$	51
5.2	Simulace neurčitosti průtoku kvenče na výstupu z regulátoru	52
5.3	Referenční teplota všech fuzzy regulátorů	52
5.4	Teplota v zóně $Z_1$	53
5.5	Teplota v zóně $Z_2$	53
5.6	Teplota v zóně $Z_3$	54
5.7	Teplota v zóně $Z_4$	54
5.8	Akční zásah regulátoru - průtok kvenče, zóna $Z_1$	55
5.9	Akční zásah regulátoru - průtok kvenče, zóna $Z_2$	55
5.10	Akční zásah regulátoru - průtok kvenče, zóna $Z_3$	56
5.11	Akční zásah regulátoru - průtok kvenče, zóna $Z_4$	56
5.12	Průtok katalyzátoru $Q_{CAT}$	57
5.13	Referenční teplota všech fuzzy regulátorů	58
5.14	Teplota v zóně $Z_1$	58
5.15	Teplota v zóně $Z_2$	59
5.16	Teplota v zóně $Z_3$	59
5.17	Teplota v zóně $Z_4$	60
5.18	Akční zásah regulátoru - průtok kvenče, zóna $Z_1$	60
5.19	Akční zásah regulátoru - průtok kvenče, zóna $Z_2$	61
5.20	Akční zásah regulátoru - průtok kvenče, zóna $Z_3$	61
5.21	Akční zásah regulátoru - průtok kvenče, zóna $Z_4$	62
5.22	Průtok katalyzátoru $Q_{CAT}$	63
5.23	Teplota v zóně $Z_1$	63
5.24	Teplota v zóně $Z_2$	64
5.25	Teplota v zóně $Z_3$	64
5.26	Teplota v zóně $Z_4$	65
5.27	Akční zásah regulátoru - průtok kvenče, zóna $Z_1$	65
5.28	Akční zásah regulátoru - průtok kvenče, zóna $Z_2$	66
5.29	Akční zásah regulátoru - průtok kvenče, zóna $Z_3$	66
5.30	Akční zásah regulátoru - průtok kvenče, zóna $Z_4$	67
5.31	Průtok katalyzátoru $Q_{CAT}$	68
5.32	Referenční teploty fuzzy regulátorů	69
5.33	Teplota v zóně $Z_1$	69
5.34	Teplota v zóně $Z_2$	70
5.35	Teplota v zóně $Z_3$	70

5.36	Teplota v zóně $Z_4$	71
5.37	Akční zásah regulátoru - průtok kvenče, zóna $Z_1$	71
5.38	Akční zásah regulátoru - průtok kvenče, zóna $Z_2$	72
5.39	Akční zásah regulátoru - průtok kvenče, zóna $Z_3$	72
5.40	Akční zásah regulátoru - průtok kvenče, zóna $Z_4$	73
A.1	Celkové zapojení modelu reaktoru v prostředí <i>Simulink</i>	II
A.2	Simulinkové zapojení bloku <b>VAR</b>	III
A.3	Simulinkové zapojení zóny $Z_1$	IV
A.4	Simulinkové zapojení subzóny $Z_{11}$	V
A.5	Simulinkové zapojení subzóny $Z_{43}$	VI
A.6	Simulinkové zapojení bloku <b>REAKCE</b> , subzóna $Z_{11}$	VII
A.7	Simulinkové zapojení bloku <b>PRODUKCE</b> , subzóna $Z_{11}$	VIII
A.8	Simulinkové zapojení bloku <b>PREMENA</b> , subzóna $Z_{11}$	IX
A.9	Simulinkové zapojení bloku <b>VYNOS_PP</b> , subzóna $Z_{43}$	X
A.10	Simulinkové zapojení bloku <b>PP_Z_R1</b> , subzóna $Z_{11}$	XI
A.11	Simulinkové zapojení bloku <b>KVENC</b> , subzóna $Z_{11}$	XII
A.12	Simulinkové zapojení bloku <b>C3=</b> , subzóna $Z_{11}$	XIII
A.13	Simulinkové zapojení bloku <b>FUZZY_ZONA_1</b> , subzóna $Z_{11}$	XIV

# Seznam tabulek

3.1	Provozní podmínky druhého polymeračného reaktoru - Teploty . . . . .	32
3.2	Provozní podmínky druhého polymeračného reaktoru - Průtoky . . . . .	32
3.3	Provozní podmínky druhého polymeračného reaktoru - Ostatní . . . . .	33
3.4	Parametry výroby polypropylénu v jednolivých subzónách . . . . .	33
4.1	Rozsah funkcí příslušnosti fuzzy regulátorů pro subzóny $Z_{11} - Z_{23}$ . . .	38
4.2	Rozsah funkcí příslušnosti fuzzy regulátorů pro subzóny $Z_{31} - Z_{43}$ . . .	39
4.3	Pravidla fuzzy PD regulátoru . . . . .	43
4.4	Pravidla fuzzy PD regulátoru . . . . .	44
4.5	Příklady pravidel . . . . .	45
4.6	Váhy fuzzy regulátorů . . . . .	49
5.1	Změněné referenční teploty v zónách . . . . .	67

# Kapitola 1

## Úvod

Primární cílem této diplomové práce je vytvoření matematického modelu popisujícího teplotní poměry v polymeračním reaktoru. Reaktor je součástí propylénové polymerační jednotky, jenž je postavena dle licence americké společnosti **BP AMOCO** (BUCELLI A., CARACOTSIOS, M., 1993) (stejný technologický postup výroby ve své licenci používá i Japonská společnost **CHISSO** (CHISSO GAS PHASE PP PROCESS , cit. 2008–05–04)) a využívá dvou do série zapojených reaktorů. V obou reaktorech je polypropylén vyráběn v plynné fázi, což je dnes celosvětově nejužívanější způsob výroby nejen polypropylenu, ale i dalších polymerů založených na alkenech.

Sekundárním cílem práce je návrh zpětnovazebních regulátorů stabilizujících teplotu v jednotlivých subzónách (délčí část reaktoru) na teplotě  $T_{REF} = 353\text{ K}$ .

Podstatou výroby polymeru (polypropylénu, polyetylénu...) v plynné fázi je kontakt plynného alkenu s katalyzátorem Zigler-Nattova typu (**ZIEGLER-NATTA CATALYST**, cit. 2008–05–05) v pevné fázi za vzniku pevného, krystalického polymeru, který vzniká ve formě prášku. Tento typ katalyzátoru je pojmenován po svých tvůrcích, Němci Karlu Zieglerovi a Italu Giulio Nattovi, kteří v druhé polovině dvacátého století objevili možnost přivést relativně rychle plynný etylén nebo propylén k polymeraci použitím látek na bázi hliníku, nebo titanu za poměrně nízkého tlaku (řádově jednotky  $\text{MPa}$ ) a teploty (přibližně  $340K - 350K$ ). Za tento objev byli v roce 1963 odměněni Nobelovou cenou za chemii.

Polymerace alkenů je obecně exotermní reakce, doprovázená uvolněním značného množství tepla, které je z reaktoru nutné odvést. Chlazení reaktoru je realizováno odpařováním kvenče, čímž dochází k odebrání polymeračního tepla a zároveň se tímto do reaktoru dodává nový monomer potřebný k další reakci - polymeraci. Toto vede k jednoznačnému požadavku na provozní podmínky, které musí být udržovány v reaktoru pro správný průběh polymerace. Teplota musí být v reaktoru udržována na konstantní hod-

notě, které je z intervalu  $T = \langle 333K; 445K \rangle$ , kde  $T = 333\text{ K}$  je teplota při níž nastává var kvenče za tlaku  $P = 2.2\text{ MPa}$ . Horní mez intervalu je dána teplotou tání polypropylénu  $T_M$ .

Polymerační reaktor navržený dle výše uvedené technologie je horizontální tlaková nádoba vybavená míchadlem. Tento reaktor je podél své horizontální osy rozdělen do několika stejně velkých virtuálních zón, každá zóna je dále členěna na stejně velké virtuální subzóny (pojem virtuální je nutno chápat ve smyslu absence pevných přepážek, které by jednotlivé zóny, subzóny dělily od sebe navzájem). Zóny jsou značeny postupně  $Z_1$  až  $Z_4$ . Subzóny sdílejí část značení se zónou, pod kterou spadají, tedy subzóny zóny  $Z_1$  jsou po řadě značeny  $Z_{11}$ ,  $Z_{12}$  a  $Z_{13}$ . Tento princip je použit při značení všech dalších subzón.

Část objemu reaktoru (zhruba polovinu) je nutné před započetím samotné výroby polypropylénu „vybavit“ určitým množstvím konečného produktu, polypropylénu. Objem reaktoru, který je zaplněn polypropylénem se nazývá **práškové lože** reaktoru, jehož hladina je během výroby udržována konstantní. Do práškového lože je dispergovaný katalyzátor, který je díky míchadlu reaktoru rovnoměrně rozmíchán v celém objemu práškového lože a reaguje s propylénem v plynné fázi. Monomer pro polymeraci je do reaktoru přiváděn ve dvou fázích. Do spodní části reaktoru je dávkován v plynné, do horní části pak ve fázi kapalné. Jak bylo řečeno výše, kvenč zároveň slouží k chlazení celého reaktoru. Plynná fáze přiváděného propylenu slouží k vytvoření vznosu práškového lože usnadňující proces míchání.

Polymerační jednotka je navržena tak, aby umožňovala výrobu několika typů polymerů, založených na propylénu. Nejjednodušším z nich je takzvaný **homopolymer**, který se vyrábí polymerací samotného propylénu, bez přítomnosti ostatních alkenů. V této práci je v obou reaktorech vyráběn stejný produkt - **homopolymer** propylénu. Do reaktoru se tedy jako monomer přidává pouze propylén.

Mezi další druhy polymerů, které je jednotka schopna produkovat patří impakt kopolymery a random kopolymery. V těchto případech se bud' do obou, nebo pouze do druhého polymeračního reaktoru přidává společně s propylénem další monomer, etylén.

# Kapitola 2

## Technologický popis modelu

Nejdříve stručně popíší základní průběh polymerace. Dále pak nejdůležitější součásti polymerační jednotky a samotný druhý polymerační reaktor, aby vznikla ucelená představa o fungování celého technologického procesu.

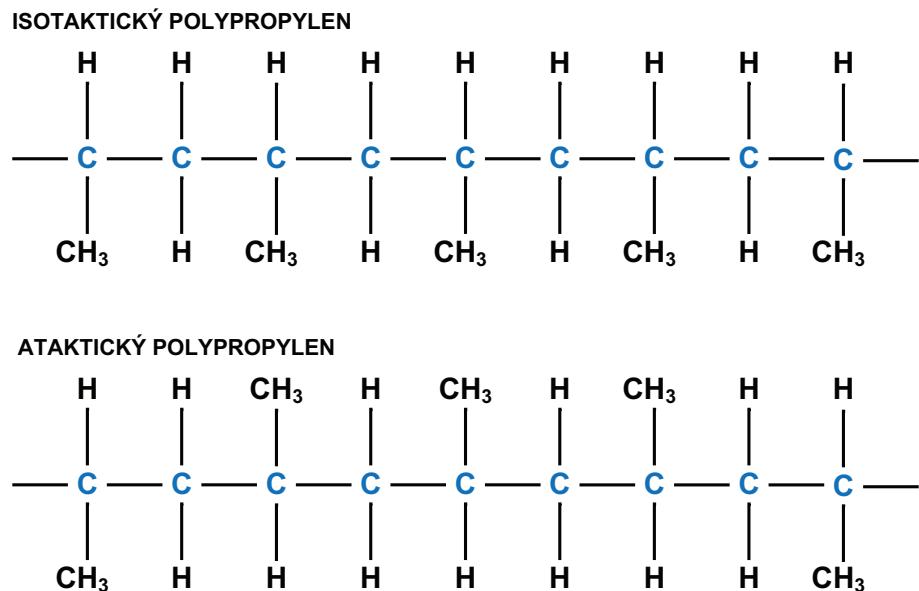
### 2.1 Fyzikálně chemický popis polymerace

Nejdříve je nutné uvést alespoň základní popis katalytického systému, bez kterého, jak je poznamenáno v úvodní kapitole diplomové práce by polymerace v plynné fázi nebyla možná. Katalytický systém se skládá ze tří základních částí - katalyzátoru, kokatalyzátoru a externího modifikátoru.

Katalyzátor neovlivňuje rovnováhu chemické reakce, ale jeho působením se dosahuje jejího rychlejšího dosažení. Jeho funkce spočívá v tom, že výsledné přeměny je dosahováno jinou, energeticky méně náročnou cestou, než v případě nekatalyzované reakce. Katalyzátor uskutečňuje chemickou přeměnu látek reakcí, jejíž aktivační energie je menší, než aktivační energie nekatalyzované reakce (BARTOVSKÁ, N, 2008). Při výrobě polypropylénu v plynné fázi dochází k tzv. heterogenní katalýze, protože katalyzátor a propylén jsou v jiné fázi.

Katalyzátor se skládá z  $TiCl_4$  a interního modifikátoru. Ty jsou společně naneseny na tzv. nosič a slouží jako základ budoucího aktivního centra pro polymeraci, které je vytvořeno při reakci katalyzátoru s kokatalyzátorem. Externí modifikátor slouží k řízení vnitřní konzistence výsledného polypropylénu. Jeho působením vzniká vysoce ataktický polypropylen, který má požadované mechanické vlastnosti. Obrázek 2.1 zobrazuje rozdíl

mezi ataktickou a izotakticou formou polypropylénu. Ke stejnemu účelu slouží i interní modifikátor obsažený v katalyzátoru.



Obrázek 2.1: Izotaktická a ataktická forma polypropylénového řetězu

Katalyzátory, které se používají pro polymeraci v plynné fázi (katalyzátory Zigler - Nattova typu) se s rostoucí dobou prodlení v reaktoru kazí<sup>1</sup> - klesá jejich aktivita, tedy schopnost konverze propylénu na polypropylén. Tento fakt bude zřejmý dále, při odvození matematického modelu reaktoru, kde bude zřetelné, že v různých místech reaktoru je různá konverze propylénu na polypropylén.

Polymerace polypropylénu v plynné fázi je řetězová reakce, skládající se ze čtyř následujících po sobě jdoucích fází. Vzhledem ke značné složitosti dějů, které probíhají v rámci polymerace se omezím pouze na základní popis reakce.

- Aktivace:** Katalyzátor (CAT) reaguje s kokatalyzátorem (COCAT) a aktivuje Ti pro polymeraci. Vytváří se tak komplex katalyzátor - kokatalyzátor ( $P_{0,i}$ ), kde Ti obsažené v katalyzátoru je aktivním centrem polymerace.



kde  $k_{act,i}$  je rychlostní konstanta aktivace katalyzátoru.

---

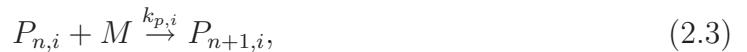
<sup>1</sup>Zde předpokládám reaktor, ve kterém probíhá polymerace

- 2. Iniciace:** Molekula propylénu ( $M$ ) se sama vpravuje do aktivního centra ( $P_{0,i}$ ), aby vytvořila začátek polypropylénového řetězu ( $P_{1,i}$ ).



kde  $k_{ini,i}$  je rychlostní konstanta iniciace polymerového řetězce.

- 3. Propagace:** Molekuly propylénu ( $M$ ) se postupně vpravují mezi aktivní centrum a řetěz polymeru ( $P_{n,i}$ ) narůstá vnějším směrem (šíří se) z povrchu částice katalyzátoru.



kde  $k_{p,i}$  je rychlostní konstanta propagace.

- 4. Terminace (ukončení):** Řetězec polymeru je zakončen vsunutím terminační látky, nejčastěji vodíkem ( $H_2$ ). Ten se sám vpravuje do aktivního centra a ukončuje polymerační řetězec,



kde  $k_{th,i}$  je rychlostní konstanta přesunu s vodíkem,  $D_n$  je neaktivní - zakončený řetězec polymeru,  $P_{0,i}$  je začátek nového polymerového řetězce - terminace vodíkem je následována rychlým vsunutím molekuly propylénu do vazby **aktivní centrum - vodík** a začíná nový řetěz polymeru. Více o polymeraci nejen propylenu např. v (KHARE, N. P., 2003).

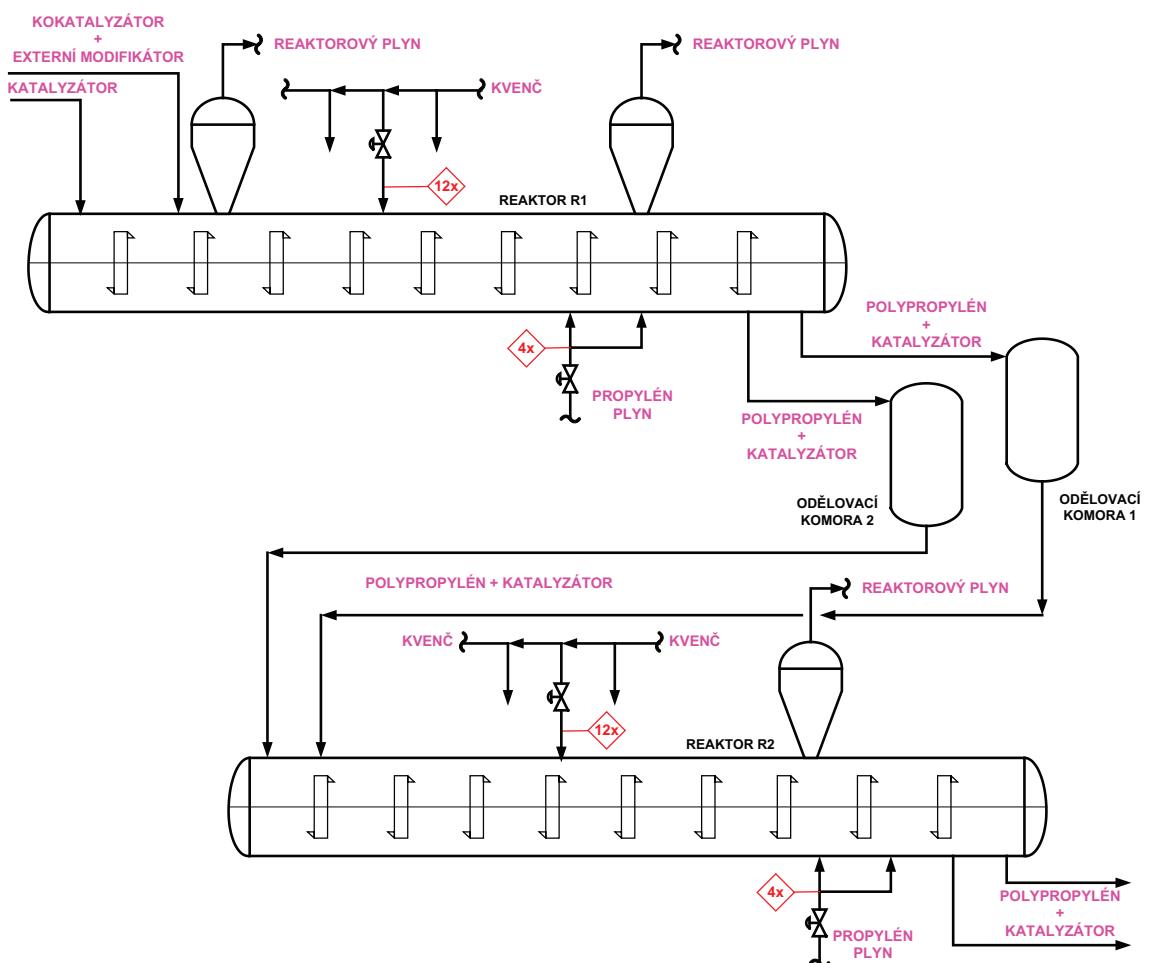
Vodík se používá k řízení molekulové hmotnosti výsledného polypropylénu. Narůstající koncentrace vodíku v reaktoru vede k vyšší intenzitě ukončování řetězců polymeru, což vede k nižší molekulové hmotnosti. Naopak, snižující se koncentrace vodíku v reaktoru má za následek prodlužování řetězců polymeru čímž se molekulová hmotnost zvětšuje. V procesu výroby polypropylénu v plynné fázi je koncentrace vodíku v reaktoru upravována tak, aby výsledný polypropylén měl požadovaný index toku taveniny.

Pro správný průběh polymerace propylénu v plynné fázi je potřeba splnit několik základních technologických požadavků, mezi něž patří správné dávkování jednotlivých

komponent katalytického systému a dodržení požadovaných reakčních podmínek. Mezi nejzákladnější reakční podmínky platí udržování stálého tlaku a teploty uvnitř reaktoru. Jak bylo uvedeno v úvodu práce, polymerace je exotermní reakce, v jejímž průběhu dochází k uvolnění velkého množství tepla ( $\Delta H_R = -2617 \text{ kJ.kg}^{-1}$  (KHARE, N. P., 2003)), ke kterému dochází zejména ve fázi propagace a terminace řetězce. Při hodinové kapacitě výroby reaktoru přibližně 12000 kg polypropylénu je z druhého polymeračního reaktoru nutné za hodinu odvést ( $31 \cdot 10^6 \text{ kJ}$ ) energie.

## 2.2 Propylénová polymerační jednotka

Polymerační jednotka pro výrobu polypropylénu v plynné fázi se typicky skládá ze dvou stejně velkých reaktorů zapojených v sérii. Oba reaktory jsou horizontální válcové tlakové nádoby o délce přibližně čtrnácti metrů a průměru tři metry vybavené míchadly a reaktorovým dómem. Na obrázku 2.2 je patrné jejich vzájemné zapojení a dávkovaní katalytického systému do reaktorů. Všechny tři složky katalytického systému, tedy katalyzátor, kokatalyzátor a externí modifikátor jsou přímo dávkovány pouze do prvního reaktoru. Jak bylo uvedeno v úvodu, oba reaktory musí být před začátkem polymerace „vybaveny“ určitým množstvím polypropylénového prášku - **práškovým ložem**.



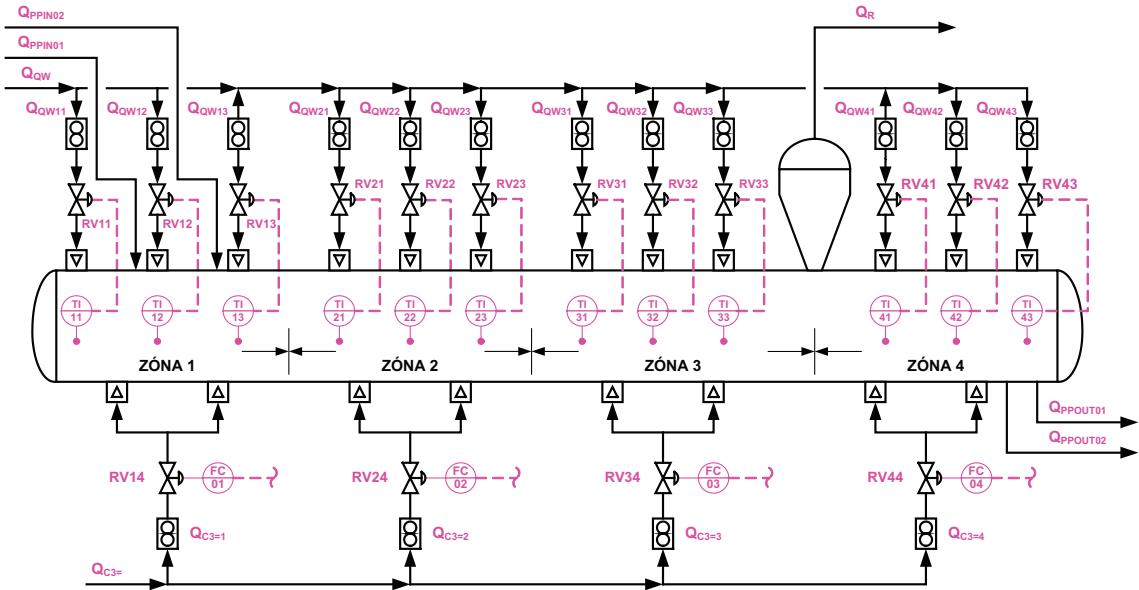
Obrázek 2.2: Zjednodušené schéma zapojení polymeračních reaktorů

Katalyzátor, kokatalyzátor a modifikátorem se do prvního reaktoru dávkují z technologických důvodů odděleně, jak je zobrazeno na obrázku 2.2. Ihned po střetu katalyzátoru

s kokatalyzátorem v reaktoru dojde k aktivaci katalyzátoru (vytvoří se aktivní centrum polymerace - dále již budu používat pouze termín katalyzátor), která je následována produkcí polypropylénu v reaktoru. Polymerace probíhá v celém objemu práškového lože reaktoru, což je způsobeno kontinuálním přidáváním katalyzátoru do reaktoru, míchadly, která rozmíchávají katalyzátor v práškovém loži a udržují zároveň polypropylénový prášek ve vznosu (je nutné poznamenat, že míchadla jsou v reaktorech radiální a tím vytváří stejně velké síly v i proti směru toku prášku) a produkci samotného polypropylénu - s produkci polypropylénu v reaktoru se zvyšuje hladina práškového lože, což vyvolá reakci regulátoru hladiny, který odpouští patřičnou část objemu prášku z reaktoru střídavě jednou z vypouštěcích armatur. Tímto v reaktoru vzniká tok prášku od jeho přední části ke konci, kde jsou umístěny vypouštěcí armatury prášku z reaktoru. Podle vědeckých studií (GORBACH A. B., NAIK, S. D., RAY, W. H., 2000), (DITTRICH, CH. J., MUSTERS, S. M. P., 2007) v reaktoru nastává i tzv. zpětný tok polypropylenového prášku, jak bude uvedeno dále.

Polypropylénový prášek vypouštěný z prvního polymeračního reaktoru obsahuje dosatečně aktivní katalyzátor pro pokračování reakce v druhém reaktoru - do druhého reaktoru se přímo nedávkuje žádná část katalytického systému, ten do druhého reaktoru přichází společně s polypropylénovým práškem z prvního reaktoru. Je nutno podotknout, že obsah katalyzátoru v prášku vyjadřený hmotnostním zlomkem je přibližně  $2.5 \cdot 10^{-4}$ . Do druhého reaktoru se propylénový prášek s kokatalyzátorem dostávají přes systém oddělovacích komor, které oba reaktory tlakově oddělují. Z oddělovacích komor je prášek doprovázen přímo do druhého reaktoru.

Systém druhého reaktoru je zobrazen na 2.4. Polypropylénový prášek do reaktoru vstupuje z oddělovacích komor skrze vstupy  $Q_{INPP01}$  a  $Q_{INPP02}$ . Po vstupu prášku, který obsahuje aktivní katalyzátor z prvního reaktoru okamžitě dochází k reakci katalyzátoru s okolním plynným propylénem. Tímto dochází k uvolnění polymeračního tepla, které je ze systému nutné odvést, aby zůstaly zachovány technologické podmínky reakce (teplota a s ní související tlak). Odvod polymeračního tepla z reaktoru je zajištěn odparem kapalného kvenče, který je do reaktoru dávkován přes dvanáct trysek umístěných na horní straně reaktoru po celé jeho délce. Jeho množství je řízeno regulačními armaturami od dvanácti senzorů teploty umístěných pod každým vstupem kvenče v práškovém loži reaktoru, jak zobrazuje obrázek 2.3.



Obrázek 2.3: Druhý polymerační reaktor

Kvenč ( $Q_{QW11}$  -  $Q_{QW43}$ ) přivedený do reaktoru se vzhledem k technologickým podmínkám v reaktoru okamžitě odpaří, čímž absorbuje vzniklé polymerační teplo a zároveň tím do reaktoru přivede čerstvý propylén nutný pro pokračování polymerace. Pokud by do reaktoru bylo přivedeno větší množství kvenče, než je nutné k ochlazení reaktoru na požadovanou teplotu, došlo by k zastavení reakce vlivem příliš nízké teploty. Naopak, pokud by do reaktoru bylo dávkováno příliš malé množství kvenče, vzrůstala by teplota a tím i rychlosť reakce. V okolí pracovní teploty reaktoru  $T_{REF} = 353\text{ K}$  je polymerace méně citlivá na změnu teploty, nedochází k jejímu většímu zrychlení nebo zpomalení. Toto neplatí pro velký rozdíl od pracovní teploty. Nejhorším případem je zvýšení teploty v reaktoru nad  $T_M = 453\text{ K}$ , kdy by nastalo roztavení polypropylenového prášku - práškového lože.

Z technologických důvodů je do reaktoru přiváděn i plynný propylén ( $Q_{C3=1}$  -  $Q_{C3=4}$ ), jehož množství je dávkováno poměrově k množství kvenče, přivedeného do jednotlivých zón. Tímto je řízen poměr kapalné a plynné fáze přiváděné do reaktoru. Vztah pro výpočet množství přiváděného plynného propylénu uvádí (2.5),

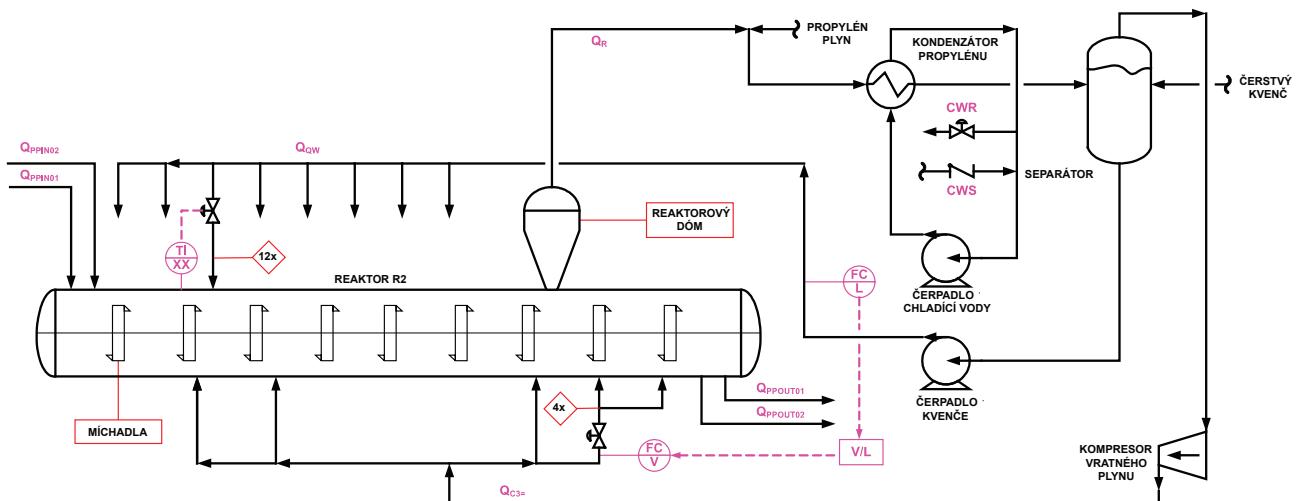
$$\frac{Q_{C3=i}}{Q_{QW_i}} = 0.4, \quad (2.5)$$

kde  $Q_{C3=i}$  je hmotnostní průtok plynné fáze do reaktoru,  $Q_{QW_i}$  hmotnostní průtok kapalné fáze přiváděný do reaktoru. Parametr  $i$  v obou případech vyjadřuje číslo zóny

reaktoru. Hodnota  $Q_{QW_i}$  je pro jednolivé zóny reaktoru určena vztahem (2.6),

$$\begin{aligned} Q_{QW1} &= \sum_{i=1}^3 Q_{QW1i} = Q_{QW11} + Q_{QW12} + Q_{QW13}. \\ Q_{QW2} &= \sum_{i=1}^3 Q_{QW2i} = Q_{QW21} + Q_{QW22} + Q_{QW23}. \\ Q_{QW3} &= \sum_{i=1}^3 Q_{QW3i} = Q_{QW31} + Q_{QW32} + Q_{QW33}. \\ Q_{QW4} &= \sum_{i=1}^3 Q_{QW4i} = Q_{QW41} + Q_{QW42} + Q_{QW43}. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Odpařováním kvenče a dávkováním plynného propylénu v reaktoru narůstá tlak, který je nutné udržovat na konstantní hodnotě  $P = 2.2 \text{ MPa}$ . Tlak se v reaktoru řídí kondenzací plynného propylénu - reaktorového plynu. Ten je z reaktoru odváděn přes reaktorový dóm proudem  $Q_R$  do kondenzátoru plynného propylénu, ve kterém je částečně kondenzován. Kondenzátorem je cirkulována chladící voda, která absorbuje teplo z plynného propylénu, čímž dochází ke kondenzaci. Při nárůstu tlaku, který je měřen v reaktorovém dómu je do chladicího okruhu kondenzátoru přes ventil *CWS* - obrázek 2.4 připuštěna čerstvá chladící voda, stejné množství je zároveň ze systému odpuštěno přes ventil *CWR*. Tímto je udržována konstantní teplota chladicí vody v okruhu, a zároveň tlak v reaktoru.



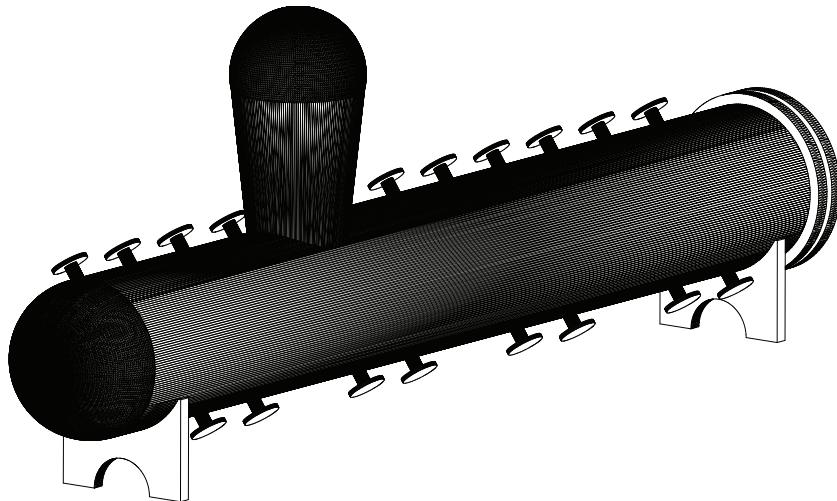
Obrázek 2.4: Systém druhého polymeračního reaktoru

Z kondenzátoru jsou obě fáze, tedy jak plynný nezkondenzovaný propylén, tak zkondenzovaný propylén.

denzovaná kapalná fáze (kvenč) přivedeny do separátoru, který slouží jako zásoba pro pylénu (kapalného i plynného) pro polymeraci. Do separátoru se přivádí čerstvý kvenč, který nahrazuje kvenč jež se změnil v polypropylén. Propylén plyn se do systému přivádí před vstupem do kondenzátoru, jak zobrazuje obrázek 2.4.

Ze spodní části separátoru je kvenč přiváděn čerpadlem kvenče zpět do reaktoru. Z vrchní části separátoru je kompresorem vratného plynu odváděn plynný propylén a nadávkován do reaktoru při zachování poměru (2.5). Za kompresorem je do plynného propylénu dávkován vodík. Jeho koncentrace je udržována na konstantní hodnotě, jejíž hodnota záleží na typu vyráběného polypropylénu. Odvýjí se od požadovaného indexu toku taveniny výsledného produktu.

Přívody kvenče a propylénu nejsou umístěny kolmo na osu reaktoru, ale v mírném sklonu, jak zobrazuje obrázek 2.5. Toto je následkem míchadla. Vlivem jeho otáčení není hladina práškového lože vodorovná, ale deformovaná pohybem míchadla. Náklon vstupů propylénu a kvenče odpovídá náklonu práškového lože v reaktoru.



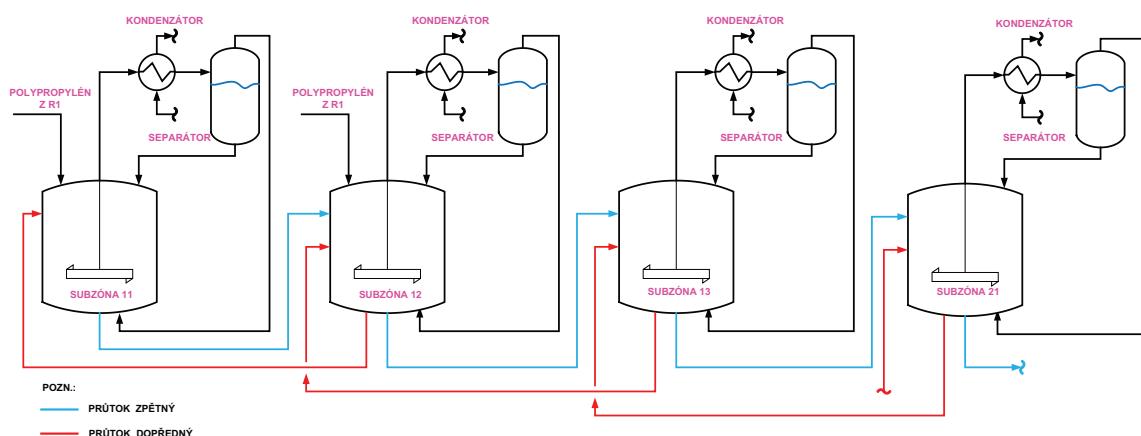
Obrázek 2.5: Rozmístění vstupů kvenče a propylénu do reaktoru

Jak je z výše uvedeného patrné, systém polymeračního reaktoru je v podstatě uzavřený systém, do kterého je čerstvý propylén dávkován za účelem pokrytí ztrát způsobených přeměnou propylénu v polypropylén.

# Kapitola 3

## Model reaktoru

Horizontální reaktor používaný k výrobě propylénu v plynné fázi (dále **HSBR**) je velice složitý systém, který lze jen velice obtížně modelovat jako celek<sup>1</sup>. Nejen z tohoto důvodu se reaktor modeluje jako  $n$  do série zapojených vertikálních míchaných reaktorů (dále **VSBR**) se zpětným tokem, kde  $n$  je počet VSBR reaktorů zapojených do série, jak zobrazuje obrázek 3.1. Každý z reaktorů v takovémto sériovém zapojení se pak svými parametry (rozložením doby prodlení) blíží polymeracní jednotce licencované Německou společností **BASF**, která na rozdíl od společnosti **BP AMOCO** používá k výrobě polypropylénu v plynné fázi vertikální reaktor (GORBACH A. B., NAIK, S. D., RAY, W. H., 2000).

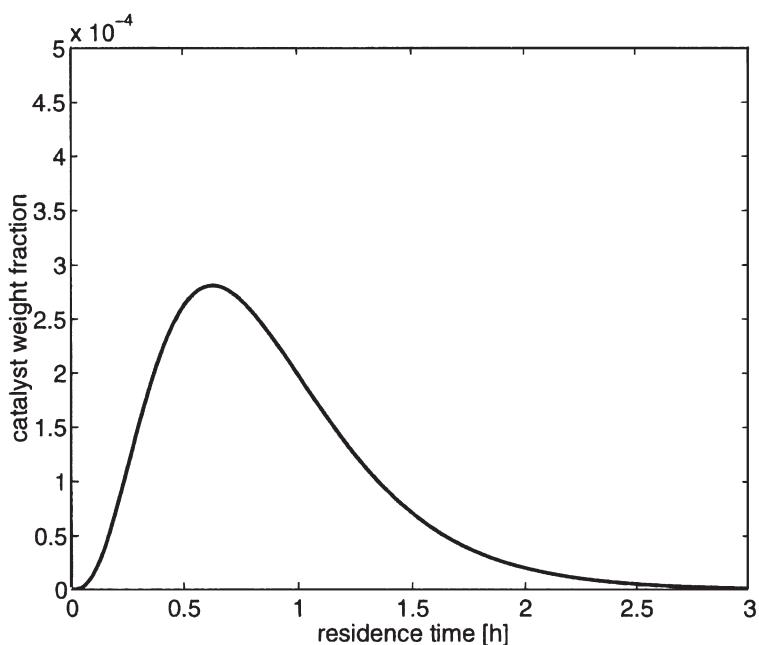


Obrázek 3.1: Rozložení HSBR reaktoru na sérii VSBR reaktorů

Modelování HSBR jako sérii  $n$  vertikální míchaných reaktorů má krom výše uve-

<sup>1</sup>Bylo by velice obtížné modelovat celý reaktor, vzhledem k počtu jeho vstupů jako jeden systém.

deného další důvod, který souvisí s materiálovým tokem, který v reaktoru nastává. Tok prášku v reaktoru přímo ovlivňuje rozložení doby prodlení katalyzátoru v reaktoru, protože katalyzátor je obsažen v práškovém loži reaktoru. Doba prodlení katalyzátoru v reaktoru má přímou vazbu na jeho výkon<sup>2</sup>. Příklad doby prodlení katalyzátoru ve vertikálním zkušebním reaktoru vyrábějícím polypropylén v plynné fázi zobrazuje obrázek 3.2 převzatý z (GORBACH A. B., NAIK, S. D., RAY, W. H., 2000)



Obrázek 3.2: Příklad doby prodlení katalyzátoru ve vertikálním míchaném reaktoru pro výrobu polypropylénu v plynné fázi

Existují dva extremní případy materiálového toku v chemických reaktorech. První je tzv. pístový tok. Pokud v reaktoru dochází k dokonalému pístovému toku, katalyzátor, který je do reaktoru přiveden na jeho přední straně z něj téměř okamžitě na výstupní straně odchází (LEVENSPIEL, O., 1999). Prošel by jím tedy bez jakékoliv disperze jeho dráhy od horizontální osy reaktoru. Opakem je situace, která nastává ve VSBR reaktoru. Definice VSBR reaktoru říká, že některé částice do něj vsazené se v reaktoru zdrží teoreticky nekonečně dlouho. Z provedených vědeckých studií a testů na reálných systémech vyplývá, že chování horizontálního reaktoru pro výrobu polypropylénu v plynné fázi s míchaným práškovým ložem leží mezi výše uvedenými extrémy (CARACOTSIOS, M., 2001).

<sup>2</sup>Množství vyráběného polypropylénu

Je nutné poznamenat, že téměř ve všech vědeckých studiích věnujících se tématu modelování HSBR jsou používány speciální matematicko - chemické programy k tomuto určené. V případě této diplomové práce tyto programy nebyly použity. Jako příklad může být uveden program, použitý v (GORBACH A. B., NAIK, S. D., RAY, W. H., 2000), kde je použit software **POLYRED** vyvinutý speciálně k návrhům a simulacím polymeračních reaktorů v laboratoři **University of Wisconsin**.

Názory na optimální počet VSBR reaktorů, který je nutné použít pro namodelování jednoho HSBR reaktoru se ve vědeckých článcích věnujících se tomuto tématu různí. Některí uvádí jako ideální počet tři až pět (CARACOTSIOS, M., 2001), jiné dokonce až čtyřicet osm vertikálních míchaných reaktorů (DITTRICH, CH. J., MUSTERS, S. M. P., 2007).

V této práci modeluji HSBR reaktor jakou soustavu dvanácti VSBR reaktorů se zpětným tokem, tedy  $n = 12$ . Tento počet je stanoven s ohledem na cíl práce a konfiguraci reálného reaktoru, z jehož procesních dat je dále odvozen matematický model. Reaktor je vybaven dvanácti snímači teploty, dvanácti vstupy kvenče, po jednom v každé subzóně. Tímto je určen počet VSBR reaktorů použitých k namodelování HSBR reaktoru v této práci. Vzhledem k tomu, že počet VSBR reaktorů splývá s počtem subzón HSBR reaktoru, budu dále používat pouze termín subzóna.

Nejprve je nutné uvést konfiguraci reaktoru z hlediska jeho vstupů, výstupů a stavů. V této práci uvažuji následující konfiguraci.

- Reaktor má 16 řiditelných, měřených vstupů, jsou jimi průtoky kvenče a propylénu do jednotlivých subzón reaktoru  $Q_{QW11} - Q_{QW43}$ ,  $Q_{C3=1} - Q_{C3=4}$ .
- Měřenou poruchovou vstupní veličinu představují průtoky katalyzátoru  $Q_{CAT}$  a polypyropylénu z prvního reaktoru,  $Q_{PPIN01} - Q_{PPIN02}$ . Pro kompenzaci vlivu těchto poruch na teplotu v jednotlivých subzónách reaktoru budou později navrženy příslušné regulátory.
- Stavy systému odpovídají teplotám v jednolivých subzónách reaktoru,  $T_{11} - T_{43}$ .

### 3.1 Bilance reaktoru

Základem matematického modelu reaktoru pro výrobu polypropylénu v plynné fázi jsou materiálová a entalpická bilance. Před jejich odvozením je nutné uvést některá zjednodušení, bez nichž by bilance nemohly být odvozeny.

1. V reálném případě obsahuje propylén pro polymeraci malé množství dalších látek, například propan, etylén. V této práci počítám s hodnotami čistého propylénu, bez těchto dalších látek.
2. Malé množství vodíku přítomné v reaktoru v obou bilancích zanedbávám. Model reaktoru je odvozen na základě provozních dat v pracovním bodě, ve kterém je poměr koncentrace vodíku ku propylénu v reaktoru roven:

$$\frac{H_2}{C_3H_6} = 2.1 \cdot 10^{-3} \quad (3.1)$$

3. Předpokládám dokonalé zpětnovazební řízení hladiny práškového lože v reaktoru.
4. Předpokládám dokonalé zpětnovazební řízení tlaku v reaktoru. Tímto je zaručena konstantní koncentrace propylénu pro polymeraci v reaktoru.
5. V obou reaktorech je vyráběn homopolymer propylénu.
6. Vzhledem k malému množství katalyzátoru v reaktoru jej nepočítám jako přímého účastníka materiálové bilance. Je zde zastoupen jako faktor ovlivňující množství vyrobeného polypropylénu.
7. V modelu nepočítám se změnou měrných tepelných kapacit v závislosti na teplotě.
8. V entalpické bilanci zanedbávám tepelné změny způsobené prouděním reaktorového plynu.
9. Zanedbávám teplo vzniklé otáčením míchadel reaktoru.
10. Zanedbávám malé množství propylénu, které z reaktoru odchází společně s polypropylénem.
11. V entalpické bilanci počítám s energetickými toky způsobenými pouze polypropylénovým práškem.

12. Předpokládám, že produkce polypropylénu prvního reaktoru je do druhého reaktoru přiváděna kontinuálně. Dále předpokládám, že toto množství je děleno na dvě stejně velké části, mezi první dvě subzóny  $Z_{11}$  a  $Z_{12}$  zóny  $Z_1$ .
13. V souladu s obrázkem 3.1 předpokládám odvod reaktorového plynu určeného ke kondenzaci z každé jednotlivé subzóny.
14. Předpokládám, že každá subzóna tepelně ovlivňuje pouze subzóny po této následující, tedy např. subzóna  $Z_{21}$  teplelně ovlivňuje subzónu  $Z_{22}$ . Tento předpoklad je zohledněn i v zjednodušeném modelu zpětného toku.
15. Předpokládám dokonalé zpětnovazební řízení poměru kapalné fáze ku plynné uvedené v rovnici (2.5). Na rozdíl od vstupů kvenče, který je vždy jeden pro každou subzónu, je vstup propylénu společný vždy pro celou jednu zónu. Každá zóna je vybavena dvěma vstupy propylénu, umístěnými souměrně po délce zóny, viz. obrázek 2.3. Lze tedy předpokládat, že množství propylénu přivedené do dané zóny se rovnoměrně rozdělí do jejích jednotlivých subzón, tedy že do každé subzóny bude přiváděno množství propylénu, které odpovídá rovnici (3.2),

$$Q_{C3=i} = \frac{1}{3} \cdot 0.4 \cdot Q_{QWi} = 0.132 \cdot Q_{QWi}, \quad (3.2)$$

kde  $i$  označuje číslo subzóny,  $Q_{C3=i}$  a  $Q_{QWi}$  průtok propylénu, respektive kvenče do subzóny  $i$ .

### 3.1.1 Materiálová bilance HSBR reaktoru

V ustáleném stacionárním stavu, kdy v reaktoru nedochází k akumulaci materiálu a energie lze materiálovou bilanci reaktoru vyjádřit rovnicí (3.3):

$$Q_{PPIN01} + Q_{PPIN02} + Q_{QW} + Q_{C3=} = Q_R + Q_{PPOUT01} + Q_{PPOUT02}, \quad (3.3)$$

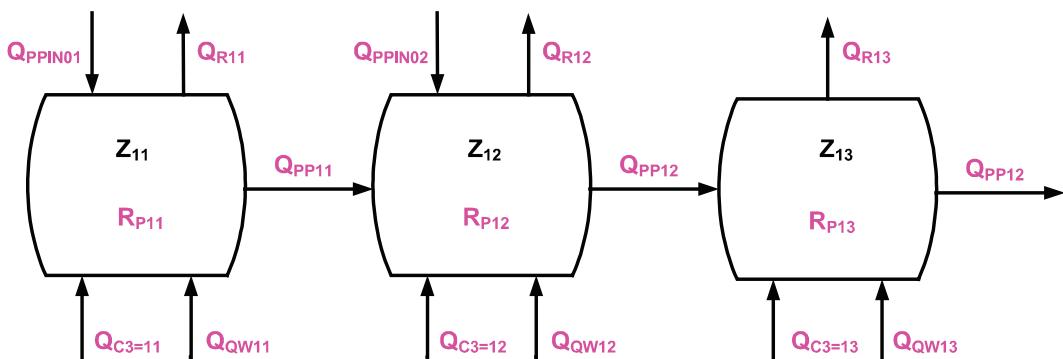
kde členy  $Q_{PPIN01}$ ,  $Q_{PPIN02}$  vyjadřují polypropylén, který do druhého reaktoru přitéká z prvního reaktoru, viz. obrázek 2.4,  $Q_{QW}$  kvenč přivedený do reaktoru,  $Q_{C3=}$  propylén přivedený do reaktoru,  $Q_R$  odvod reaktorového plynu z důvodu stabilizace tlaku v reaktoru,  $Q_{PPOUT01}$  a  $Q_{PPOUT02}$  vyjadřují polypropylén odvedený z druhého reaktoru. Poslední členy je možné rozepsat (3.4):

$$Q_{PPOUT01} + Q_{PPOUT02} = R_{PR2} + Q_{PPIN01} + Q_{PPIN02}, \quad (3.4)$$

kde  $R_{PR2}$  vyjadřuje celkové množství polypropylénu vyrobeného v druhém reaktoru. Členy  $Q_{PPIN01}$  a  $Q_{PPIN02}$  je možné rozepsat (3.5):

$$Q_{PPIN01} + Q_{PPIN02} = R_{PR1}, \quad (3.5)$$

kde  $R_{PR1}$  je množství polypropylénu vyrobeného v prvním reaktoru. Materiálové toky v prvních třech subzónách zóny  $Z_1$  reaktoru zobrazuje 3.3.



Obrázek 3.3: Materiálová bilance prvních třech subzón zóny  $Z_1$

### 3.1.2 Entalpická bilance

Entalpická bilance je odvozena v ustáleném stacionárním stavu, kdy v reaktoru nedochází k akumulaci energie a materiálu. Entalpická bilance je odvozena separátně pro jednotlivé subzóny reaktoru. Je založena na energetických tocích - každý vstup nebo výstup materiálu z dané subzóny způsobí pokles nebo nárůst energie, v závislosti na teplotě subzóny. Dále pak na velikosti reakční entalpie, kterou představuje velikost polymeracního tepla  $\Delta H_R$ .

V každé subzóně je vyrobeno určité množství polypropylénu, které z ní musí být při požadavku konstantní hladiny práškového lože odvedeno, a to buď do další subzóny, případně ven z reaktoru (poslední subzóna reaktoru  $Z_{43}$ ). Tímto se mezi jednotlivými subzónami předává energie. V systému existují z hlediska entalpické bilance tři typy subzón.

1. **Subzóna  $Z_{11}$ .** Její entalpická bilance je specifická skutečností, že polovina polypropylénu vyrobeného v prvním reaktoru je zavedena do této subzóny. Dále se jedná o úplně první subzónu reaktoru, tudíž do ní nepřitéká polypropylén vyrobený v subzónách předešlých.
2. **Subzóna  $Z_{12}$ .** Stejně jako do subzóny  $Z_{11}$ , i do  $Z_{12}$  přitéká jedna polovina polypropylénu vyrobeného v prvním reaktoru. Navíc je ovlivněna polypropylénem, který do ní přitéká ze subzóny  $Z_{11}$ .
3. **Subzóny  $Z_{13} - Z_{43}$ .** Všechny tyto subzóny jsou se z hlediska entalpické bilance podobné, rozdílem je pouze množství polypropylénu, který do dané subzóny přitéká z předešlých subzón. S rostoucím číslem subzóny, a tedy blížícímu se konci reaktoru se množství polypropylénu přitékající do dané subzóny zvětšuje.

Vzhledem k výše uvedenému rozdělení subzón na tři typy, budou rovnice entalpické bilance uvedeny pouze pro tyto subzóny. Entalpická bilance každé subzóny se skládá z několika částí, které odpovídají výše uvedené materiálové bilanci.

Entalpickou bilanci subzóny  $Z_{11}$  vyjadřují níže uvedené rovnice. Teplo, vzniklé polymerací propylénu vyjadřuje rovnice (3.6),

$$\frac{dW_{11L}}{dt} = (-\Delta H_R)R_{P11}. \quad (3.6)$$

Teplo, které je subzóně  $Z_{11}$  odebráno při přechodu propylénu na polypropylénový prášek vyjadřuje rovnice (3.7), převzatá z (GORBACH A. B., NAIK, S. D., RAY, W. H., 2000).

$$\frac{dW_{11_{II.}}}{dt} = -(C_{PS} - C_{PG})(T_{11} - T_{VAP})R_{P11}. \quad (3.7)$$

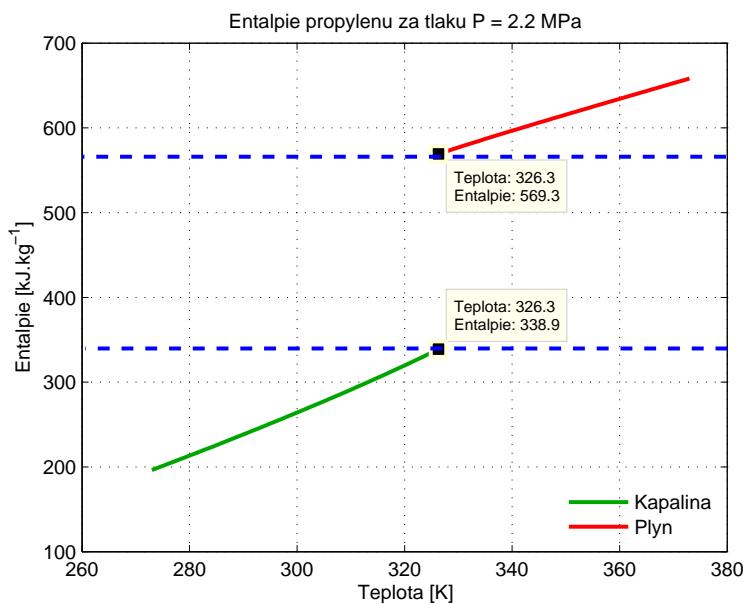
Odpařování kvenče je primárním zdrojem chlazení. Kvenč do všech subzón vstupuje o teplotě  $T_{QW}$ , ze které je nutné jej ohřát na teplotu varu  $T_{VAP}$ . Tímto kvenč absorbuje teplo vyjádřené rovnicí (3.8),

$$\frac{dW_{11_{III.}}}{dt} = -Q_{QW11}C_{PML}(T_{VAP} - T_{QW}). \quad (3.8)$$

Po zahřátí kvenče na teplotu varu  $T_{VAP}$  dojde k jeho odpaření, kvenč tedy přejde z kapalné fáze do plynné a absorbuje do sebe značnou část polymeračního tepla. Toto vyjadřuje rovnice (3.9),

$$\frac{dW_{11_{IV.}}}{dt} = -\Delta H_{VAP}Q_{QW11}. \quad (3.9)$$

Průběh měrného skupenského výparného tepla propylénu při tlaku  $P = 2.2 \text{ MPa}$  vyjadřuje obrázek 3.4. Toto teplo je v obrázku patrné nespojitostí grafu při teplotě  $T_{VAP} = 326 \text{ K}$  - oblast osy  $y$ , vyznačená přerušovanou modrou čarou odpovídá měrnému skupenskému výparnému teplu  $\Delta H_{VAP}$ . Z obrázku je patrné, jaké množství energie je nutné dodat jednomu kilogramu propylénu, aby se změnil své skupenství, odparil se.



Obrázek 3.4: Měrné skupenské výparné teplo propylénu

Další část polymeračního tepla absorbuje kvenč po svém odpaření, ohřevem z teploty varu  $T_{VAP}$  na teplotu dané subzóny  $T_{11}$ . Toto vyjadřuje rovnice (3.10),

$$\frac{dW_{11V.}}{dt} = -Q_{QW11}C_{PG}(T_{11} - T_{VAP}). \quad (3.10)$$

Propylén přiváděný do reaktoru za účelem dodržení technologické podmínky poměru plynné a kapalné fáze vstupuje do reaktoru o teplotě  $T_{C3=}$ , která je vždy nižší než teplota udržovaná v dané subzóně -  $T_{11}$ . Tímto propylén odeberete subzóně další část polymeračního tepla, což je vyjádřeno rovnicí (3.11),

$$\frac{dW_{11VI.}}{dt} = -Q_{C3=11}C_{PG}(T_{11} - T_{C3=}). \quad (3.11)$$

Teplo je ze subzóny  $Z_{11}$  dále odvedeno polypropylénem, který se v subzóně vyrobí polymerací propylénu a odteče z ní do subzóny následující, tedy do  $Z_{12}$ . Toto teplo se nazývá teplo výnosné a vyjadřuje energii akumulovanou v polypropylénovém prášku. Výnosné teplo popisuje rovnice (3.12),

$$\frac{dW_{11VII.}}{dt} = -R_{P11}C_{PS}(T_{11} - T_{11}(C_{PS} - C_{PG})). \quad (3.12)$$

Ze subzóny  $Z_{11}$  odebírá teplo také polypropylén vyrobený v prvním polymeračním reaktoru. Jedna polovina produkce prvního reaktoru je, jak bylo uvedeno výše přivedena do této subzóny. Odebrání tepla probíhá ohřevem polypropylénu z teploty  $T_{PP}$ , při které do subzóny přichází na teplotu v subzóně  $T_{11}$ . Toto popisuje rovnice (3.13),

$$\frac{dW_{11VIII.}}{dt} = -\frac{R_{PR1}}{2}C_{PS}(T_{11} - T_{PP}). \quad (3.13)$$

Výsledná rovnice popisující změnu tepelné energie v subzóně  $Z_{11}$  reaktoru uvádí rovnice (3.14),

$$\begin{aligned} \frac{dW_{11}}{dt} = & \underbrace{(-\Delta H_R)R_{P11}}_{W_{11I.}} - \underbrace{(C_{PS} - C_{PG})(T_{11} - T_{VAP})R_{P11}}_{W_{11II.}} \\ & - \underbrace{Q_{QW11}C_{PML}(T_{VAP} - T_{QW})}_{W_{11III.}} - \underbrace{\Delta H_{VAP}Q_{QW11}}_{W_{11IV.}} \\ & - \underbrace{Q_{QW11}C_{PG}(T_{11} - T_{VAP})}_{W_{11V.}} - \underbrace{Q_{C3=11}C_{PG}(T_{11} - T_{C3=})}_{W_{11VI.}} \\ & - \underbrace{R_{P11}C_{PS}(T_{11} - T_{11}(C_{PS} - C_{PG}))}_{W_{11VII.}} - \underbrace{\frac{R_{PR1}}{2}C_{PS}(T_{11} - T_{PP})}_{W_{11VIII.}} \end{aligned} \quad (3.14)$$

Ve všech zbývajících subzónách jsou některé rovnice popisující polymeraci - výrobu polypropylénu analogické k první subzóně  $Z_{11}$ , až na označení indexů, označující danou subzónu s jejími vstupy. Jedná se tedy o rovnice vyjadřující  $W_{11I.}, W_{11II.}$ . Podobné jsou dále rovnice popisují odpaření kveče a ohřátí propylénu na provozní teplotu reaktoru - jedná se o rovnice vyjadřující  $W_{11III.}, W_{11IV.}, W_{11V.}, W_{11VI.}$ . Jak bylo uvedeno výše, rozdíly mezi jednotlivými subzónami nastávají v energetických tocích způsobených polypropylénem, vyrobeným buď v dané subzóně nebo v prvním reaktoru.

Od subzóny  $Z_{12}$  se v dalších uplatňuje výše uvedený zpětný tok materiálu, což zákonitě vyvolává i zpětný energetický tok vyjádřený parametrem  $L_Q$ . V této práci jsem zvolil zjednodušený model zpětného toku, odvozený na základě (GORBACH A. B., NAIK, S. D., RAY, W. H., 2000). Předpokládám zpětný tok ve výši deseti procent veškerého polypropylénu, který odchází z příslušné subzóny. Tento předpoklad lze do příslušných rovnic popisujících energetické toky spojené s polypropylénem v dané subzóně vyjádřit tím, že se příslušný energetický tok vynásobíme parametrem  $L_Q = 0.9$ . Z každé subzóny tedy odchází do té následující pouze devadesát procent tepelné energie polypropylénu. Deset procent energie, která by měla být odvedena z dané subzóny do předešlé je zanedbáno. Toto je v souladu z předpoklady uvedenými v 3.1 na straně 15.

Pro přehlednost dále uvedu rovnice odpovídající energetickým tokům, vyvolaných polypropylénem v subzoně  $Z_{12}$ . Výnosné teplo polypropylénu vyrobeného v druhé subzóně  $Z_{12}$  odpovídá rovnici (3.15),

$$\frac{dW_{12_{VII.}}}{dt} = -R_{P12}C_{PS}(T_{12} - T_{12}(C_{PS} - C_{PG})L_Q). \quad (3.15)$$

Do subzóny  $Z_{12}$  přitéká druhá část hmotnosti polypropylénu vyrobeného v prvním polyméračním reaktoru. Teplo, které odebere subzoně  $Z_{12}$  vyjadřuje rovnice (3.16),

$$\frac{dW_{12_{VII.}}}{dt} = -\frac{R_{PR1}}{2} C_{PS}(T_{12} - T_{PP})L_Q. \quad (3.16)$$

Subzóna  $Z_{12}$  je ovlivněna polypropylénem, který do ní přitéká ze subzóny  $Z_{11}$ . Jeho množství je rovno polypropylénu, který se v předešlé subzóně vyrobí plus množství, které do subzóny  $Z_{11}$  přiteče z prvního polymeračního reaktoru. Toto vyjadřuje rovnice (3.17),

$$\frac{W_{12_{IX.}}}{dt} = -\left(\frac{R_{PR2}}{2} + R_{P11}\right)C_{PS}(T_{12} - T_{11})L_Q. \quad (3.17)$$

Tento energetický tok subzóně  $Z_{12}$  odebere nebo přidá tepelnou energii, v závislosti na aktuálních teplotách v subzónách  $Z_{11}$  a  $Z_{12}$ . Pokud bude v subzóně  $Z_{11}$  teplota vyšší než v  $Z_{12}$ , tepelná energie subzóny  $Z_{12}$  se zvýší o hodnotu  $W_{12_{IX.}}$ . Opakem je situace, kdy by v subzóně  $Z_{12}$  byla teplota větší než v  $Z_{11}$ . Energetický účinek by byl opačný. Celkové energetické poměry subzóny  $Z_{12}$  uvádí rovnice (3.18).

$$\begin{aligned} \frac{dW_{12}}{dt} = & \underbrace{(-\Delta H_R)R_{P12}}_{W_{12_I.}} - \underbrace{(C_{PS} - C_{PG})(T_{12} - T_{VAP})R_{P12}}_{W_{12_{II.}}} \\ & - \underbrace{Q_{QW12}C_{PML}(T_{VAP} - T_{QW})}_{W_{12_{III.}}} - \underbrace{\Delta H_{VAP}Q_{QW12}}_{W_{12_{IV.}}} \\ & - \underbrace{Q_{QW12}C_{PG}(T_{12} - T_{VAP})}_{W_{12_V.}} - \underbrace{Q_{C3=11}C_{PG}(T_{12} - T_{C3=})}_{W_{12_{VI.}}} \\ & - \underbrace{R_{P12}C_{PS}(T_{12} - T_{12}(C_{PS} - C_{PG}))L_Q}_{W_{12_{VII.}}} - \underbrace{\frac{R_{PR1}}{2} C_{PS}(T_{12} - T_{PP})L_Q}_{W_{12_{VIII.}}} \\ & - \underbrace{\left(\frac{R_{PR2}}{2} + R_{P11}\right)C_{PS}(T_{12} - T_{11})L_Q}_{W_{12_{IX.}}}. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Rovnice popisující energetické poměry v subzóně  $Z_{13}$  jsou od předešlých dvou subzón odlišné opět zejména skrze energetické toky vyvolané polypropylénem. Tato a všechny další subzóny již nejsou přímo napojeny na první polymerační reaktor. Po stránce energetických toků polypropylénu je tedy ovlivněna pouze polypropylénem do ní přitékajícím ze subzón předešlých a výnosným teplem polypropylénu v ní vyrobeném. Energetické poměry v subzóně  $Z_{13}$  shrnuje rovnice (3.19).

$$\begin{aligned}
\frac{dW_{13}}{dt} = & \underbrace{(-\Delta H_R)R_{P13}}_{W_{13I.}} - \underbrace{(C_{PS} - C_{PG})(T_{13} - T_{VAP})R_{P13}}_{W_{13II.}} \\
& - \underbrace{\Delta H_{VAP}Q_{QW13}}_{W_{13III.}} - \underbrace{Q_{QW13}C_{PG}(T_{13} - T_{VAP})}_{W_{13IV.}} \\
& - \underbrace{Q_{QW13}C_{PML}(T_{VAP} - T_{QW})}_{W_{13V.}} - \underbrace{Q_{C3=13}C_{PG}(T_{13} - T_{C3=})}_{W_{13VI.}} \\
& - \underbrace{R_{P13}C_{PS}(T_{13} - T_{13}(C_{PS} - C_{PG}))L_Q}_{W_{13VII.}} \\
& - \underbrace{(R_{PR1} + R_{P11} + R_{P12})C_{PS}(T_{13} - T_{12})L_Q}_{W_{13VIII.}}
\end{aligned} \tag{3.19}$$

Jak bylo uvedeno na počátku této kapitoly, další subzóny jsou již velmi podobné subzóně  $Z_{13}$ . Je důležité upozornit na část  $W_{13_{VIII.}}$  v rovnici (3.19), která vyjadřuje tepelnou energii, kterou subzóně  $Z_{13}$  přidá, případně odebere polypropylén ze subzóny  $Z_{12}$ . Je patrné, že obsahuje veškeré množství polypropylénu vyrobené v předešlých subzónách plus polypropylén, který do reaktoru přitéká z prvního polymeračního reaktoru. Toto množství se zvětšuje s pořadím subzóny, se zmenšující se vzdáleností od výstupu polypropylénu z reaktoru.

### 3.2 Nelineární model reaktoru

Materiálová a z ní vycházející entalpická bilance dílčích subzón reaktoru byly odvozeny za účelem získání nelineárního matematického modelu popisující změnu teploty v jednotlivých subzónách polymeračního reaktoru. Tyto rovnice jsou nejdůležitější částí celého matematického modelu a tím celé diplomové práce.

Rovnice popisující časovou změnu teploty v jednolivých subzónách reaktoru získáme vydělením pravých stran rovnic (3.14), (3.18), (3.19) popisující energetické poměry v daných subzónách celkovou tepelnou kapacitou reaktoru  $\Psi$  podělenou počtem subzón. Celková tepelná kapacita každé subzóny je vztažena na jednu dvanáctinu objemu reaktoru, v souladu z předpoklady uvedenými v sekci 3 na straně 12.

$$\Psi = \Psi_{PB} + \Psi_{VP}, \quad (3.20)$$

kde  $\Psi_{PB}$  a  $\Psi_{VP}$  lze dále rozepsat, jak uvádí rovnice (3.21) a (3.22),

$$\Psi_{PB} = \frac{V}{12} f(1 - \epsilon) \rho_{PP_T} C_{PS}, \quad (3.21)$$

$$\Psi_{VP} = \frac{V}{12} [1 - (1 - \epsilon) f] \rho_{C3=} C_{PG}. \quad (3.22)$$

Hustota plynitého propylénu v reaktoru za tlaku  $P = 2.2 \text{ Mpa}$  byla vypočtena ze stavové rovnice ideálního plynu.

$$P = \frac{\rho_{C3=}}{M_m} \Re T_{REF}. \quad (3.23)$$

Mezerovitost  $\epsilon$  práškového lože reaktoru byla vypočtena z rovnice (3.24),

$$\epsilon = \frac{\rho_{PP_B}}{\rho_{PP_T}}. \quad (3.24)$$

Mezerovistost bylo nutné vyjádřit, protože polypropylén vyráběný v reaktoru má strukturu prášku, čímž v práškovém loži vzniká místo vyplněné plynným propylénem.

Objemový zlomek práškového lože, vyjadřující část objemu reaktoru vyplněnou práškem vyjadřuje rovnice (3.25),

$$f = \frac{m_{PB}\rho_{PP_T}}{V}. \quad (3.25)$$

Rovnice vyjadřující vývoj teploty v subzónách  $Z_{11}$ ,  $Z_{12}$  a  $Z_{13}$  uvádí rovnice (3.26), (3.27) a (3.28),

$$\begin{aligned} \frac{dT_{11}}{dt} = & \frac{(-\Delta H_R)R_{P11}}{\Psi} - \frac{(C_{PS} - C_{PG})(T_{11} - T_{VAP})R_{P11}}{\Psi} \\ & - \frac{Q_{QW11}C_{PML}(T_{VAP} - T_{QW})}{\Psi} - \frac{\Delta H_{VAP}Q_{QW11}}{\Psi} \\ & - \frac{Q_{QW11}C_{PG}(T_{11} - T_{VAP})}{\Psi} - \frac{Q_{C3=11}C_{PG}(T_{11} - T_{C3=})}{\Psi} \\ & - \frac{R_{P11}C_{PS}(T_{11} - T_{11}(C_{PS} - C_{PG}))}{\Psi} - \frac{\frac{R_{PR1}}{2}C_{PS}(T_{11} - T_{PP})}{\Psi}, \end{aligned} \quad (3.26)$$

$$\begin{aligned} \frac{dT_{12}}{dt} = & \frac{(-\Delta H_R)R_{P12}}{\Psi} - \frac{(C_{PS} - C_{PG})(T_{12} - T_{VAP})R_{P12}}{\Psi} \\ & - \frac{Q_{QW12}C_{PML}(T_{VAP} - T_{QW})}{\Psi} - \frac{\Delta H_{VAP}Q_{QW12}}{\Psi} \\ & - \frac{Q_{QW12}C_{PG}(T_{12} - T_{VAP})}{\Psi} - \frac{Q_{C3=11}C_{PG}(T_{12} - T_{C3=})}{\Psi} \\ & - \frac{R_{P12}C_{PS}(T_{12} - T_{12}(C_{PS} - C_{PG}))L_Q}{\Psi} - \frac{\frac{R_{PR1}}{2}C_{PS}(T_{12} - T_{PP})L_Q}{\Psi} \\ & - \frac{(\frac{R_{PR2}}{2} + R_{P11})C_{PS}(T_{12} - T_{11})L_Q}{\Psi}, \end{aligned} \quad (3.27)$$

$$\begin{aligned} \frac{dT_{13}}{dt} = & \frac{(-\Delta H_R)R_{P13}}{\Psi} - \frac{(C_{PS} - C_{PG})(T_{13} - T_{VAP})R_{P13}}{\Psi} \\ & - \frac{\Delta H_{VAP}Q_{QW13}}{\Psi} - \frac{Q_{QW13}C_{PG}(T_{13} - T_{VAP})}{\Psi} \\ & - \frac{Q_{QW13}C_{PML}(T_{VAP} - T_{QW})}{\Psi} - \frac{Q_{C3=13}C_{PG}(T_{13} - T_{C3=})}{\Psi} \\ & - \frac{R_{P13}C_{PS}(T_{13} - T_{13}(C_{PS} - C_{PG}))L_Q}{\Psi} \\ & - \frac{(R_{PR1} + R_{P11} + R_{P12})C_{PS}(T_{13} - T_{12})L_Q}{\Psi}. \end{aligned} \quad (3.28)$$

Tímto jsme získaly nelineární matematický model, popisující vývoj teploty v druhém polymeračním reaktoru. Velice podobné jsou rovnice popisující vývoj teploty v ostatních subzónách reaktoru. Z důvodu jejich podobnosti s rovnicemi (3.26), (3.27) a (3.28) nebudou dále uvedeny.

### 3.2.1 Kinetický model

Z výše uvedeného je patrné, že klíčovým prvkem modelu reaktoru je parametr  $R_P$ , respektive parametry  $R_{P11} - R_{P43}$  udávající množství polypropylénu vyrobeného v jednotlivých subzónách reaktoru. V oddíle 2.1 na straně 4 bylo uvedeno, že *Zigler – Nattovi* katalyzátory se s prodlužujícím prodlením v reaktoru kazí, ztrácí na aktivitě, schopnosti konverze propylénu na polypropylén. Z toho důvodu je hodnota parametru  $R_P$  pro každou subzónu odlišná.

Rychlosť polymerace, tedy množství vyrobeného polypropylénu na množství dávkovaného katalyzátoru do reaktoru je obecně možné vyjádřit jako funkci reakčního času,

$$R(t) = R_0 \cdot e^{-K_d(t)}. \quad (3.29)$$

kde  $R(t)$  je rychlosť polymerace,  $R_0$  je počáteční rychlosť polymerace a  $K_d$  je konstantou rozkladu katalyzátoru charakterizující ztrátu jeho aktivity.

Jedním s cílu této práce je, aby se vytvořený matematický model co nejvíce blížil skutečnému systému, ze kterého jsou k dispozici naměřená procesní data. Ta však neobsahovala podrobné údaje o katalytickém systému. Důvod tohoto je jednoznačný. Vývoj katalytického systému je nákladným a časově náročným procesem, proto si výrobci jeho technické detaily velice chrání. Z těchto důvodů byl model charakterizující výrobu polypropylénu v jednotlivých subzónách odvozen na základě zjednodušené entalpicke bilance, která je založená na reálných procesních datech. Takto získané parametry  $R_{P11} - R_{P43}$  a  $R_{PR1}$  byly dále ručně upraveny tak, aby v jednotlivých subzónách nastala teplotní rovnováha - ustálení teploty v okolí provozní teploty  $T_{REF} = 353\text{ K}$ . Odvození jednotlivých parametrů výroby jednotlivých subzón je velice podobné, proto dále uvedu jejich odvození pouze pro subzóny  $Z_{11}$ ,  $Z_{12}$  a  $Z_{13}$ . Parametr  $R_{PR1}$  charakterizující celkové množství polypropylénu vyrobené v prvním polymeračním reaktoru uvedu vzhledem k jeho odlišnosti od ostatních vzlášť.

$$R_{11} = k_{11} Q_{CAT} \frac{T_{11}}{T_B}, \quad (3.30)$$

$$R_{12} = k_{13} Q_{CAT} \frac{T_{12}}{T_B}, \quad (3.31)$$

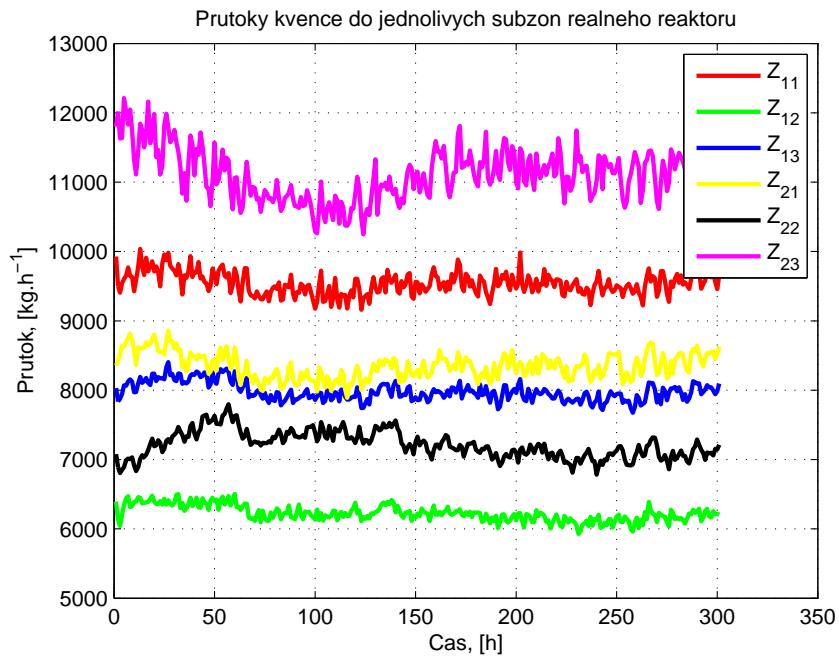
$$R_{13} = k_{13} Q_{CAT} \frac{T_{13}}{T_B}. \quad (3.32)$$

Množství katalyzátoru dávkovaného do prvního polymeračního reaktoru  $Q_{CAT}$  uvedené v rovnicích (3.30), (3.31) a (3.32) je v souladu se skutečností, že v reálném systému se změnou toho průtoku ovlivňuje množství polypropylénu vyrobeného celou polymeračním jednotkou. Výrazy  $\frac{T_{11}}{T_B}$ ,  $\frac{T_{12}}{T_B}$  a  $\frac{T_{13}}{T_B}$  udávají teplotní závislost vyrobeného množství na teplostě v dané subzóně. Tedy teplotní závislost polymerace, jak je uvedeno v 2.2 na straně 9. Parametry výroby jsou rozdílně odvozeny pro subzóny  $Z_{11}$  a  $Z_{12}$ . Toto je způsobené polypropylénem, který je do nich přiveden z prvního reaktoru. Pro ostatní subzóny je princip jejich odvozený podobný.

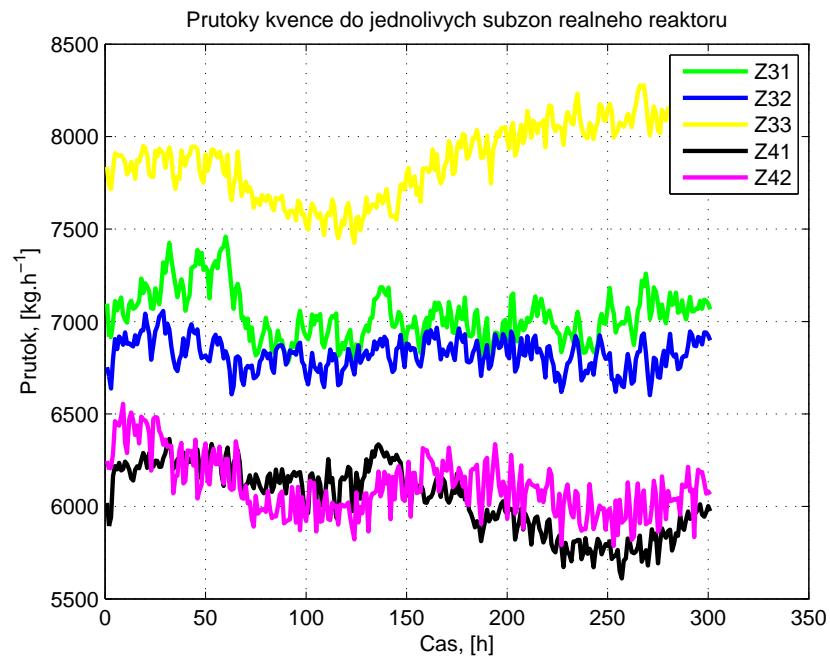
$$\begin{aligned} k_{11} = & \frac{Q_{QW11}C_{PML}(T_{VAP} - T_{QW})}{\Delta H_R Q_{CAT}} + \frac{\Delta H_{VAP}Q_{QW11}}{\Delta H_R Q_{CAT}} \\ & + \frac{Q_{QW11}C_{PG}(T_{11} - T_{QW})}{\Delta H_R Q_{CAT}} + \frac{Q_{C3=11}C_{PS}(T_{11} - T_{PP})}{\Delta H_R Q_{CAT}} \\ & + \frac{Q_{PPIN01}C_{PS}(T_{11} - T_{PP})}{\Delta H_R Q_{CAT}} \end{aligned} \quad (3.33)$$

$$\begin{aligned} k_{12} = & \frac{Q_{QW12}C_{PML}(T_{VAP} - T_{QW})}{\Delta H_R Q_{CAT}} + \frac{\Delta H_{VAP}Q_{QW12}}{\Delta H_R Q_{CAT}} \\ & + \frac{Q_{QW12}C_{PG}(T_{12} - T_{VAP})}{\Delta H_R Q_{CAT}} + \frac{Q_{C3=12}C_{PG}(T_{12} - T_{C3=})}{\Delta H_R Q_{CAT}} \\ & + \frac{Q_{PPIN02}C_{PS}(T_{12} - T_{PP})}{\Delta H_R Q_{CAT}} \end{aligned} \quad (3.34)$$

$$\begin{aligned} k_{13} = & \frac{Q_{QW13}C_{PML}(T_{VAP} - T_{QW})}{\Delta H_R Q_{CAT}} + \frac{\Delta H_{VAP}Q_{QW13}}{\Delta H_R Q_{CAT}} \\ & + \frac{Q_{QW13}C_{PG}(T_{13} - T_{VAP})}{\Delta H_R Q_{CAT}} + \frac{Q_{C3=13}C_{PG}(T_{13} - T_{C3=})}{\Delta H_R Q_{CAT}} \end{aligned} \quad (3.35)$$

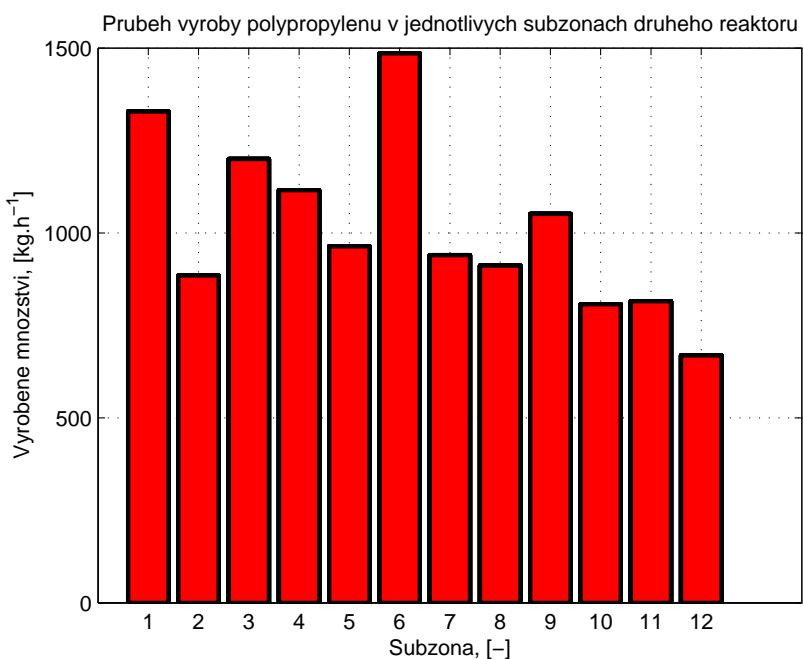


Obrázek 3.5: Procesní data skutečného polypropylénového reaktoru, průtoky kvenče do subzón  $Z_{11}$  -  $Z_{43}$



Obrázek 3.6: Procesní data skutečného polypropylénového reaktoru, průtoky kvenče do subzón  $Z_{11}$  -  $Z_{43}$

Při odvození jednotlivých parametrů  $k_{11}$  -  $k_{43}$  jsem vycházel z procesních dat reálné polymerační jednotky. Tato data byla zaznamenávána po dobu přibližně dvaceti čtyř hodin, každých pět minut. K dispozici byla procesní data o průtocích všech vstupů (kvenč  $Q_{QW11}$  -  $Q_{QW43}$  zobrazené v 3.5 a 3.6, katalyzátor  $Q_{CAT}$ , propylén  $Q_{C3=11}$  -  $Q_{C3=43}$ ) a jejich teplotách ( $T_{C3=}$  a  $T_{QW}$ ), produkci polypropylénu v obou reaktorech ( $Q_{PPIN01}$  -  $Q_{PPIN02}$ ,  $Q_{PPOUT01}$  -  $Q_{PPOUT02}$ ), teplotách v jednotlivých subzónách druhého reaktoru ( $T_{11}$  -  $T_{43}$ ) a teplotě polypropylénu vstupujícího do druhého reaktoru z prvního ( $T_{PP}$ ). Tato procesní data byla zprůměrována a použita k výpočtu  $k_{11}$  -  $k_{43}$ .



Obrázek 3.7: Histogram celkové výroby polypropylénu v jednotlivých subzónách druhého polymeračního reaktoru

Princip použitý k odvození jednotlivých parametrů  $k_{11}$  -  $k_{43}$  je založený na faktu, že každý kilogram polypropylénu vyprodukovaný v reaktoru v něm vytvoří známé množství energie  $\Delta H_R$ , které je pro zachování ustálené reakční teploty potřeba zmařit chlazením. Chlazení je realizováno primárně průtoky kvenče  $Q_{QW11}$  -  $Q_{QW43}$ , sekundárně propylénu  $Q_{C3=11}$  -  $Q_{C3=43}$ . V prvních dvou subzónách navíc ochlazování zabezpečuje polypropylén z prvního reaktoru. Protože je polymerační teplo vztaženo na kilogram vyrobeného polypropylénu a procesní hodnoty všech průtoku jsou také v kilogramech, lze takto získat množství polypropylénu vyrobeného v dané subzóně na základě energetických poměrů. Průtok katalyzátoru je v rovnicích (3.30), (3.31) a (3.32) z důvodu získání množství vy-

robeného polypropylénu v jednotlivých sobzónách na jednotku katalyzátoru. Výše bylo uvedeno, že všechny subzóny jsou energeticky ovlivněny polypropylénem, který do nich přítéká z předešlých subzón (první subzóna pouze polypropylénem z prvního reaktoru) a výnosným teplem polypropylénu z dané subzóny. Proto bylo nutné koeficienty  $k_{11}$  -  $k_{43}$  pro nastolení teplotní rovnováhy v rovnicích pro vývoj teploty v subzónách ručně poupravit. Histogram rozložení výroby polypropylénu po jednotlivých subzónách na základě vypočtených parametrů  $k_{11}$  -  $k_{43}$  zobrazuje obrázek 3.7.

Odvození parametru  $R_{PR1}$  charakterizující množství polypropylenu vyrobeného v první reaktoru je výrazně jednodušší oproti předešlé situaci. Není nutné vyjadřovat množství, které se vyrobí v jednotlivých subzónách reaktoru, stačí pouze informace o množství výroby vztažená na jednotku katalyzátoru pro celý reaktor. Toto je reprezentováno průtoky polypropylenu  $Q_{PPIN01}$  a  $Q_{PPIN02}$ . Dále nepočítám s žádnou teplotní závislostí vyrobeného množství, předpokládám dokonalé řízení teploty v tomto reaktoru. Parametr  $R_{PR1}$  vyjadřují rovnice (3.36) a (3.37),

$$R_{PR1} = k_{R1} Q_{CAT}, \quad (3.36)$$

$$k_{R1} = \frac{Q_{INPP01} + Q_{INPP02}}{Q_{CAT}}. \quad (3.37)$$

### 3.2.2 Technologické podmínky

Model vývoje teploty reaktoru byl odvozen v pracovním bodě reaktoru. Hodnoty jednotlivých veličin a parametrů v tomto pracovním bodě shrnují tabulky 3.1, 3.2, 3.3 a 3.4. Tyto hodnoty byly použity pro odvození všech rovnic uvedených v kapitole 3.

Veličina	Hodnota	Jednotka	Veličina	Hodnota	Jednotka
$T_{11}-T_{43}$	353	[ K ]	$T_{PP}$	347	[ K ]
$T_{QW}$	347	[ K ]	$T_{VAP}$	326	[ K ]
$T_{C3=}$	343	[ K ]	$T_B$	348	[ K ]

Tabulka 3.1: Provozní podmínky druhého polymeračného reaktoru - Teplostavy

Veličina	Hodnota	Jednotka	Veličina	Hodnota	Jednotka
$Q_{CAT}$	4.75	[ kg.h <sup>-1</sup> ]	$Q_{QW11}$	9539	[ kg.h <sup>-1</sup> ]
$Q_{QW12}$	6224	[ kg.h <sup>-1</sup> ]	$Q_{QW13}$	7980	[ kg.h <sup>-1</sup> ]
$Q_{QW21}$	8350	[ kg.h <sup>-1</sup> ]	$Q_{QW22}$	7213	[ kg.h <sup>-1</sup> ]
$Q_{QW23}$	11115	[ kg.h <sup>-1</sup> ]	$Q_{QW31}$	7033	[ kg.h <sup>-1</sup> ]
$Q_{QW32}$	6822	[ kg.h <sup>-1</sup> ]	$Q_{QW33}$	7868	[ kg.h <sup>-1</sup> ]
$Q_{QW41}$	6040	[ kg.h <sup>-1</sup> ]	$Q_{QW42}$	6105	[ kg.h <sup>-1</sup> ]
$Q_{QW43}$	5006	[ kg.h <sup>-1</sup> ]	$Q_{PPIN01}$	9822	[ kg.h <sup>-1</sup> ]
$Q_{PPIN02}$	9822	[ kg.h <sup>-1</sup> ]	$Q_{PPOUT01}$	15922	[ kg.h <sup>-1</sup> ]
$Q_{PPOUT01}$	15922	[ kg.h <sup>-1</sup> ]	—	—	—

Tabulka 3.2: Provozní podmínky druhého polymeračného reaktoru - Průtoky

Veličina	Hodnota	Jednotka	Veličina	Hodnota	Jednotka
$\Delta H_{VAP}$	269	[ $kJ.kg^{-1}$ ]	$C_{PS}$	2.43	[ $kJ.kg^{-1}.K^{-1}$ ]
$C_{PG}$	1.67	[ $kJ.kg^{-1}.K^{-1}$ ]	$C_{PML}$	4.17	[ $kJ.kg^{-1}.K^{-1}$ ]
$V$	74.4	[ $m^3$ ]	$\rho_{PP_B}$	429.29	[ $kg.m^3$ ]
$\rho_{PP_T}$	910.30	[ $kg.m^{-3}$ ]	$\rho_{C3=}$	34.47	[ $kg.m^3$ ]
$P$	2.2	[ $MPa$ ]	$M_m$	42.08	[ $g.mol^{-1}$ ]
$\Re$	$8.31 \cdot 10^{-5}$	[ $\frac{MPa.m^3}{mol^{-1}.K^{-1}}$ ]	$\Psi$	34502	[ $Kj.k^{-1}$ ]
$f$	0.43	[ $-$ ]	$\epsilon$	0.47	[ $-$ ]
$m_{PB}$	15286	[ $kg$ ]	$\Delta H_R$	-2617	[ $kJ.kg^{-1}$ ]

Tabulka 3.3: Provozní podmínky druhého polymeračného reaktoru -  
Ostatní

Parametr	Hodnota	Jednotka	Parametr	Hodnota	Jednotka
$k_{11}$	279.9663	[ $kg.kg^{-1}.h^{-1}$ ]	$k_{12}$	186.5634	[ $kg.kg^{-1}.h^{-1}$ ]
$k_{13}$	252.9425	[ $kg.kg^{-1}.h^{-1}$ ]	$k_{21}$	235.1691	[ $kg.kg^{-1}.h^{-1}$ ]
$k_{22}$	203.1753	[ $kg.kg^{-1}.h^{-1}$ ]	$k_{23}$	313.0796	[ $kg.kg^{-1}.h^{-1}$ ]
$k_{31}$	198.0977	[ $kg.kg^{-1}.h^{-1}$ ]	$k_{32}$	192.1572	[ $kg.kg^{-1}.h^{-1}$ ]
$k_{33}$	221.6202	[ $kg.kg^{-1}.h^{-1}$ ]	$k_{41}$	170.1284	[ $kg.kg^{-1}.h^{-1}$ ]
$k_{42}$	171.8463	[ $kg.kg^{-1}.h^{-1}$ ]	$k_{43}$	141.0307	[ $kg.kg^{-1}.h^{-1}$ ]
$k_{R1}$	4140.3519	[ $kg.kg^{-1}.h^{-1}$ ]	-	-	-

Tabulka 3.4: Parametry výroby polypropylénu v jednotlivých subzónách

Výše uvedé hodnoty byly poskytnuty společností **UNIPETROL RPA, s.r.o.**, s vyjímkou dále uvedených. Měrné tepelné kapacity byly převzaty z (GORBACH A. B., NAIK, S. D., RAY, W. H., 2000). Molekulová hmotnost propylénu, hodnota jeho teploty varu a měrné skupenské výparné teplo byli převzaty z (LINSTROM, P. J., MALLARD, G. W., EDS., June 2005).

Sečtením množství polypropylénu vyrobeného v jednotlivých subzónách na základě odvozených parametrů výroby a porovnáním této hodnoty s procesními daty reálného reaktoru dostaneme chybu o velikosti osmy procent, což je přijatelné.

### 3.3 Lineární model

Nelineární model reaktoru popsaný rovnicemi (3.26), (3.27), (3.28) byl realizován v prostředí *Matlab - Simulink* a linearizován v pracovním bodě, který uvádí tabulky 3.1, 3.2, 3.3 a 3.4. K linearizaci byla využita funkce *Control and Estimation Tools Manager 1.0*, která je v prostředí *Matlab - Simulink* implementována. Výstupem je linearizovaný model ve tvaru stavového posisu.

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{x}} &= \mathbf{Ax} + \mathbf{Bu} \\ \mathbf{y} &= \mathbf{Cx} + \mathbf{Du}\end{aligned}\quad (3.38)$$

Stavový vektor  $\mathbf{x}$  je ve tvaru,

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} & T_{21} & T_{22} & T_{23} & T_{31} & T_{32} & T_{33} & T_{41} & T_{42} & T_{43} \end{bmatrix}^T. \quad (3.39)$$

Vzhledem k značné rozsáhlosti stavového popisu zde nebude uveden, je však součástí přiloženého CD spolu se *Simulinkovou* realizací nelineárního modelu, ze kterého byl lineární model získán.

Takto získaný model byl otestován z hlediska stability. Všechna jeho vlastní čísla jsou reálná, záporná, systém je tedy stabilní. Jednotlivá vlastní čísla jsou následující,

$$\lambda_1 = -22.6473, \quad (3.40)$$

$$\lambda_2 = -22.4131,$$

$$\lambda_3 = -21.8692,$$

$$\lambda_4 = -20.5418,$$

$$\lambda_5 = -21.0982,$$

$$\lambda_6 = -20.5418,$$

$$\lambda_7 = -21.0074,$$

$$\lambda_8 = -19.3135,$$

$$\lambda_9 = -18.8945,$$

$$\lambda_9 = -18.1567,$$

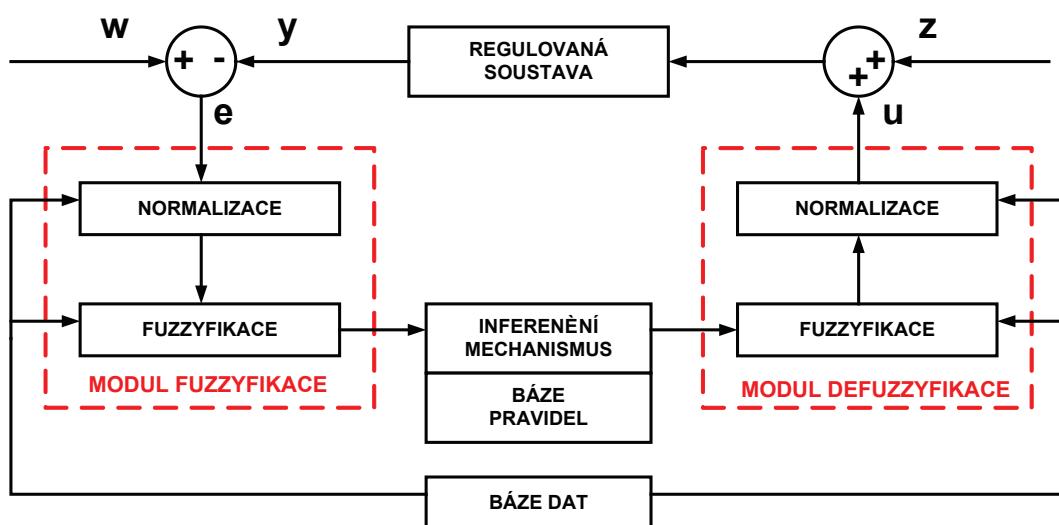
$$\lambda_9 = -16.7382,$$

$$\lambda_9 = -10.4498.$$

# Kapitola 4

## Fuzzy řízení

Základní obecná struktura fuzzy regulátoru je znázorněna na obrázku 4.1. Skládá se ze tří základních bloků. Modul fuzzyfikace převádí ostrá data vstupních veličin regulované soustavy na fuzzy data. S takto fuzzyfikovanými vstupními veličinami poté inferenční mechanismus provádí vyhodnocení výsledku. Inferenční mechanismus využívá ke své činnosti znalostní báze fuzzy regulátoru. Výsledkem činnosti inferenčního mechanismu je fuzzy množina, která se v modulu defuzzyfikace převádí zpět na ostré hodnoty - číslo.



Obrázek 4.1: Základní obecná struktura fuzzy regulátoru

Báze znalostí každého fuzzy regulátoru je složena ze dvou částí, z báze pravidel a báze dat. Báze dat obsahuje veškeré informace o fuzzy množinách - funkcích příslušnosti. Ty ve fuzzy regulátoru reprezentují lingvistické hodnoty jednotlivých proměnných. Dále báze dat

obsahuje informace o rozsazích vstupně / výstupních veličin regulované soustavy / procesu. Báze pravidel reprezentuje znalosti řízení dané soustavy ve formě pravidel, definiuje tedy strategie řízení dané soustavy, pomocí kterých je možné generovat odpovídající akční zásah (MODRLÁK, O., 2004). Tato pravidla by měla plně lingvisticky reprezentovat závislosti mezi vstupem a výstupem regulované soustavy. Jednotlivá pravidla mají tvar,

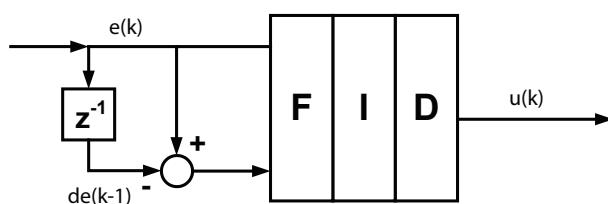
**IF** (stav soustavy) **THEN** (akční zásah).

Část pravidla obsahující logickou spojku **IF** se nazývá ancendent, který je vyjádřen ve formě fuzzy atomických výroků. Část pravidla obsahující spojku **THEN** se nazývá konsekvent. Ten představuje lingvisticky vyjádřený akčního zásahu fuzzy regulátoru. Jednotlivé fuzzy atomické výroky jsou mezi sebou propojeny spojkou **AND**<sup>1</sup> reprezentující jejich logický součin.

Inferenční mechanismus je postup, který stanovuje výstupní fuzzy množinu pro danou vstupní fuzzy množinu, nebo ostrou výstupní hodnotu pro danou vstupní ostrou hodnotu. Více například (JURA, P., 2003, strana 75).

## 4.1 Fuzzy PD regulátor

Pro stabilizaci teploty v jednotlivých subzónách reaktoru jsem navrhl dvanáct fuzzy diskrétních regulátorů typu PD (vzhledem ke spojitosti modelu reaktoru byla příslušná simulinková schémata vybavena vzorkovacím členem typu *ZOH*). Obecná struktura fuzzy PD regulátoru je zobrazena na obrázku 4.2.



Obrázek 4.2: Struktura fuzzy PD regulátoru

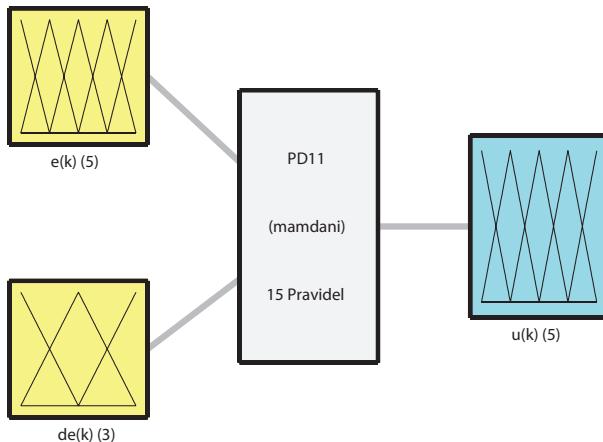
Jednotlivé bloky **F**, **I**, **D**, z obrázku 4.2 odpovídají jednotlivým základním blokům obecného fuzzy regulátoru z obrázku 4.1, tedy blokům fuzzyfikace, inferečnímu mecha-

<sup>1</sup>A zároveň.

nismu a defuzzyfikace. Vstupem fuzzy regulátoru jsou regulační odchylka  $e(k)$  a její změna  $de(k)$ . Výstup regulátoru je funkci, která závisí na fuzzyfikaci, defuzifikaci a inferečním mechanismu. Fuzzy PD regulátor dostáváme jako funkci ve tvaru,

$$u(k) = F_{PD}(e(k), de(k)). \quad (4.1)$$

Obecná struktura fuzzy PD regulátoru v prostředí *Fuzzy Logic Toolbox* je zobrazena na obrázku 4.3.



Obrázek 4.3: Implementace fuzzy PD regulátoru ve *Fuzzy Logic Toolbox*

## 4.2 Fuzzyfikace

Fuzzyfikace je proces, který převádí vstupní ostrá data na fuzzy data. K tomu je potřeba stanovit tvar a typ funkcí příslušnosti každé vstupní veličině.

Pro implementaci a simulaci nelineárního modelu reaktoru a fuzzy regulátory jsem použil *Fuzzy Logic Toolbox*, který podporuje několik typů funkcí příslušnosti, například gaussovské, trojúhelníkové, zvonové nebo lichoběžníkové. Na základě testů jsem zvolil trojúhelníkové funkce příslušnosti. Testy provedené na funkcích příslušnosti založených na gaussovských funkcích dosahovaly horších výsledků regulace.

Regulační odchylku  $e(k)$  jsem fuzzyfikoval pomocí pěti termů, změnu regulační odchylky  $de(k)$  pouze mocí tří. Při simulacích jsem vyzkoušel variantu fuzzyfikovat změnu regulační odchylky pomocí pěti termů. V tomto případě však byli výsledky regulace horší než v případě tří termů. Akční zásah je fuzzyfikován pěti termi.

### 4.2.1 Funkce příslušnosti fuzzy PD regulátorů

Každý z navržených fuzzy PD regulátorů má dva vstupy, regulační odchylku teploty v subzóně  $e(k)$ , její změnu  $de(k)$  a jeden výstup - akční zásah v podobě průtoku kvenče  $Q_{QW11} - Q_{QW43}$  do jednotlivých subzón reaktoru. Rozsah vstupních funkcí příslušnosti jsem určil experimentálně na nelineárním modelu reaktoru tak, aby regulační pochod podával požadované výsledky, tedy stabilizoval teplotu v dané subzóně v okolí teploty  $T_{REF} = 353 K$ . Rozsah výstupních funkcí příslušnosti vychází z pracovního bodu reaktoru. Je nutné nastavit rozsah výstupních funkcí příslušnosti tak, aby v případě ustáleného stavu, odpovídajícího pracovnímu bodu byl akční zásah jednotlivých regulátorů roven hodnotám průtoků kvenče uvedeným v tabulce 3.2. Tyto hodnoty pak musí být přesně v polovině rozsahu funkce příslušnosti akčního zásahu a tvořit tak virtuálně nulový akční zásah. Rozsahy vstupních a výstupních funkcí příslušnosti udávají tabulky 4.1 a 4.2.

Subzóna	$e(k)$	$de(k)$	$u(k), [ kg.h^{-1} ]$
$Z_{11}$	$< -20, 20 >$	$< -10, 10 >$	$< 0, 19080 >$
$Z_{12}$	$< -20, 20 >$	$< -10, 10 >$	$< 0, 12446 >$
$Z_{13}$	$< -20, 20 >$	$< -10, 10 >$	$< 0, 17960 >$
$Z_{21}$	$< -20, 20 >$	$< -10, 10 >$	$< 0, 16698 >$
$Z_{22}$	$< -20, 20 >$	$< -10, 10 >$	$< 0, 14426 >$
$Z_{23}$	$< -20, 20 >$	$< -10, 10 >$	$< 0, 22230 >$

Tabulka 4.1: Rozsah funkcí příslušnosti fuzzy regulátorů pro subzóny

$Z_{11} - Z_{23}$

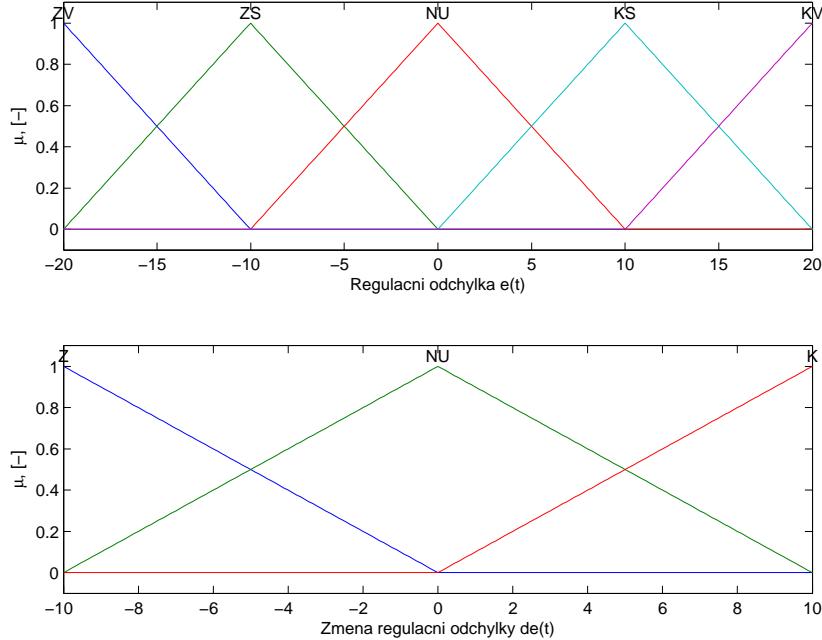
Subzóna	$e(k)$	$de(k)$	$u(k), [ kg.h^{-1} ]$
$Z_{31}$	$< -20, 20 >$	$< -10, 10 >$	$< 0, 14066 >$
$Z_{32}$	$< -20, 20 >$	$< -10, 10 >$	$< 0, 13644 >$
$Z_{33}$	$< -20, 20 >$	$< -10, 10 >$	$< 0, 15736 >$
$Z_{41}$	$< -20, 20 >$	$< -10, 10 >$	$< 0, 12079.8 >$
$Z_{42}$	$< -20, 20 >$	$< -10, 10 >$	$< 0, 12201.8 >$
$Z_{43}$	$< -20, 20 >$	$< -10, 10 >$	$< 0, 10013.8 >$

Tabulka 4.2: Rozsah funkcí příslušnosti fuzzy regulátorů pro subzóny

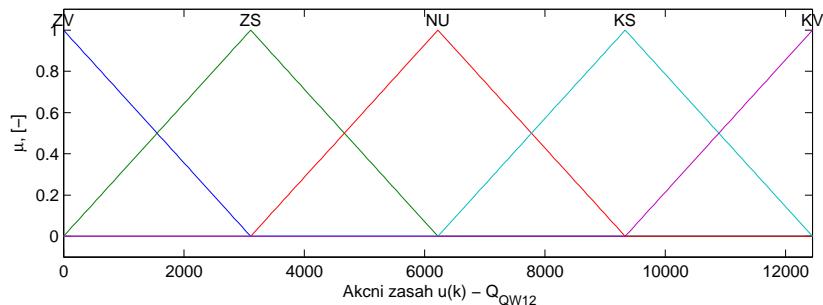
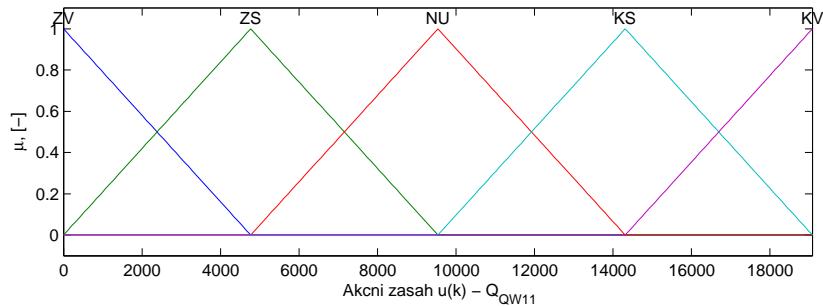
 $Z_{31} - Z_{43}$ 

Rozsahy funkcí příslušnosti pro regulační odchylku  $e(k)$  a její změnu  $de(k)$  jsou pro všechny navržené regulátory stejné, jak uvádí tabulky 4.1 a 4.2. Jejich implementaci ve *Fuzzy Logic Toolboxu* zobrazuje obrázek 4.4.

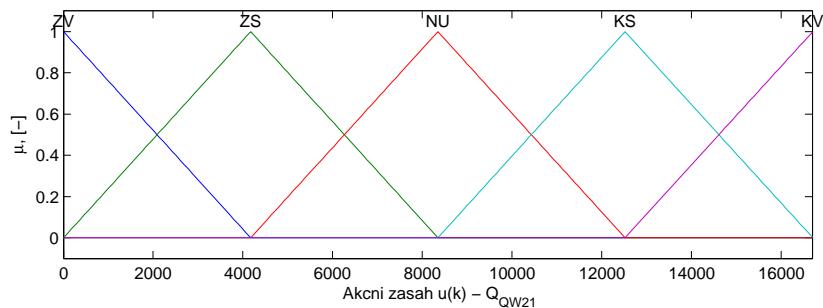
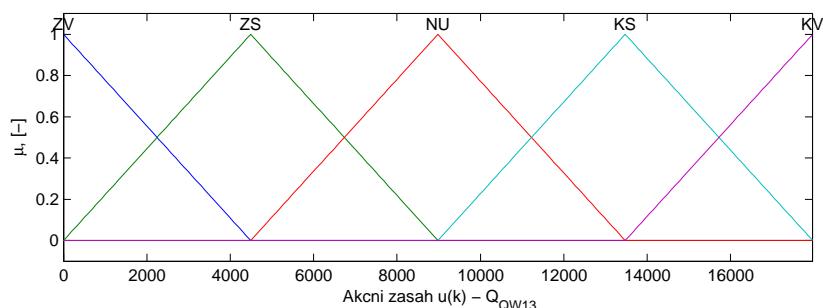
Rozsahy funkcí příslušnosti pro jednolivé akční zásahy  $u(k)$  odpovídající  $Q_{QW11} - Q_{QW43}$  zobrazují obrázky 4.5, 4.6, 4.7, 4.8, 4.9 a 4.10 .



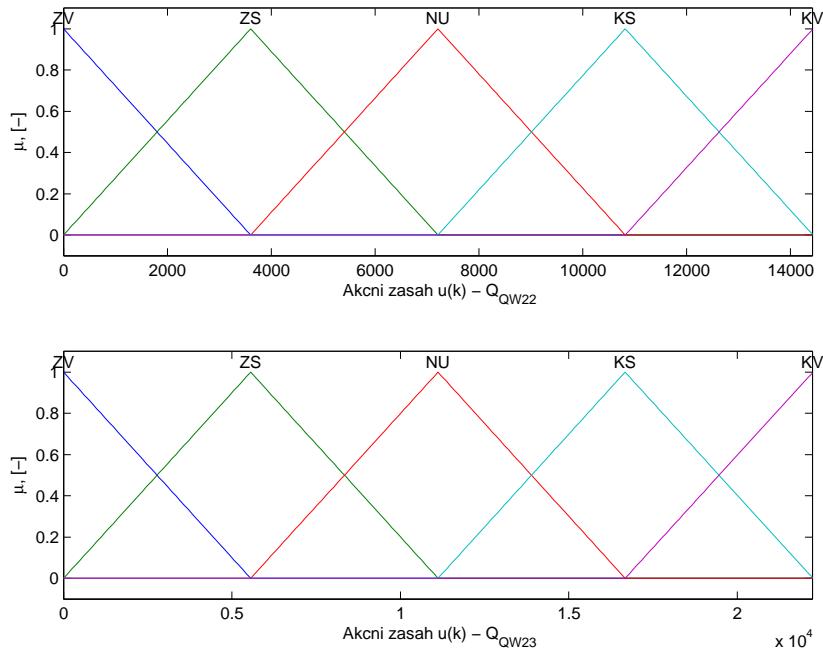
Obrázek 4.4: Rozsah vstupních funkcí příslušnosti všech fuzzy PD regulátorů



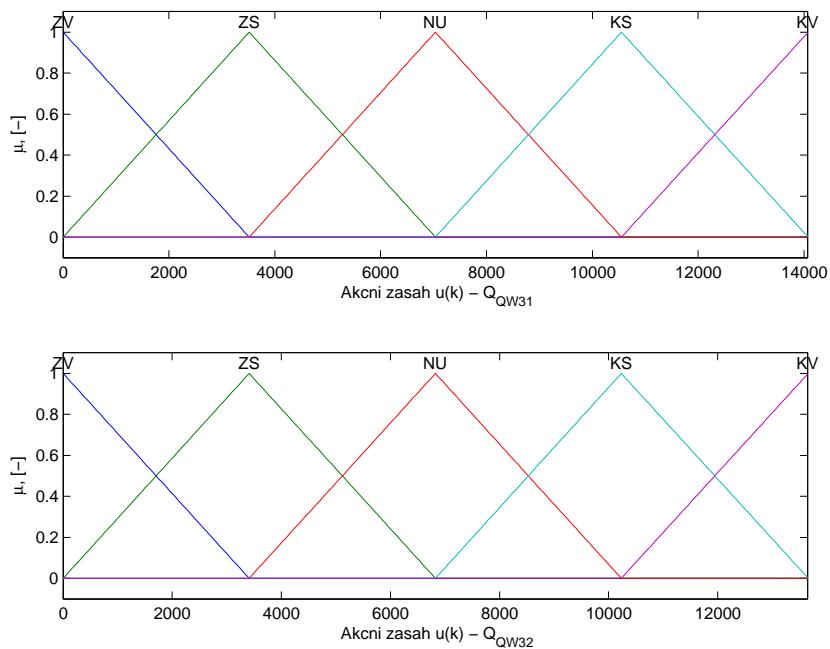
Obrázek 4.5: Rozsah výstupních funkcí příslušnosti fuzzy regulátorů, subzóny  $Z_{11}$ ,  $Z_{12}$



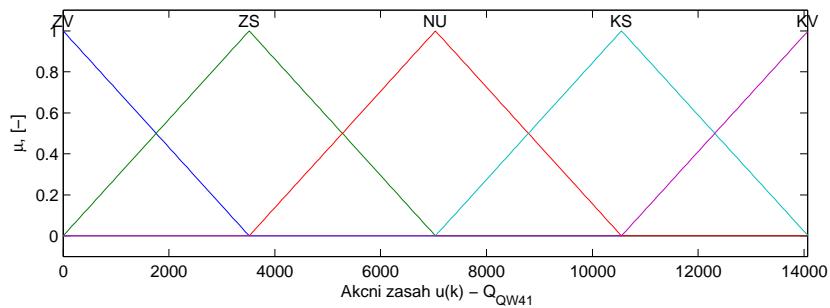
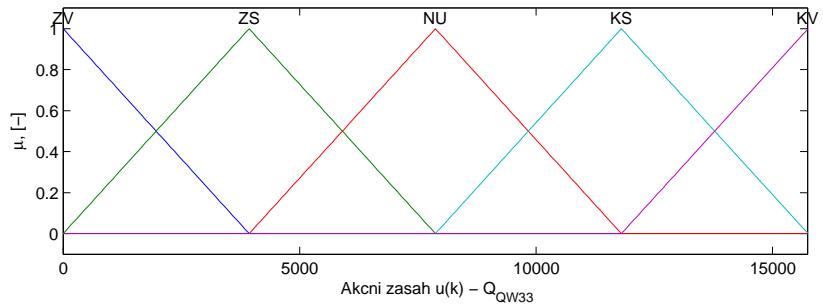
Obrázek 4.6: Rozsah výstupních funkcí příslušnosti fuzzy regulátorů, subzóny  $Z_{13}$ ,  $Z_{21}$



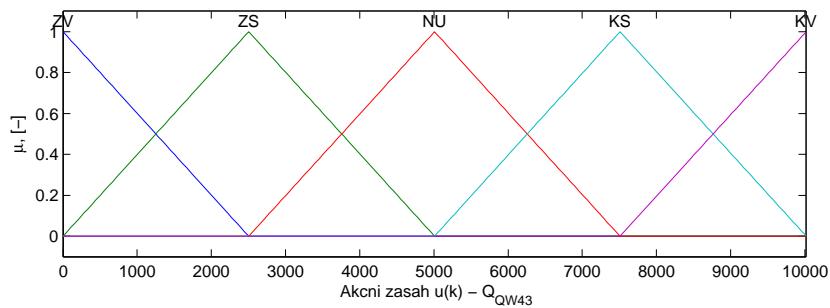
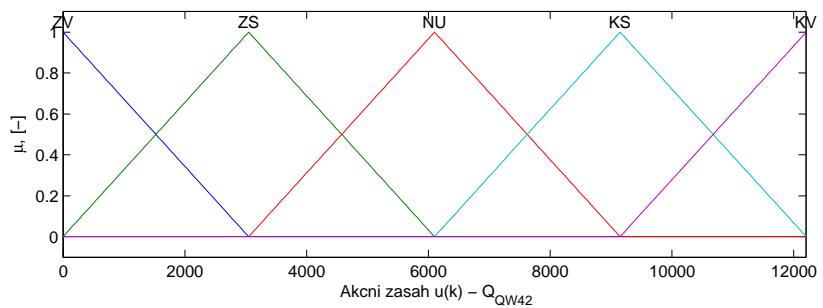
Obrázek 4.7: Rozsah výstupních funkcí příslušnosti fuzzy regulátorů, subzóny  $Z_{22}$ ,  $Z_{23}$



Obrázek 4.8: Rozsah výstupních funkcí příslušnosti fuzzy regulátorů, subzóny  $Z_{31}$ ,  $Z_{32}$



Obrázek 4.9: Rozsah výstupních funkcí příslušnosti fuzzy regulátorů, subzóny  $Z_{33}$ ,  $Z_{41}$



Obrázek 4.10: Rozsah výstupních funkcí příslušnosti fuzzy regulátorů, subzóny  $Z_{42}$ ,  $Z_{43}$

## 4.3 Tvorba pravidel

Nejdůležitější částí každého fuzzy regulátoru je báze znalostí, a zejména pak báze pravidel. Jednotlivá pravidla jsou formulována pomocí příkazů:

**Jestliže (IF) [Stav procesu] pak (THEN) [Akční zásah].**

### 4.3.1 Pravidla fuzzy PD regulátoru

Bázi pravidel fuzzy PD regulátoru je možné sestavit buď na základě empirických znalostí obsluhy regulované soustavy nebo s použitím standartizovaných obecně platných metapravidel, která jsem použil v této diplomové práci. V praxi byli odvozeny tři základní metapravidla, na jejichž základě je možné sestavit bázi pravidel fuzzy PD a PI regulátoru. Více v (MODRLÁK, O., 2004).

1. Jestliže jsou regulační odchylka  $e(k)$  a její změna  $de(k)$  nulové, nebo blízké nule, pak by měl být akční zásah  $u(k)$  nulový, nebo blízký nule.
2. Jestliže regulační odchylka  $e(k)$  klesá k nule, pak je vhodné neměnit akční zásah  $u(k)$ .
3. Pakliže nedochází ke korekci regulační odchylky  $e(k)$ , je nutné změnit akční zásah  $u(k)$ . Jeho velikost a znaménko jsou závislé na velikostech a znaménkách regulační odchylky  $e(k)$  a její změny  $de(k)$ .

Použitím pěti termů k fuzzyfikaci regulační odchylky  $e(k)$ , tří k fuzzyfikaci změny regulační odchylky  $de(k)$  a pěti pro fuzzyfikaci akčního zásahu  $u(k)$  dostaneme celkem patnáct pravidel, která jsou nutná k popsání všech možností, které mohou v regulátoru během regulačního pochodu nastat. Tato pravidla jsou uvedená v tabulce 4.3 a 4.4.

<b>01.</b>	<b>IF</b> [ $e(k) = ZV$ ] <b>AND</b> [ $de(k) = Z$ ] <b>THEN</b> [ $u(k) = ZV$ ]
<b>02.</b>	<b>IF</b> [ $e(k) = ZV$ ] <b>AND</b> [ $de(k) = NU$ ] <b>THEN</b> [ $u(k) = ZV$ ]
<b>03.</b>	<b>IF</b> [ $e(k) = ZV$ ] <b>AND</b> [ $de(k) = K$ ] <b>THEN</b> [ $u(k) = ZS$ ]
<b>04.</b>	<b>IF</b> [ $e(k) = ZS$ ] <b>AND</b> [ $de(k) = Z$ ] <b>THEN</b> [ $u(k) = ZV$ ]
<b>05.</b>	<b>IF</b> [ $e(k) = ZS$ ] <b>AND</b> [ $de(k) = NU$ ] <b>THEN</b> [ $u(k) = ZS$ ]

Tabulka 4.3: Pravidla fuzzy PD regulátoru

<b>06.</b>	<b>IF</b> [ $e(k) = \text{ZS}$ ] <b>AND</b> [ $de(k) = \text{K}$ ] <b>THEN</b> [ $u(k) = \text{NU}$ ]
<b>07.</b>	<b>IF</b> [ $e(k) = \text{NU}$ ] <b>AND</b> [ $de(k) = \text{Z}$ ] <b>THEN</b> [ $u(k) = \text{ZS}$ ]
<b>08.</b>	<b>IF</b> [ $e(k) = \text{NU}$ ] <b>AND</b> [ $de(k) = \text{NU}$ ] <b>THEN</b> [ $u(k) = \text{NU}$ ]
<b>09.</b>	<b>IF</b> [ $e(k) = \text{NU}$ ] <b>AND</b> [ $de(k) = \text{K}$ ] <b>THEN</b> [ $u(k) = \text{KS}$ ]
<b>10.</b>	<b>IF</b> [ $e(k) = \text{KS}$ ] <b>AND</b> [ $de(k) = \text{Z}$ ] <b>THEN</b> [ $u(k) = \text{NU}$ ]
<b>11.</b>	<b>IF</b> [ $e(k) = \text{KS}$ ] <b>AND</b> [ $de(k) = \text{NU}$ ] <b>THEN</b> [ $u(k) = \text{NS}$ ]
<b>12.</b>	<b>IF</b> [ $e(k) = \text{KS}$ ] <b>AND</b> [ $de(k) = \text{K}$ ] <b>THEN</b> [ $u(k) = \text{KV}$ ]
<b>13.</b>	<b>IF</b> [ $e(k) = \text{KV}$ ] <b>AND</b> [ $de(k) = \text{Z}$ ] <b>THEN</b> [ $u(k) = \text{KS}$ ]
<b>14.</b>	<b>IF</b> [ $e(k) = \text{KV}$ ] <b>AND</b> [ $de(k) = \text{NU}$ ] <b>THEN</b> [ $u(k) = \text{KV}$ ]
<b>15.</b>	<b>IF</b> [ $e(k) = \text{KV}$ ] <b>AND</b> [ $de(k) = \text{K}$ ] <b>THEN</b> [ $u(k) = \text{KV}$ ]

Tabulka 4.4: Pravidla fuzzy PD regulátoru

## 4.4 Infereční mechanismus

Inferenční mechanismus je postup, který nám umožní stanovit výstupní fuzzy množinu pro danou vstupní fuzzy množinu. Toto inferenční mechanismus realizuje aplikací pravidel. Dále na několika příkladech pravidel fuzzy PD regulátoru, uvedených v tabulce 4.3 vysvětlím jeho princip.

Mějme dvě pravidla :

<b>IF</b> $[e(k) = ZV] \text{ AND } [de(k) = Z]$ <b>THEN</b> $[u(k) = ZV]$ Jestliže regulační odchylka je <b>Záporná Velká</b> a zároveň změna regulační odchylky je <b>Záporná</b> pak akční zásah je <b>Záporný Velký</b> .
<b>IF</b> $[e(k) = ZV] \text{ AND } [de(k) = K]$ <b>THEN</b> $[u(k) = ZS]$ Jestliže regulační odchylka je <b>Záporná Velká</b> a zároveň změna regulační odchylky je <b>Kladná</b> pak akční zásah je <b>Záporný střední</b> .

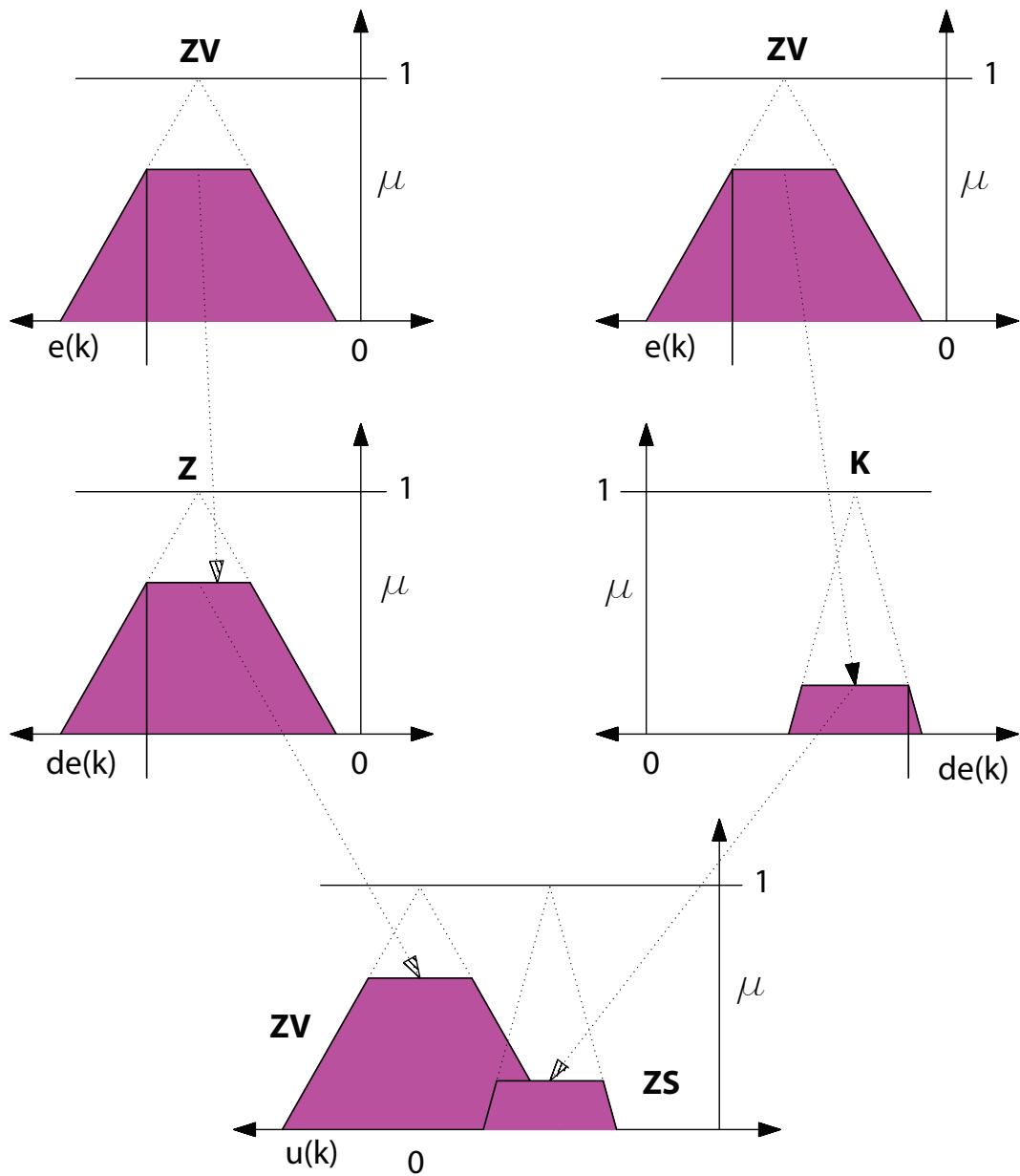
Tabulka 4.5: Příklady pravidel

Oba vstupy  $e(k)$  a  $de(k)$  jsou převedeny na fuzzy data. Inferenční mechanismus porovná jednotlivé vstupy a vybere pro všechna pravidla nejmenší hodnoty funkce příslušnosti fuzzyfikovaných vstupů.

$$\begin{aligned}\alpha_1 &= \min \{\mu_{ZV}(e_k), \mu_Z(de(k))\}, \\ \alpha_2 &= \min \{\mu_{ZV}(e_k), \mu_K(de(k))\}.\end{aligned}\quad (4.2)$$

Výstupní fuzzy množinu, která se skládá ze sjednocení oříznutých funkcí příslušnosti (4.3), dostaneme aplikováním inferenčního mechanismu na všechna pravidla. Více například v (MINAŘÍK, D., 2002). Zbývá převést výstupní fuzzy množinu na ostré hodnoty. To je úkolem defuzzyfikace.

$$\mu^*(u) = \max \{\min \{\alpha_1, \mu_{ZV}\}, \min \{\alpha_2, \mu_{ZS}\}\}. \quad (4.3)$$



Obrázek 4.11: Inferenční mechanismus

#### 4.4.1 Defuzzyfikace

Pro praktickou realizaci akčního zásahu je potřeba přiřadit výstupním lingvistickým proměnným ostrou hodnotu akční veličiny v příslušném rozsahu. Proces, kdy approximujeme neostré termy ostrou hodnotou akční veličiny se nazývá defuzzyfikace. Na základě inference získáme funkci příslušnosti výstupní fuzzy množiny jako sjednocení oříznutých (Mamdaniho implikace) nebo zmenšených (Larsenova implikace)<sup>2</sup> funkcí příslušnosti. Metod defuzzyfikace je více, zde uvedu pouze často používané (JURA, P., 2003, strana 68). *Fuzzy Logic Toolbox* programu *Matlab* podporuje například **metodu centroidů**, **metodu středu maxima MOM**, nebo **metodu největšího maxima LOM**.

**Metoda centroidů COA** (centroid of area), nazývaná také **Metoda těžiště COG** (center of gravity). Je to nejznámější a obecně nejpoužívanější metoda. Fuzzyfikovaná ostrá hodnota se určí jako souřadnice těžiště plochy vytvořené sjednocením oříznutých výstupních fuzzy množin. Označíme-li funkci, která vznikne sjednocením oříznutých výstupních fuzzy množin od dílčích fuzzy pravidel  $\mu_S(u)$ , pak defuzzyfikovanou výstupní hodnotu metodou centroidů určíme :

$$u^* = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} u \cdot \mu_S(u) \cdot du}{\int_{-\infty}^{\infty} \mu_S(u) \cdot du}. \quad (4.4)$$

Tato metoda nezohledňuje překrytí jednotlivých funkcí, ze kterých se skládá výsledná funkce příslušnosti. Plocha překrytí je tedy započtena pouze jednou.

**Metoda středu maxima MOM** (middle of maximum) je metoda defuzzyfikace, kdy ostrou hodnotu udává aritmetický průměr prvního a posledního maxima, tzn. že výstupní funkce příslušnosti  $\mu(u)$  má maximum v intervalu  $< u_1^*; u_2^* >$ ,

$$u_{MOM} = \frac{u_1^* + u_2^*}{2}. \quad (4.5)$$

**Metoda největšího maxima LOM** (largest of maximum) je modifikací předešlé metody středu maxima. Jako defuzzyfikovaná hodnota se bere hodnota  $u$  největšího maxima funkce příslušnosti :

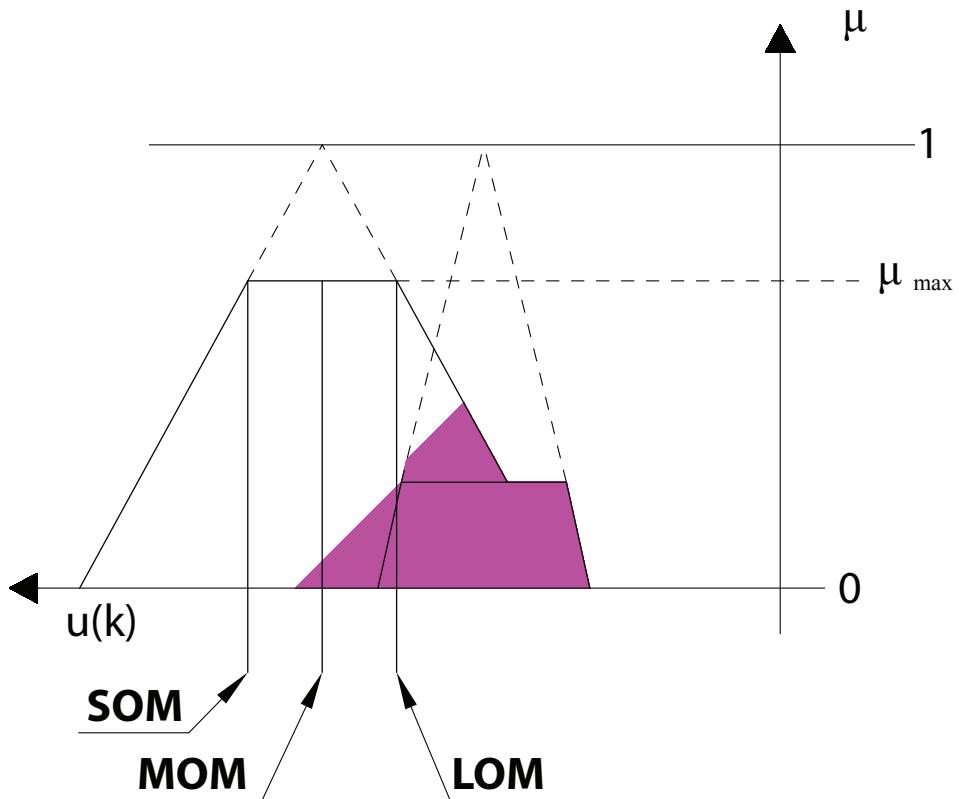
$$u_{LOM} = u_2^*. \quad (4.6)$$

---

<sup>2</sup>v této práci používám Mamdaniho implikaci

**Metoda nejmenšího maxima SOM** (smallest of maximum) je opět modifikací metody středu maxima. Jako defuzzyfikovaná hodnota se bere nejmenší hodnota  $u$  největšího maxima funkce příslušnosti :

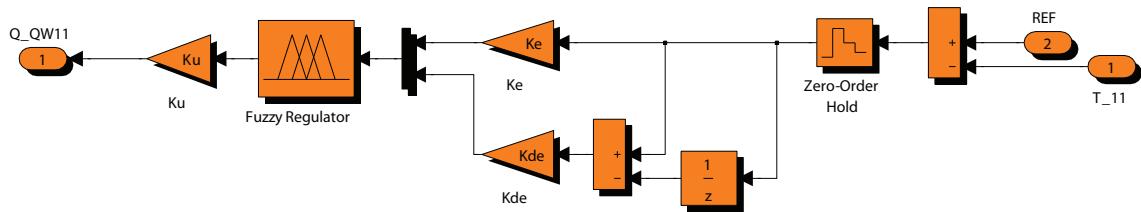
$$u_{SOM} = u_1^*. \quad (4.7)$$



Obrázek 4.12: Příklady jednotlivých metod defuzzyfikací

## 4.5 Nastavení fuzzy PD regulátoru

Hlavní nastavení fuzzy PD regulátoru spočívá v nastaveních správných funkcí příslušnosti, jejich rozsahu a bázi dat. Další nastavení - spíše doladění se provádí skrze váhy  $Ke$ ,  $Kde$  a  $Ku$ . Vliv jejich hodnot na nastavení fuzzy regulátoru je patrný z obrázku 4.13, na němž je zobrazena realizace fuzzy PD regulátoru v prostředí *simulink*.



Obrázek 4.13: Realizace fuzzy PD regulátoru v *simulinku*

Pomocí váhy  $Ku$  měníme v podstatě rozsah výstupního universa, čímž zvyšujeme, nebo snižujeme hodnotu akčního zásahu. Vahami  $Ke$ ,  $Kde$  násobíme vstupní universa pro regulační odchylku a její změnu.

Všechny fuzzy regulátory navržené pro stabilizaci teploty v jednotlivých subzónách mají tyto váhy stejně velké, jejich hodnoty jsou uvedeny v tabulce 4.6.

Váha	Hodnota
$Ke$	<b>-3.0</b>
$Kde$	<b>-0.1</b>
$Ku$	<b>1.1</b>

Tabulka 4.6: Váhy fuzzy regulátorů

Záporné znaménko u vah  $Ke$ ,  $Kde$  je způsobené záporným zesílením modelu reaktoru.

# Kapitola 5

## Simulace

Po vytvoření fuzzy regulátorů jsem simuloval jejich schopnost stabilizovat teplotu v jednotlivých subzónách reaktoru. Simulace byly prováděny na nelineárním matematickém modelu, odvozeném v kapitole 3 na straně 12. Všechny simulace byly provedeny vychylováním modelu z ustáleného stavu změnou průtoku katalyzátoru  $Q_{CAT}$ , který v modelu představuje neředitelnou avšak měřitelnou vstupní poruchu, kterou musí navržené regulátory kompenzovat. Změnou průtoku katalyzátoru  $Q_{CAT}$  dochází ke zvýšení výroby polypropylénu v obou reaktorech a tím i ke změně energetických poměrů v nich. Hodnotu průtoku katalyzátoru  $Q_{CAT}$  jsem měnil v intervalu  $Q_{CAT} = 4.75 \text{ kg.h}^{-1} \pm 10\%$ . Průtok katalyzátoru  $Q_{CAT}$  jsem v testech simuloval signálem jednotkového skoku, náhodného čísla a pulsů, vždy ve výše uvedeném rozsahu (tentotého signál tedy reprezentuje změny v průtoku katalyzátoru do modelu). Simulace probíhala souběžně na řízeném a neřízeném modelu s tím, že neřízený model měl na svých vstupech hodnoty průtoků kvenče  $Q_{QW11} - Q_{QW43}$  a propylénu  $Q_{C3=11} - Q_{C3=11}$  odpovídající ustálenému stavu teploty v jednotlivých subzónách uvedených v tabulce 3.2.

Od akčního zásahu všech fuzzy regulátorů, představující průtok kvenče do jednotlivých subzón reaktoru je odečítáno náhodné číslo v rozsahu  $\pm 500$ . Tímto simuluji vstupní neurčitost modelu. V reálném případě si toto lze představit na jako neurčitost způsobenou armaturou, která vykonává v reálném případě akční zásah spočtený regulátorem, případně situaci, kdy není zaručené přesné žádané množství kvenče v potrubí před touto regulační armaturou. Realizace této neurčitosti je zobrazena v **příloze A**, kde jsou zobrazeny veškerá potřebná simulační schémata.

Při simulacích byla snížena hodnota teploty  $T_B$  na hodnotu  $T_B = 348 \text{ K}$ . Účelem této změny je přitvrzení simulačních podmínek, při kterých jsou navržené fuzzy PD regulátory testované. Toto je možné pozorovat v simulovaných průbězích, konkrétně

zvýšením ustálené teploty v jednotlivých subzónách z hodnoty  $T_{REF} = 353\text{ K}$ .

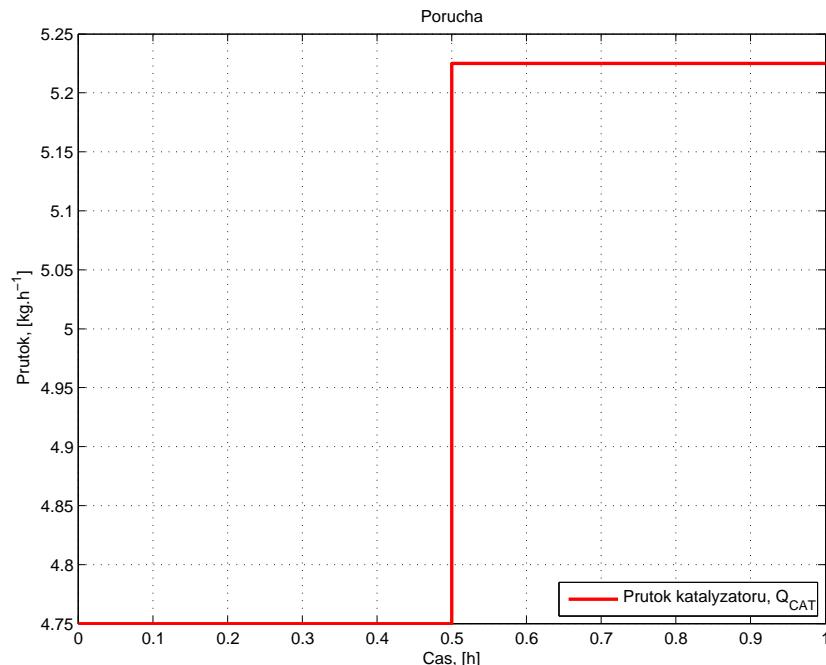
Délka každé simulace představuje jednu hodinu.

## 5.1 Odezva modelu na jednotkový skok

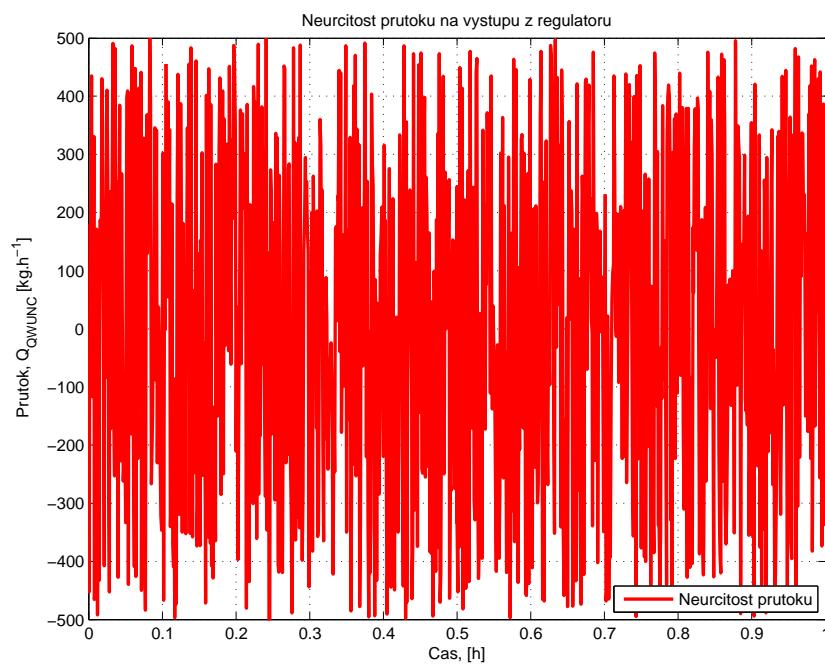
Signál, který byl použit jako simulace změny průtoku katalyzátoru  $Q_{CAT}$  zobrazuje obrázek 5.1. Průběh signálu představující výše uvedenou vstupní neurčitost zobrazuje obrázek 5.2. Její průběh je pro všechny dále uvedené simulace stejný, proto dále již nebude uváděn. Ze zobrazených průběhů teplot v jednotlivých zónách je patrné, že navržené regulátory plní úlohu stabilizace teploty ve velmi blízkém okolí  $T = 353\text{ K}$ .

Velmi důležitý je průběh akčního zásahu, protože v reálném případě je akčním členem regulační armatura, jejíž schopnosti jsou omezeny jejími parametry, není tedy například možné od ní požadovat přestavení z horní mezní polohy do dolní ve velmi krátkém čase. Z přiložených grafů je patrné, že akční zásah vypočtený regulátorem je realizovatelný.

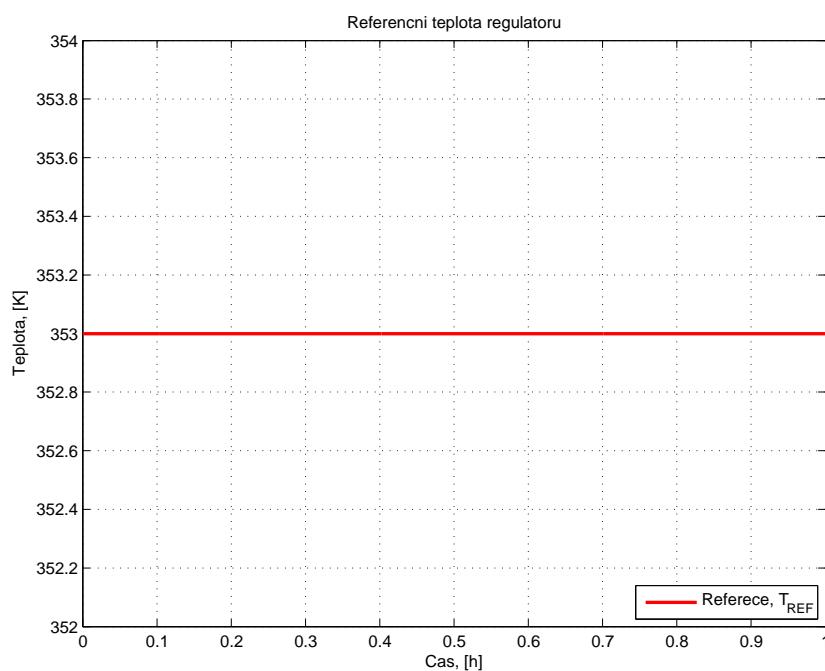
Referenční signál, který je přiváděn na vstup regulátorů zobrazuje obrázek 5.3.



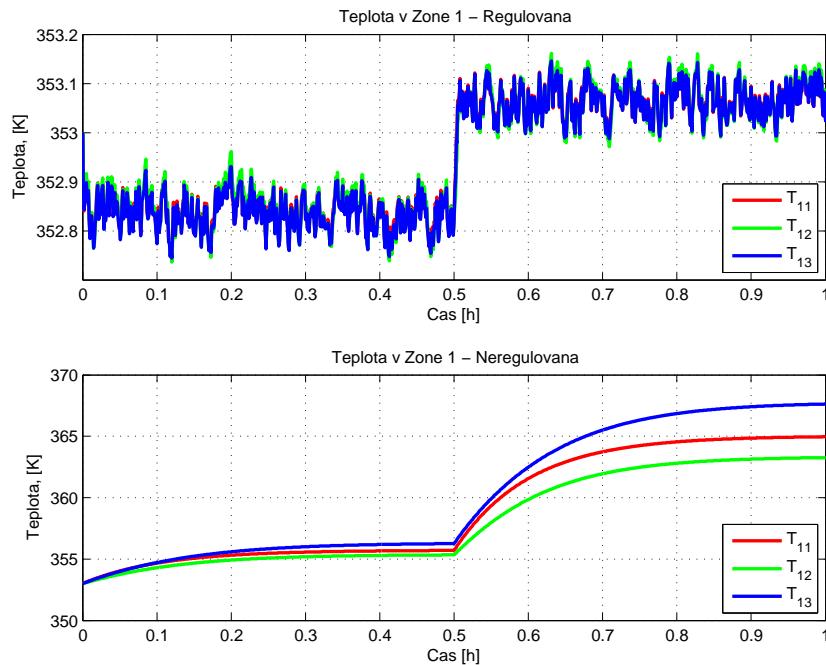
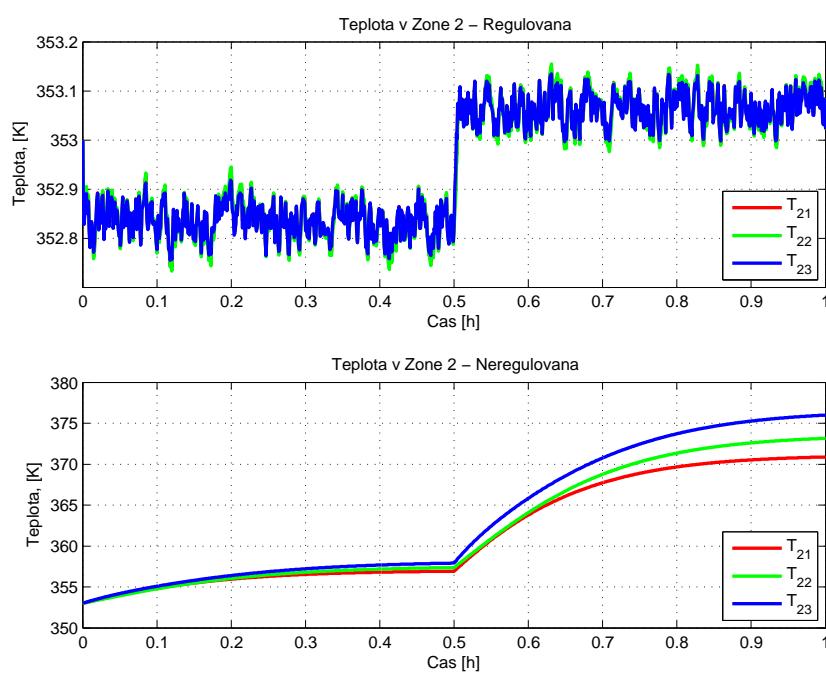
Obrázek 5.1: Průtok katalyzátoru  $Q_{CAT}$

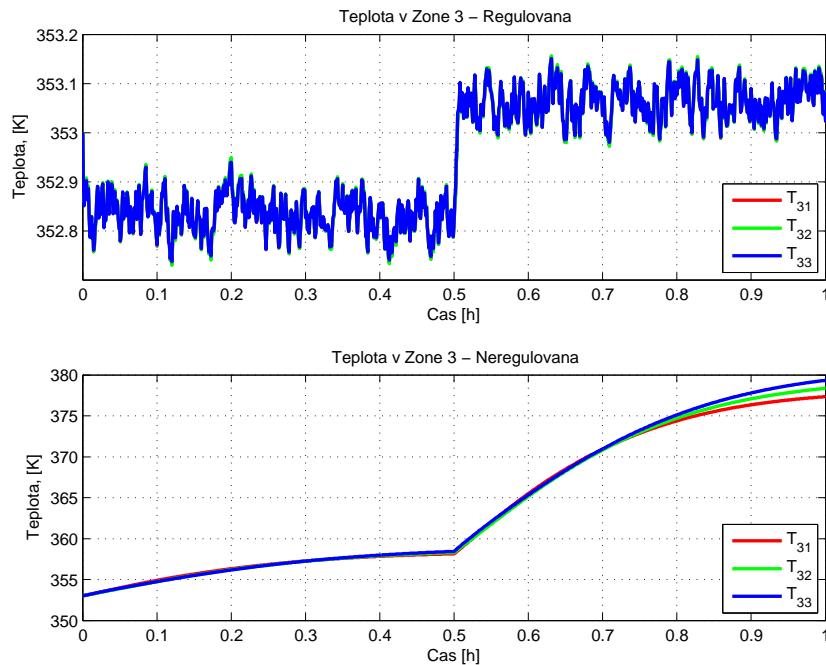
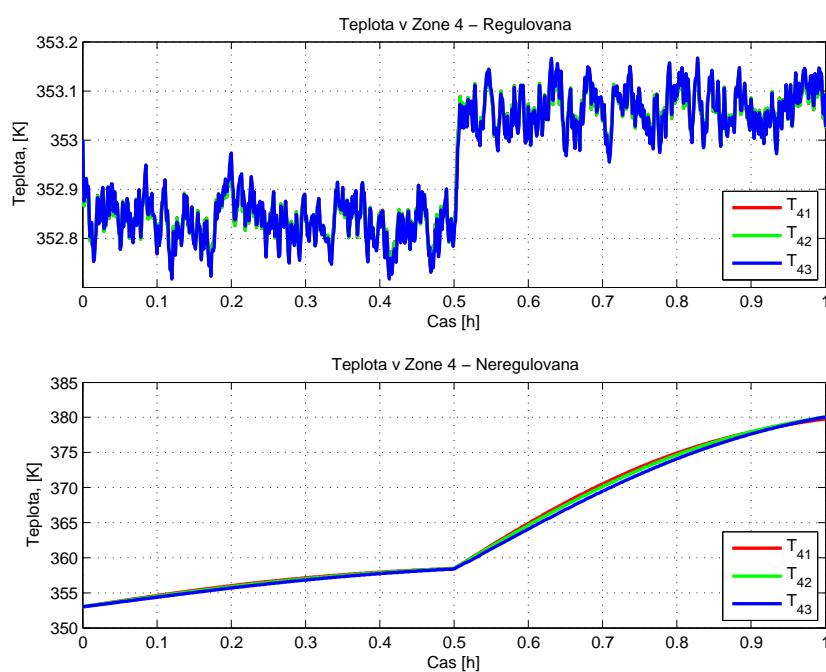


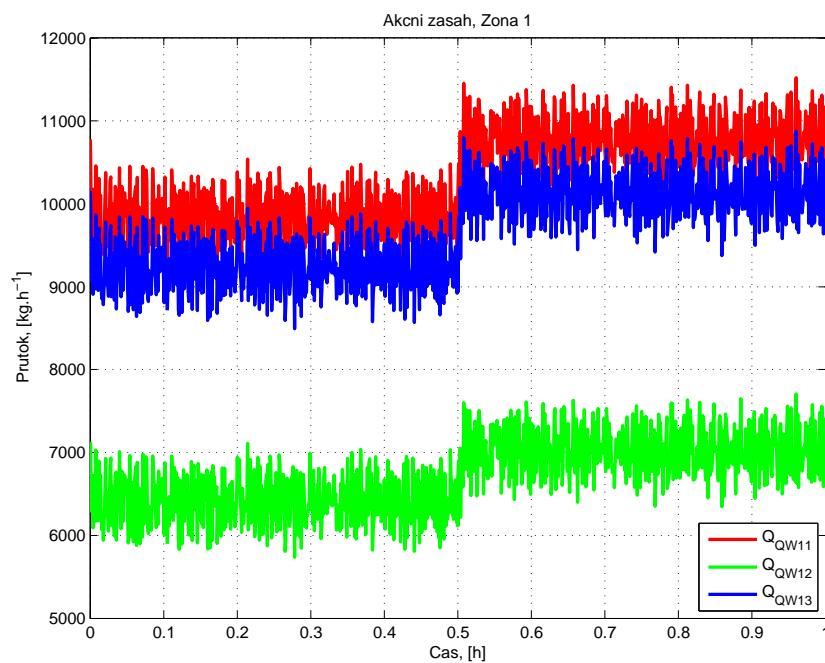
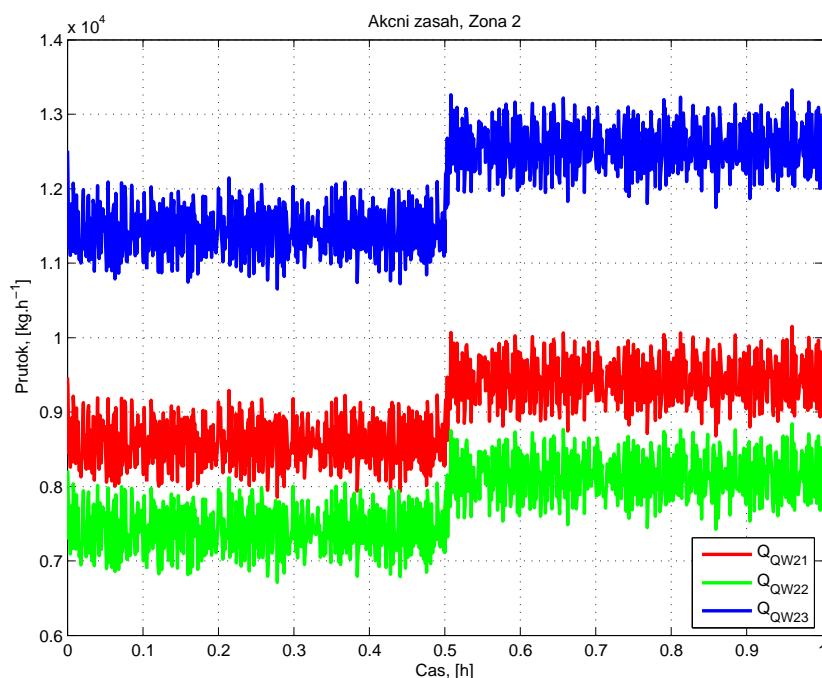
Obrázek 5.2: Simulace neurčitosti průtoku kvenče na výstupu z regulátoru

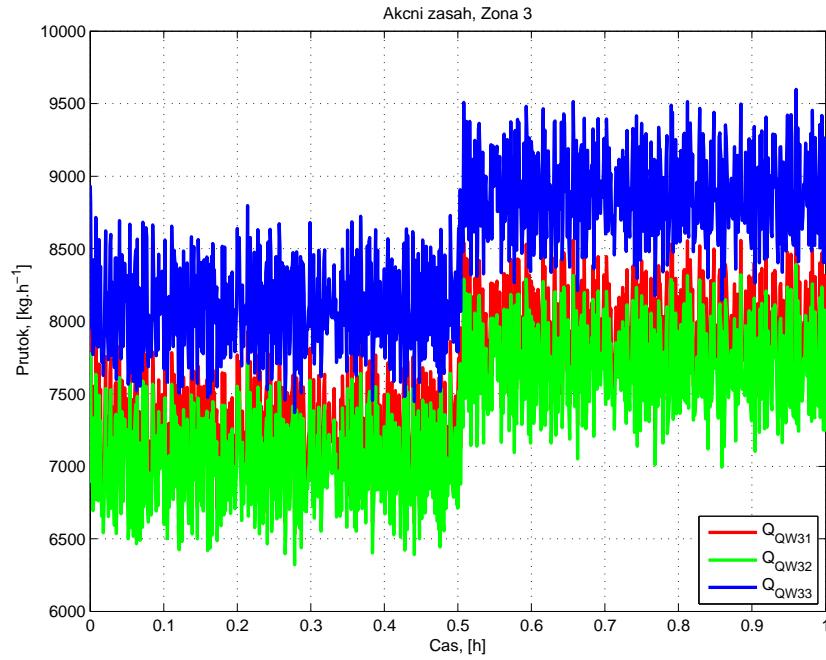
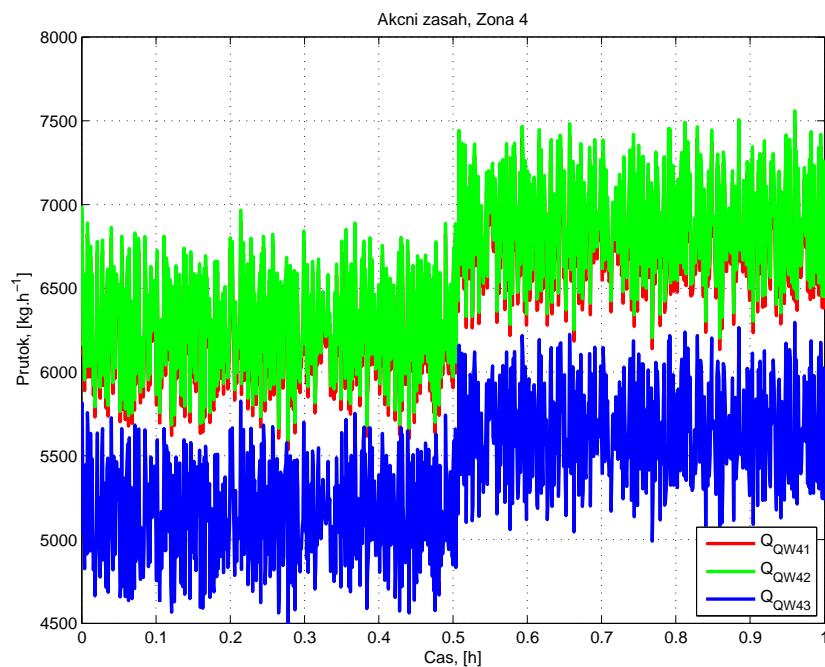


Obrázek 5.3: Referenční teplota všech fuzzy regulátorů

Obrázek 5.4: Teplota v zóně  $Z_1$ Obrázek 5.5: Teplota v zóně  $Z_2$

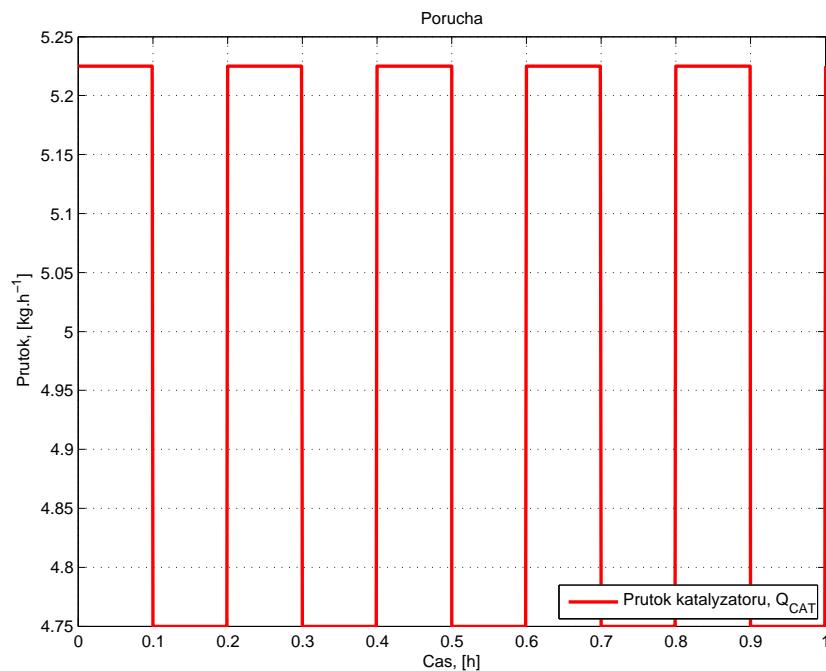
Obrázek 5.6: Teplota v zóně  $Z_3$ Obrázek 5.7: Teplota v zóně  $Z_4$

Obrázek 5.8: Akční zásah regulátoru - průtok kvenče, zóna  $Z_1$ Obrázek 5.9: Akční zásah regulátoru - průtok kvenče, zóna  $Z_2$

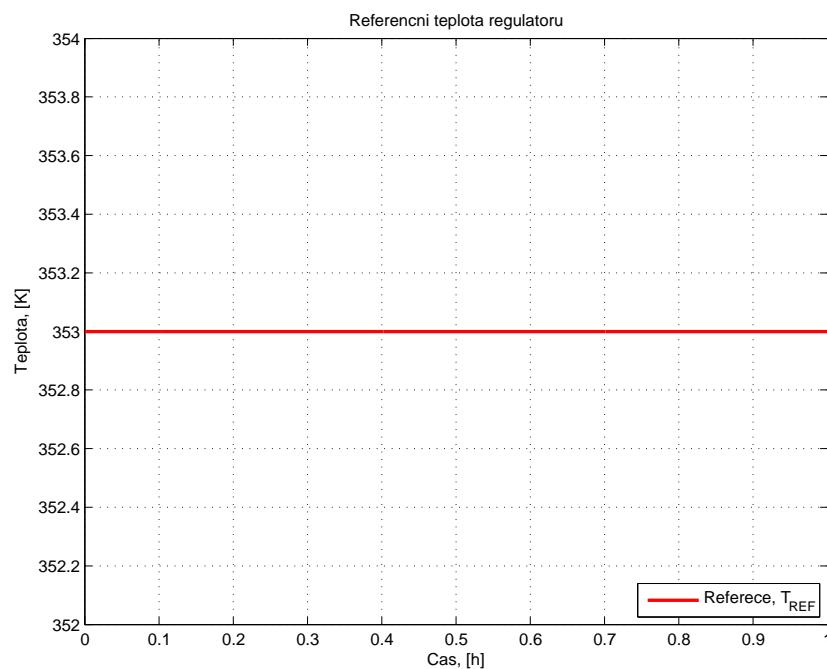
Obrázek 5.10: Akční zásah regulátoru - průtok kvenče, zóna  $Z_3$ Obrázek 5.11: Akční zásah regulátoru - průtok kvenče, zóna  $Z_4$

## 5.2 Odezva modelu na pulzní změnu poruchové veličiny

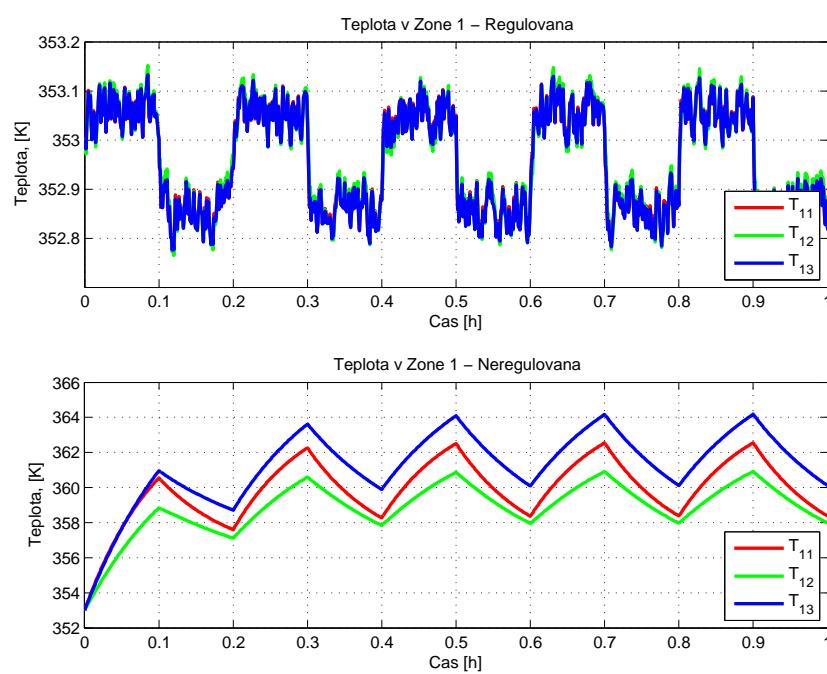
Signál použitý k reprezentaci změny průtoku katalyzátoru do reaktoru zobrazuje obrázek 5.12. Referenční signál zobrazuje obrázek 5.13. Ze zobrazených průběhů je opět patrná požadovaná schopnost navržených fuzzy PD regulátorů stabilizovat teplotu v reaktoru. Průběh akčního zásahu, tedy průtoku kvenče do jednotlivých subzón je bez velkých špiček a skoků, což opět potvrzuje správnost návrhu regulátorů.

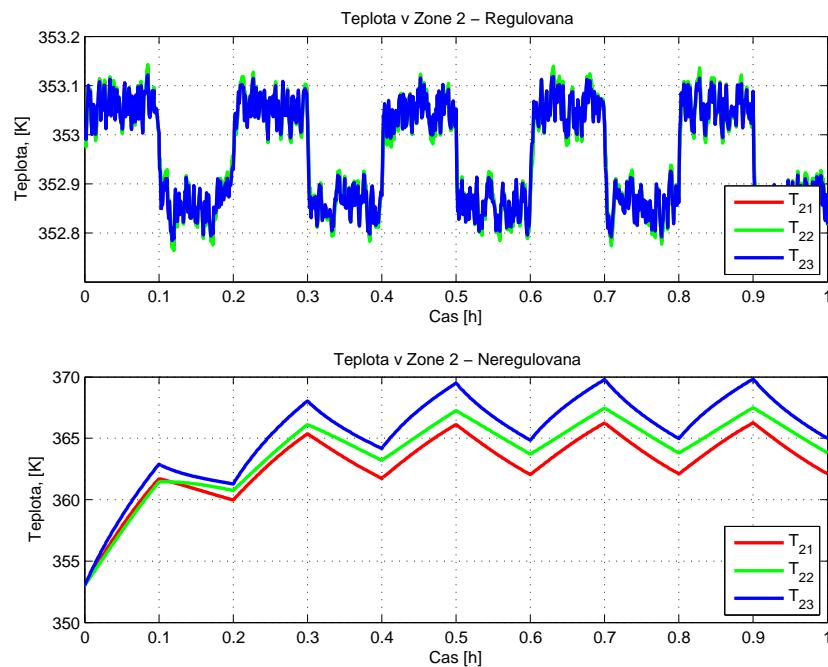
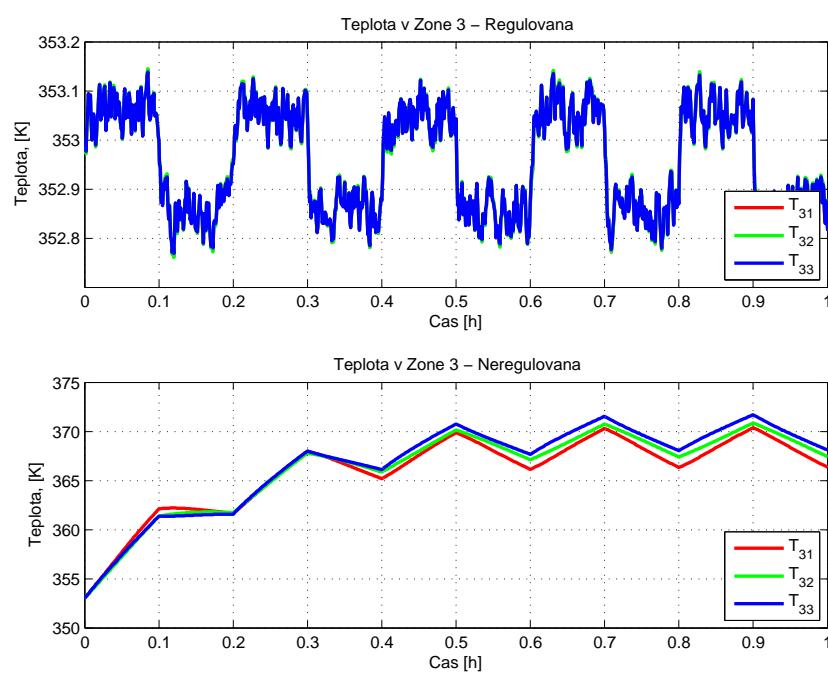


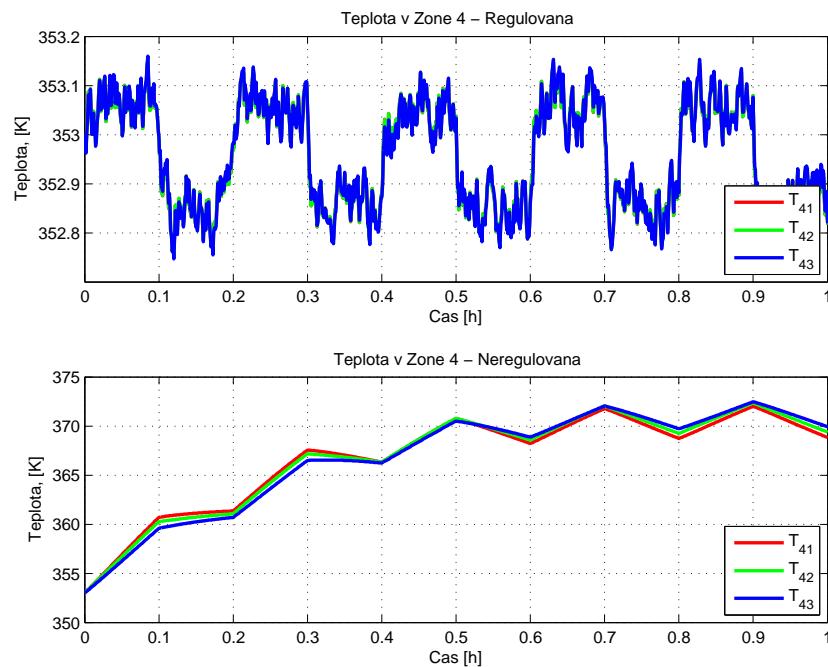
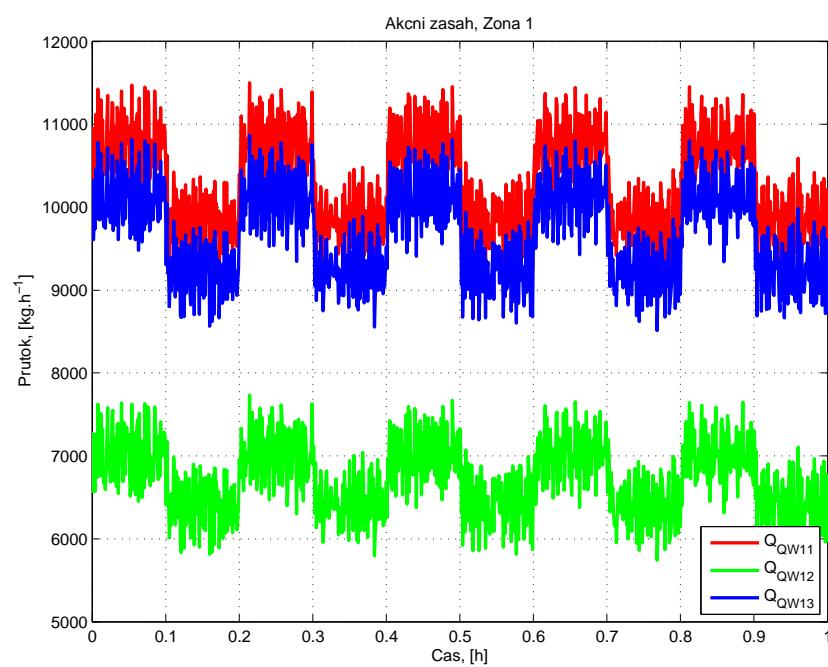
Obrázek 5.12: Průtok katalyzátoru  $Q_{CAT}$

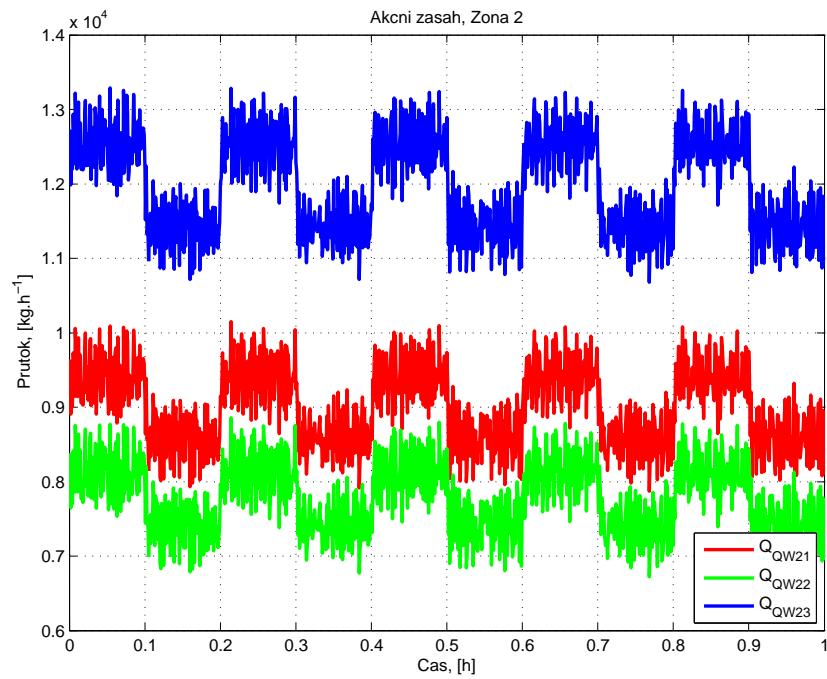
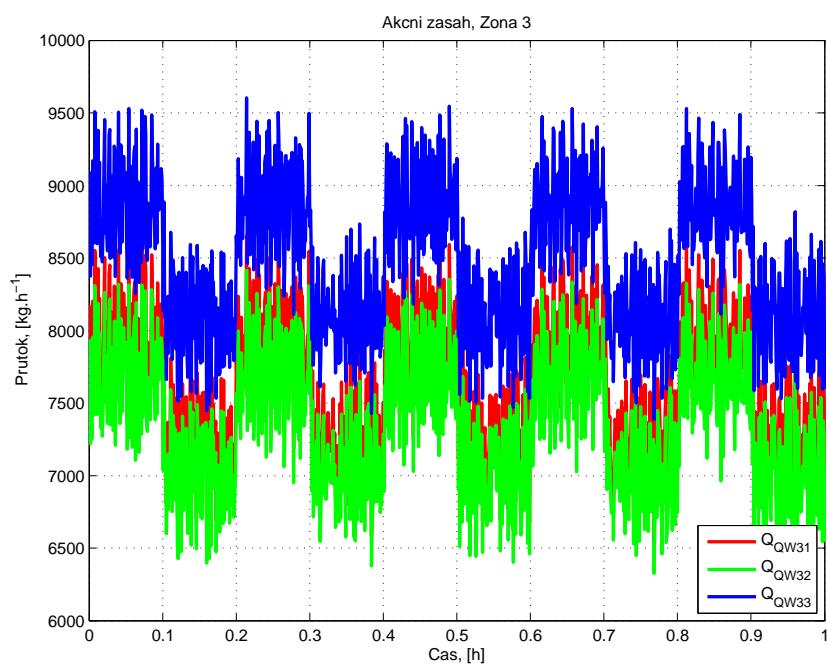


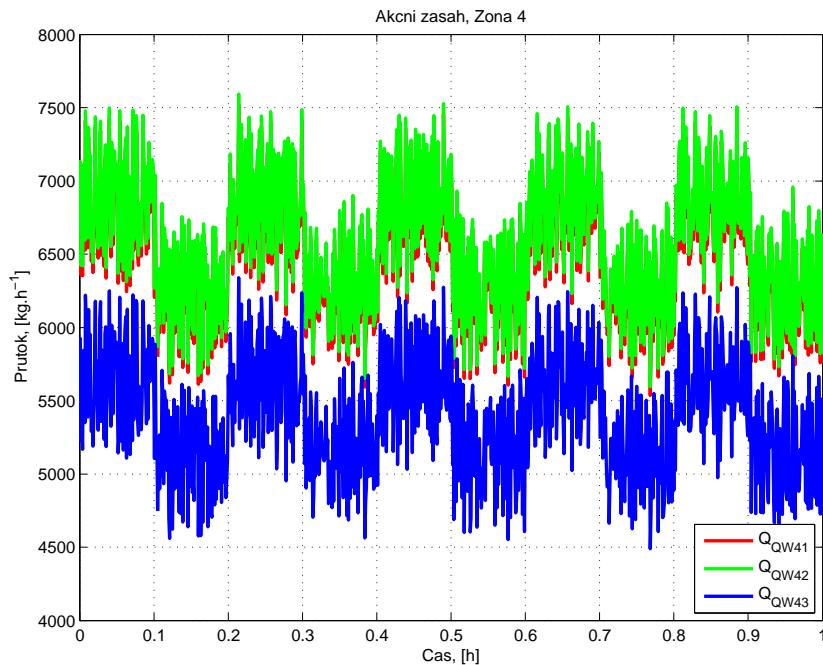
Obrázek 5.13: Referenční teplota všech fuzzy regulátorů

Obrázek 5.14: Teplota v zóně  $Z_1$

Obrázek 5.15: Teplota v zóně  $Z_2$ Obrázek 5.16: Teplota v zóně  $Z_3$

Obrázek 5.17: Teplota v zóně  $Z_4$ Obrázek 5.18: Akční zásah regulátoru - průtok kvenče, zóna  $Z_1$

Obrázek 5.19: Akční zásah regulátoru - průtok kvenče, zóna  $Z_2$ Obrázek 5.20: Akční zásah regulátoru - průtok kvenče, zóna  $Z_3$

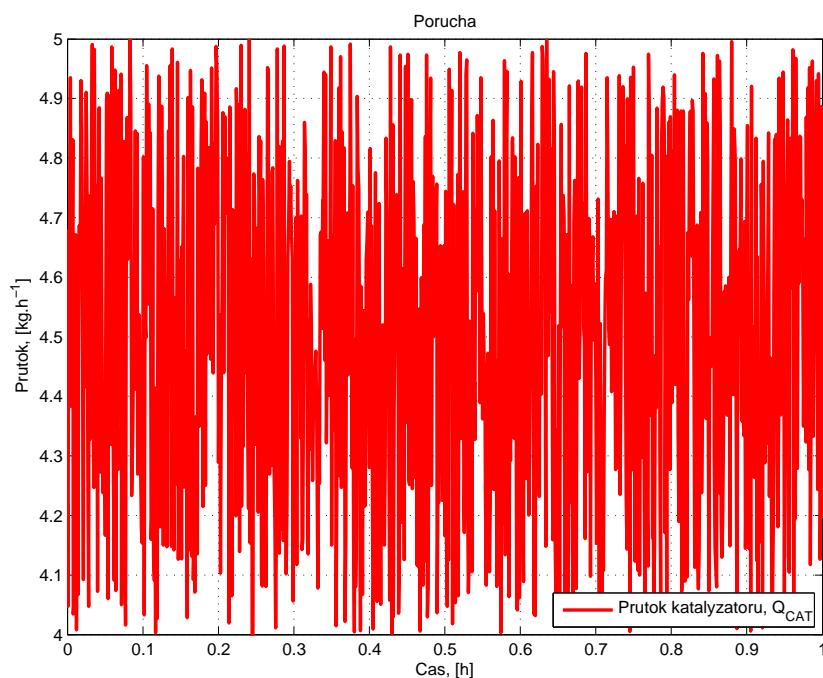
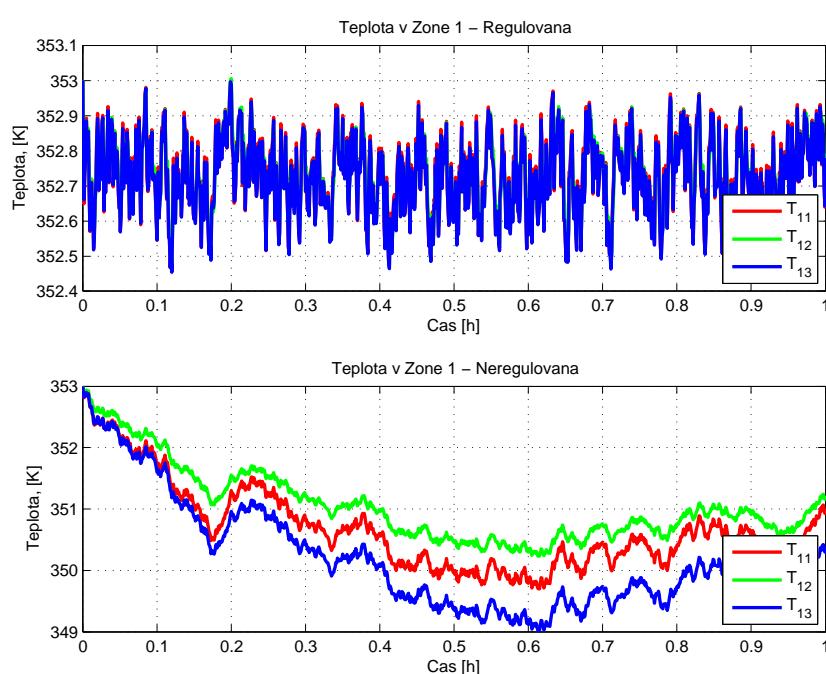


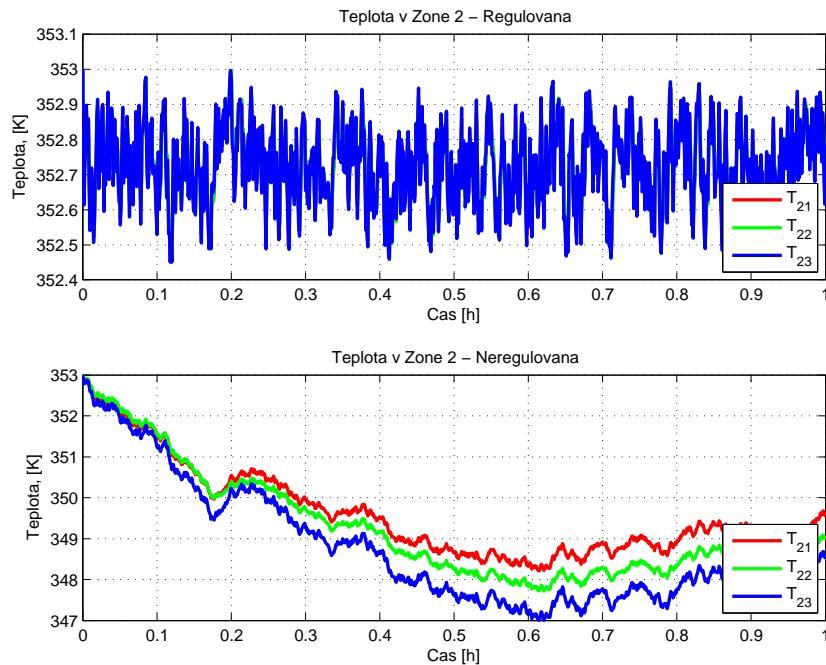
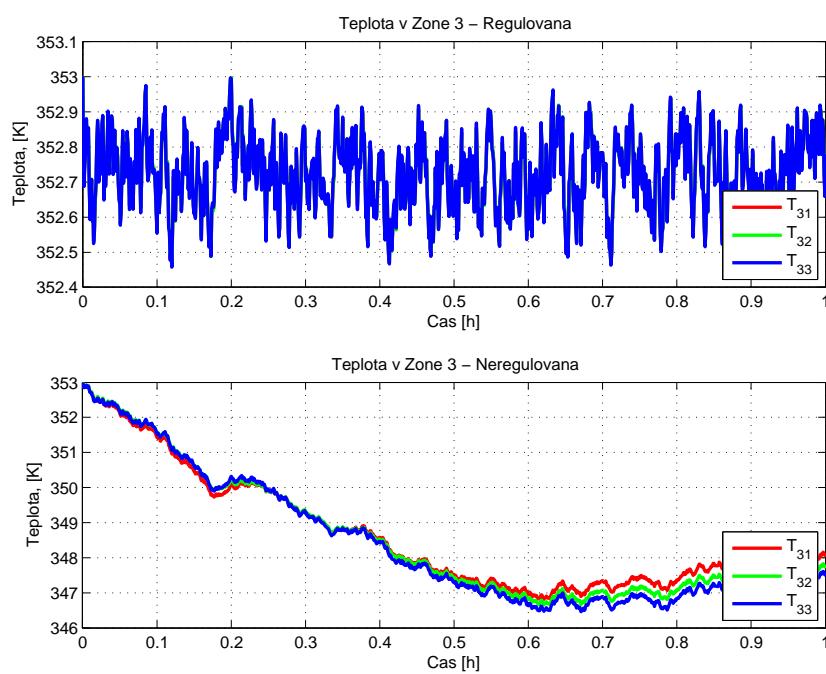
Obrázek 5.21: Akční zásah regulátoru - průtok kvenče, zóna  $Z_4$

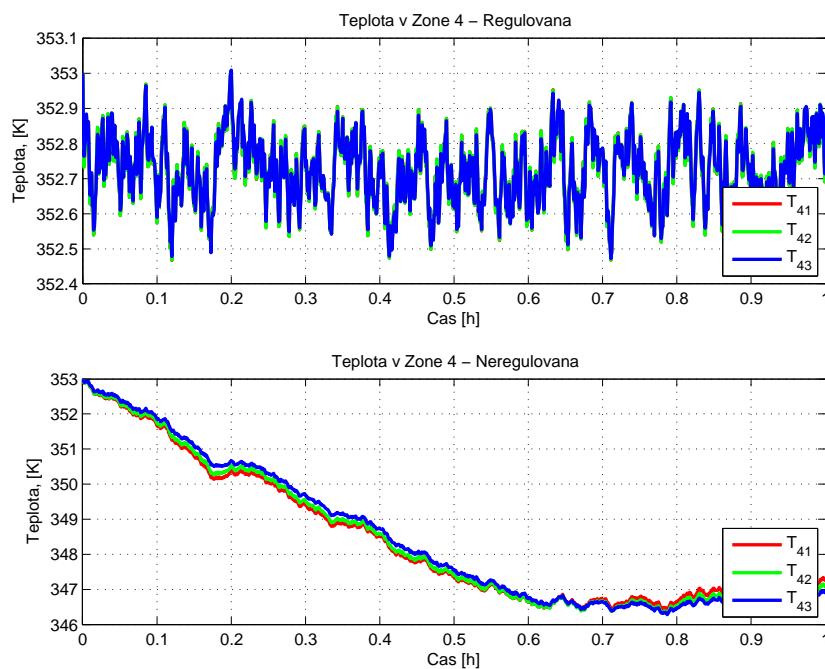
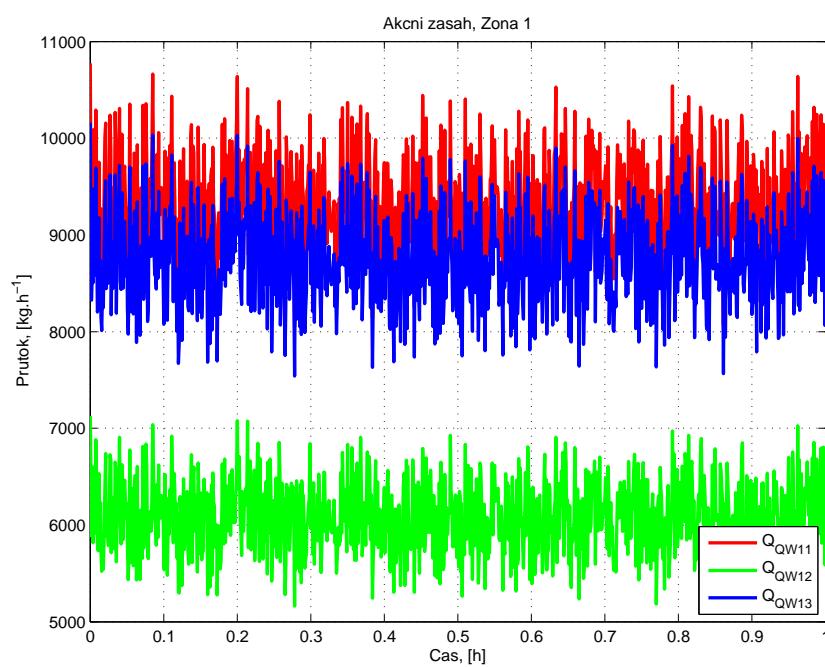
### 5.3 Odezva modelu na náhodnou změnu poruchy

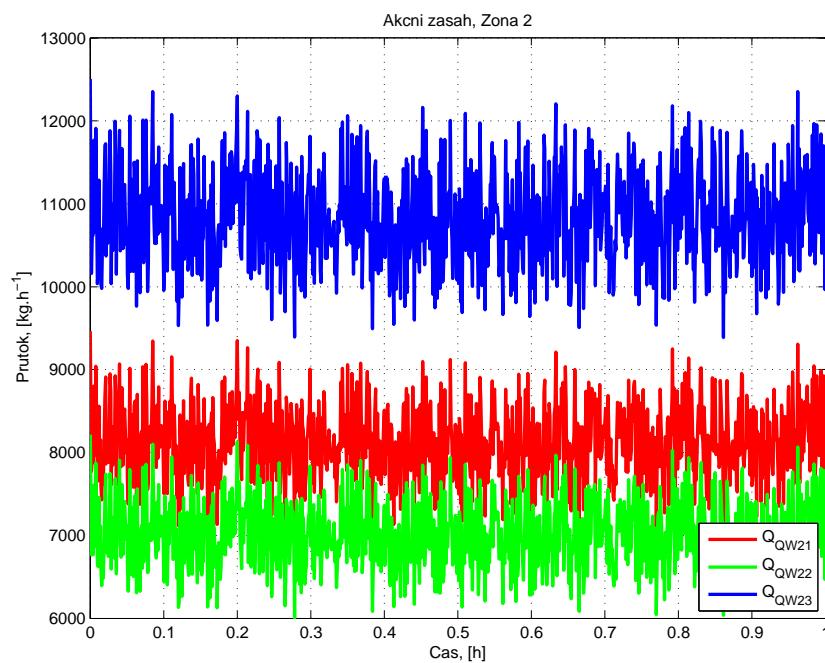
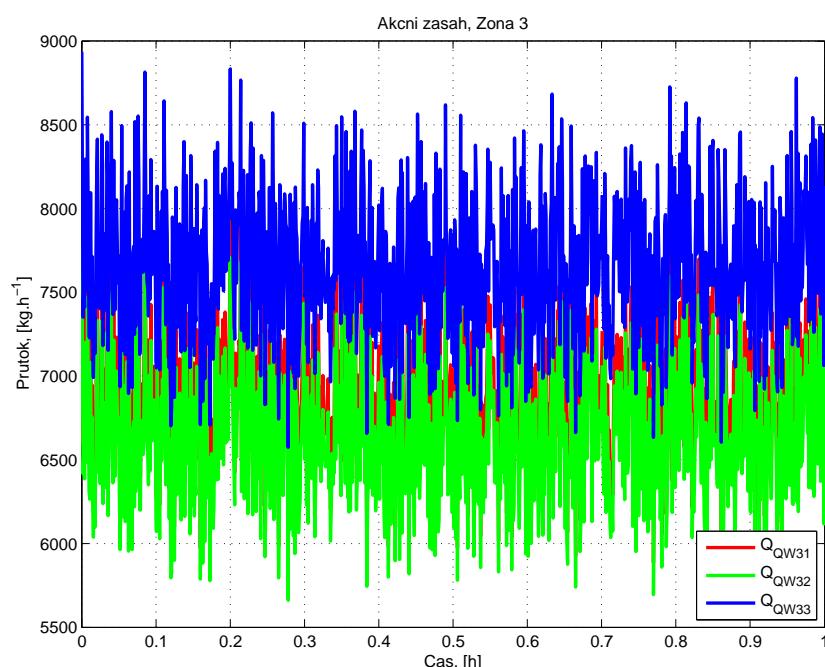
Realizaci změny průtoku katalyzátoru zobrazuje obrázek 5.22, referenční teplota na vstupu všech regulátorů je stejná jako v předešlých dvou případech. Její průběh je zobrazen například obrázkem 5.13. Tato simulace se svými parametry blíží nejvíce reálnému provozu. V reálném případě není průtok katalyzátoru možné držet naprosto konstantní. Důsledkem tohoto se hodnota jeho průtoku neustále mění, byť ve výrazně menším rozsahu než je zde simulováno.

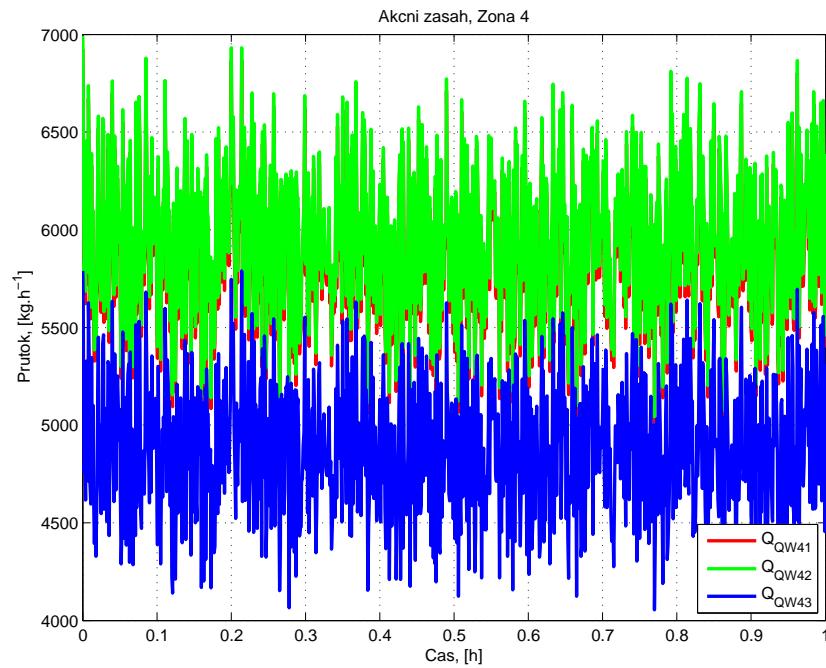
Dosažené výsledky opět potvrzují správnost návrhu fuzzy regulátorů a to jak z požadavku stabilizace teploty, tak z přijatelného průběhu akčního zásahu.

Obrázek 5.22: Průtok katalyzátoru  $Q_{CAT}$ Obrázek 5.23: Teplota v zóně  $Z_1$

Obrázek 5.24: Teplota v zóně  $Z_2$ Obrázek 5.25: Teplota v zóně  $Z_3$

Obrázek 5.26: Teplota v zóně  $Z_4$ Obrázek 5.27: Akční zásah regulátoru - průtok kvenče, zóna  $Z_1$

Obrázek 5.28: Akční zásah regulátoru - průtok kvenče, zóna  $Z_2$ Obrázek 5.29: Akční zásah regulátoru - průtok kvenče, zóna  $Z_3$

Obrázek 5.30: Akční zásah regulátoru - průtok kvenče, zóna  $Z_4$ 

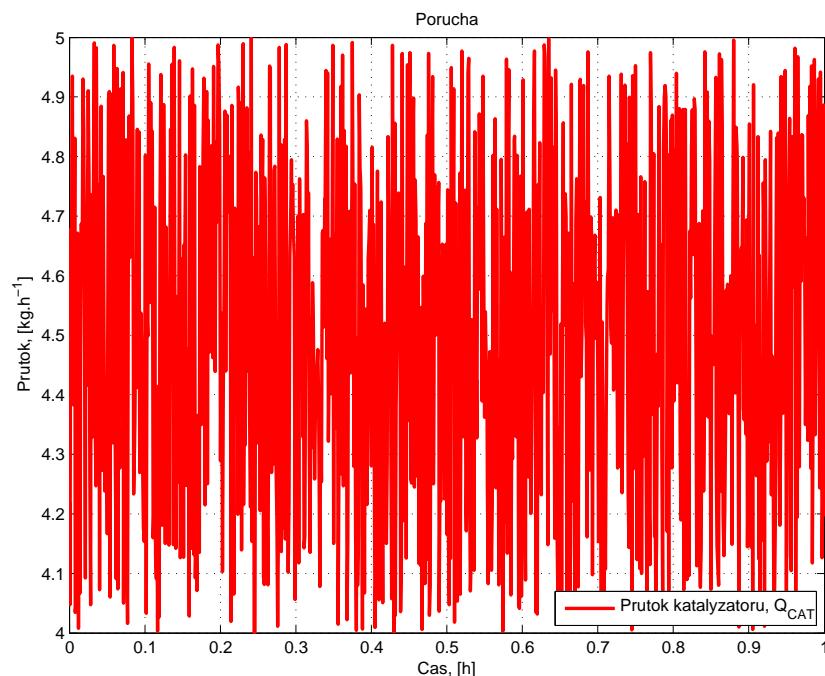
## 5.4 Test regulátorů na změnu reference

Poslední test spočíval ve změně referenčních teplot, které mají za úkol navržené fuzzy PD regulátory skrze své akční zásahy v subzónách udržet. Ve všech předchozích případech byla referenční teplota  $T_{REF}$  ve všech subzónách reaktoru nastavená na stejnou hodnotu,  $T_{REF} = 353 K$ . V tomto testu byla tato teplota změněna pro každou zónu reaktoru. Nastavené hodnoty shrnuje tabulka 5.1 a obrázek 5.32. Průběh průtoku katalyzátoru zůstal stejný jako v předešlém případě, tedy jak zobrazuje obrázek 5.22.

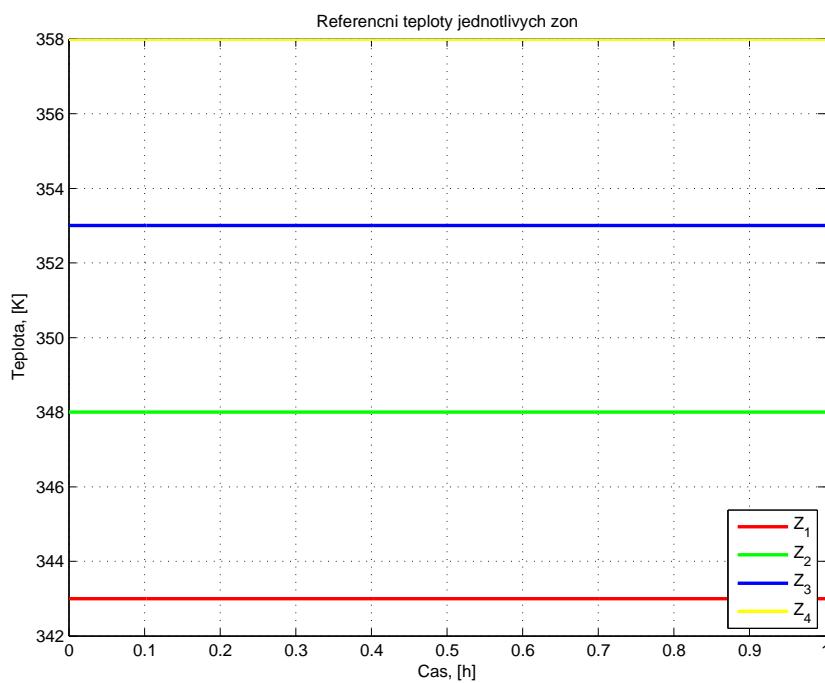
Zóna	$T_{REF}$
$Z_1$	343 K
$Z_2$	348 K
$Z_3$	353 K
$Z_4$	358 K

Tabulka 5.1: Změněné referenční teploty v zónách

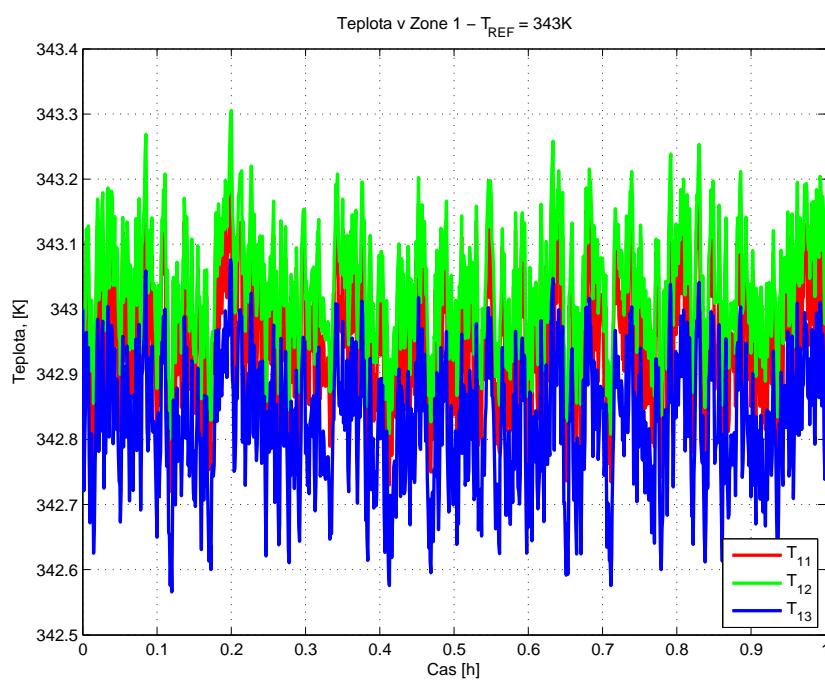
Z obrázků je patrné, že i v tomto testu navržené regulátory obstály. Zřetelnější odchylku od referenční teploty  $T_{REF}$  je možné pozorovat pouze v zóně  $Z_2$  5.33 a  $Z_3$  5.33. V těchto zónách se teplota během testu od referenční teploty vychýlila nejvíce. Její hodnota je však v rozsahu  $\pm 1 K$ , což lze tolerovat. Průběh akčního zásahu je opět přijatelný. Váhy všech regulátorů zůstaly v průběhu testu nezměněny. V tomto testu již dosažené výsledky regulátorů neporovnávám s neregulovanou soustavou.

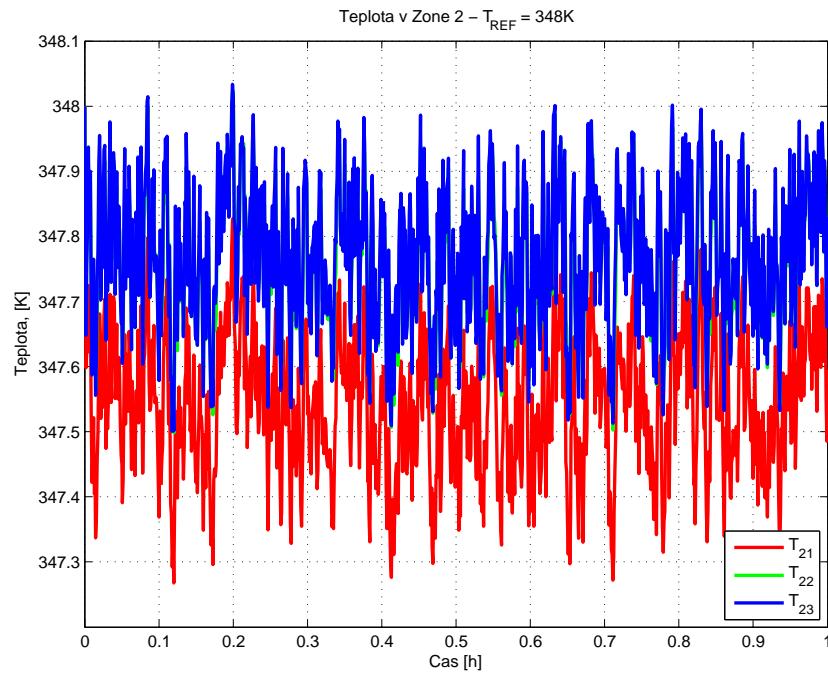
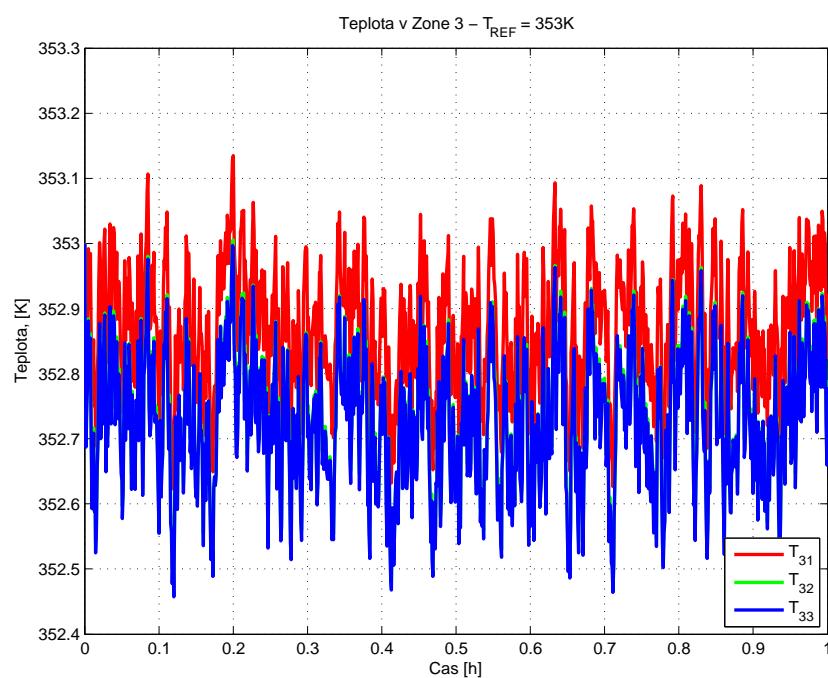


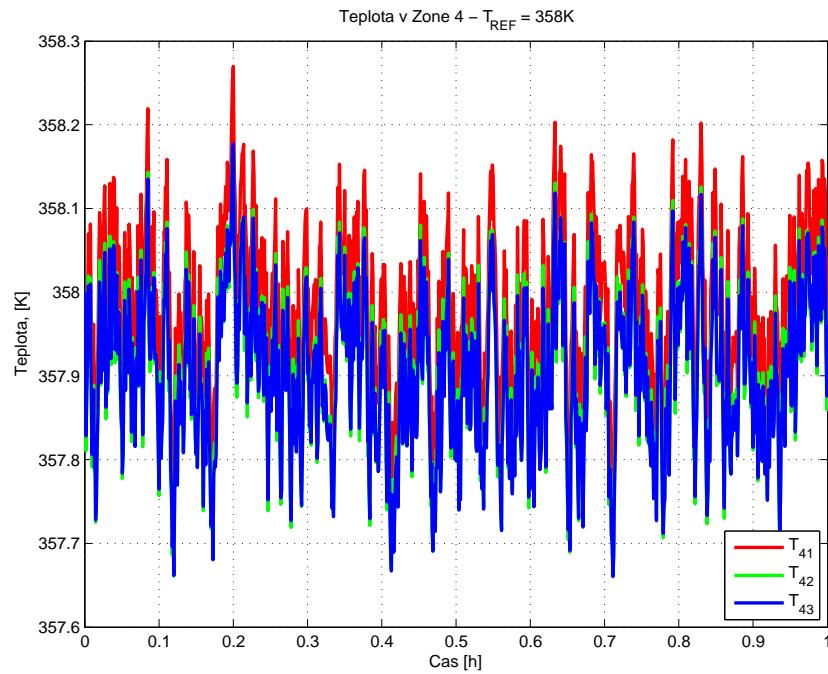
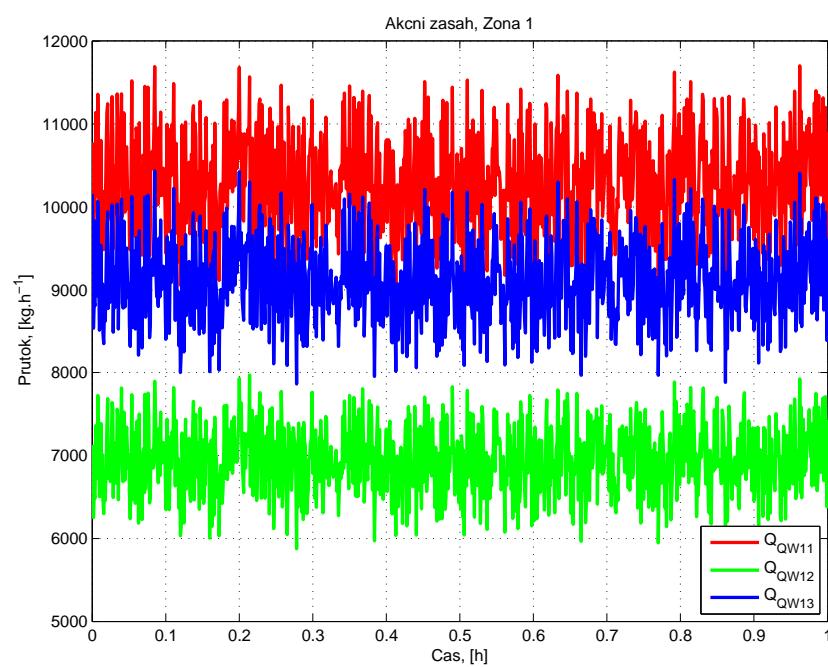
Obrázek 5.31: Průtok katalyzátoru  $Q_{CAT}$

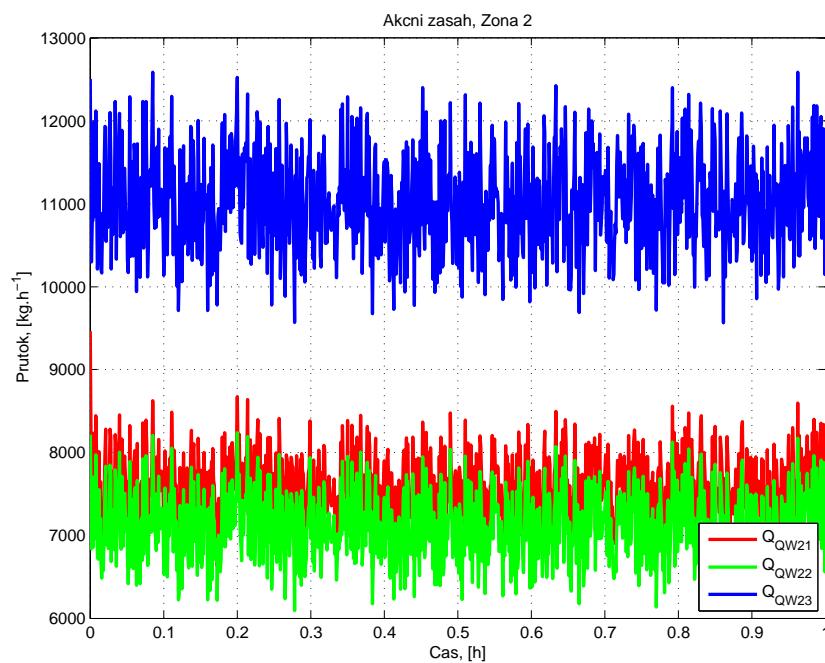
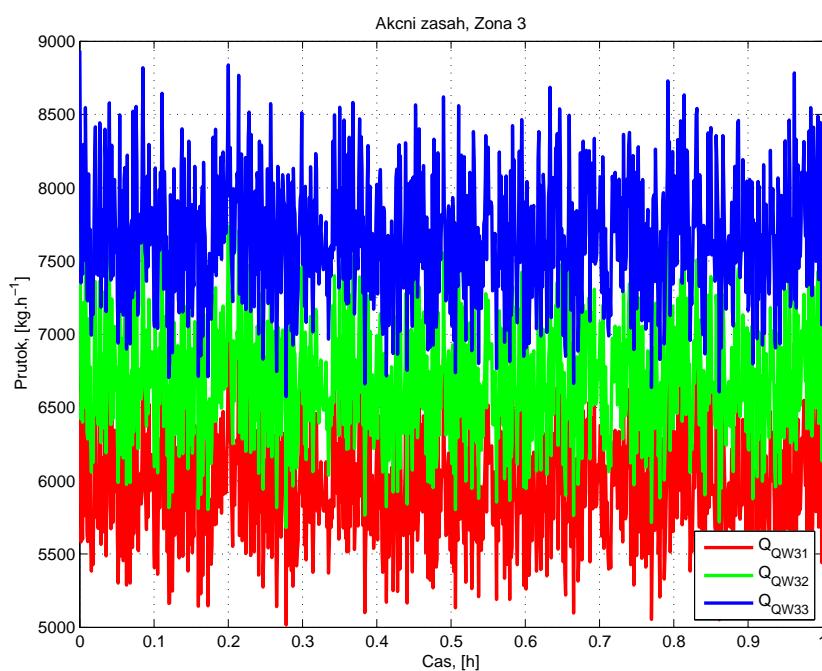


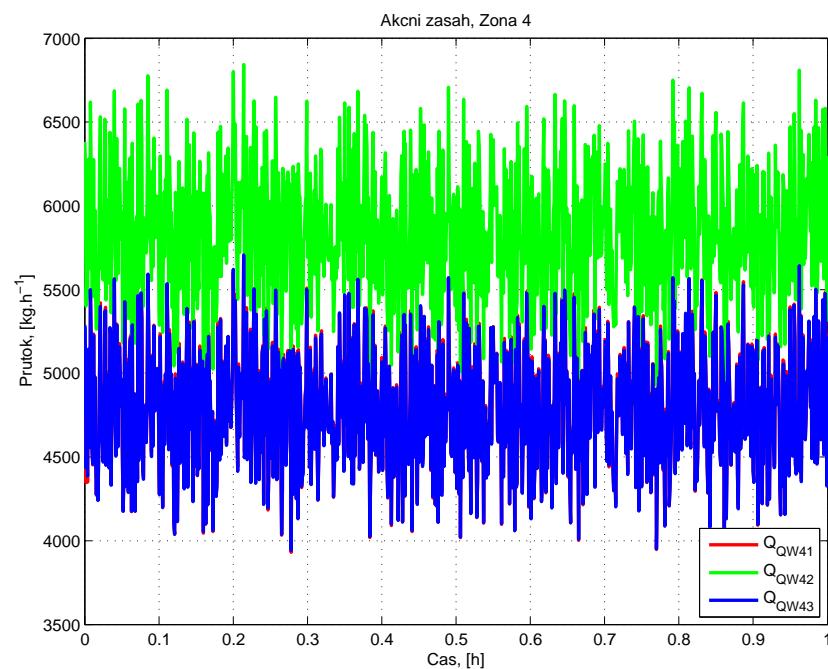
Obrázek 5.32: Referenční teploty fuzzy regulátorů

Obrázek 5.33: Teplota v zóně  $Z_1$

Obrázek 5.34: Teplota v zóně  $Z_2$ Obrázek 5.35: Teplota v zóně  $Z_3$

Obrázek 5.36: Teplota v zóně  $Z_4$ Obrázek 5.37: Akční zásah regulátoru - průtok kvenče, zóna  $Z_1$

Obrázek 5.38: Akční zásah regulátoru - průtok kvenče, zóna  $Z_2$ Obrázek 5.39: Akční zásah regulátoru - průtok kvenče, zóna  $Z_3$



Obrázek 5.40: Akční zásah regulátoru - průtok kvenče, zóna  $Z_4$

# Kapitola 6

## Závěr

Primárním cílem této diplomové práce bylo vytvořit matematický model popisující vývoj teploty v subzónách reálného polymeračního reaktoru pro výrobu polypropylénu v plynné fázi. Nejdříve bylo nutné nastudovat problematiku výroby polypropylénu v plynné fázi, seznámit se s fyzikálně chemickým základem celého technologického procesu výroby a polymerace samotné.

V úvodu práce byl podrobně vysvětlen princip fungování polymerační jednotky pro výrobu polypropylénu v plynné fázi, zjednodušeně byla nastíněna podstata chemické reakce, na jejímž základě celý technologický proces funguje. Nelineární matematický model popisující teplotní poměry v subzónách reaktoru byl odvozen na základě materiálové a entalpicke bilance reaktoru, respektive jeho subzón. Odvození obou bilancí bylo v práci detailně popsáno, včetně zjednodušeného modelu popisující množství polypropylénu vyrobeného v jednotlivých subzónách reaktoru. Model reaktoru je založen na procesních datech získaných z reálné polymerační jednotky.

Nelineární matematický model byl dále linearizován za účelem získání modelu lineárního - LTI. Takto získaný model, realizovaný v podobě stavového popisu byl podroben několika testům, s cílem zjistit základní vlastnosti systému z hlediska teorie řízení.

Sekundárním cílem práce byl návrh regulátorů pro matematický model vytvořený v její primární části. Regulátory byly navrženy na vytvořený nelineární model reaktoru. V práci jsem navrhl celkem dvanáct fuzzy PD regulátorů - pro každou subzónu reaktoru jeden fuzzy PD regulátor. Cílem regulace byla kompenzace vlivu poruchové veličiny v podobě průtoku katalyzátoru  $Q_{CAT}$  na teplotu v jednotlivých subzónách reaktoru.

Všechny navržené fuzzy PD regulátory byly podrobeny několika testům, ze kterých zřetelně vyplývá, že jejich návrh byl úspěšný, neboť ve všech simulovaných případech dokázaly bez ohledu na průběh poruchové veličiny stabilizovat teplotu v subzónách reak-

toru na konstantní hodnotě - ve velmi malém okolí provozní teploty reaktoru. Rozsah, ve kterém se teploty v jednotlivých subzónách pohybovali je přibližně  $1\text{ K}$ , při požadované teplotě v subzónách rovnající se  $T_{REF} = 353\text{ K}$ . Průběhy akčních zásahů, mající v reálném případě podobu průtoků kvenče  $Q_{QW}$  do jednotlivých subzón reaktoru byli v práci uvedeny jako součást výsledků provedených testů. Jejich průběh potvrzuje správný návrh fuzzy regulátorů, protože velikosti a průběhy akčních zásahů nevykazují žádné lokální špičky, které by v reálném případě byly regulační armaturou jakožto akčním členem ovládající průtok těžko realizovány.

Fuzzy PD regulátor byl navržen s ohledem na jeho schopnost řízení nelineárních systémů a možnost jeho praktické realizace v průmyslových řídících systémech. V současné době existuje mnoho v průmyslu používaných řídících systémů, které lze vybavit / případně jsou již vybaveny možností realizace fuzzy regulátoru. Mezi tyto systémy patří například systém **Delta V** od společnosti **Emerson Process management**, případně systémy **Tecomat** České společnosti **Teco Kolín**.

# Literatura

ATKINS, P. W. (1992), *Physical Chemistry*, Oxford: Oxford University Press.

LEVENSPIEL, O. (1999), *Chmical Reaction Engineering, Third edition*, New York: John Wiley and Sons.

GORBACH, A. B., NAIK, S. D., RAY, W. H. (2000), *Dynamics and stability analysis of solid catalyzed gas-phase polymerization of olefins in contious stirred bed reactors*, Elsevier: Chemical Engineering Science, Volume 55, Issue 20, Page 4461–4479.

DITTRICH, CH. J., MUSTERS, S. M. P. (2007), *On the residence time distribution in reactors with non-uniform velocity profiles: The horizontal stired bed reactor for polypropylene proiction*, Elsevier: Chemical Engineering Science, Volume 67, Pages 5777–5793.

CARACOTSIOS, M. (2001), *On the residence time distribution in reactors with non-uniform velocity profiles: The horizontal stired bed reactor for polypropylene production*, Elsevier: Volume 47, Issues 9-11, Pages 2591–2596.

DITL, P. (2000), *Chemické reaktory*, Praha: Vydavatelství ČVUT.

MODRLÁK, O. (2004), *Teorie automatického řízení I. - SYSTÉMY S VÍCE VSTUPY A VÝSTUPY - MIMO SYSTÉMY*, Liberec: Technická universita v Liberci - Katedra řídící techniky.

MODRLÁK, O. (2004), *Teorie automatického řízení II. - Fuzzy řízení a regulace*, Praha: Technická universita v Liberci - Katedra řídící techniky.

HORÁČEK, P. FUKA, J. (1999), *Systémy a modely*, Praha: Vydavatelství ČVUT.

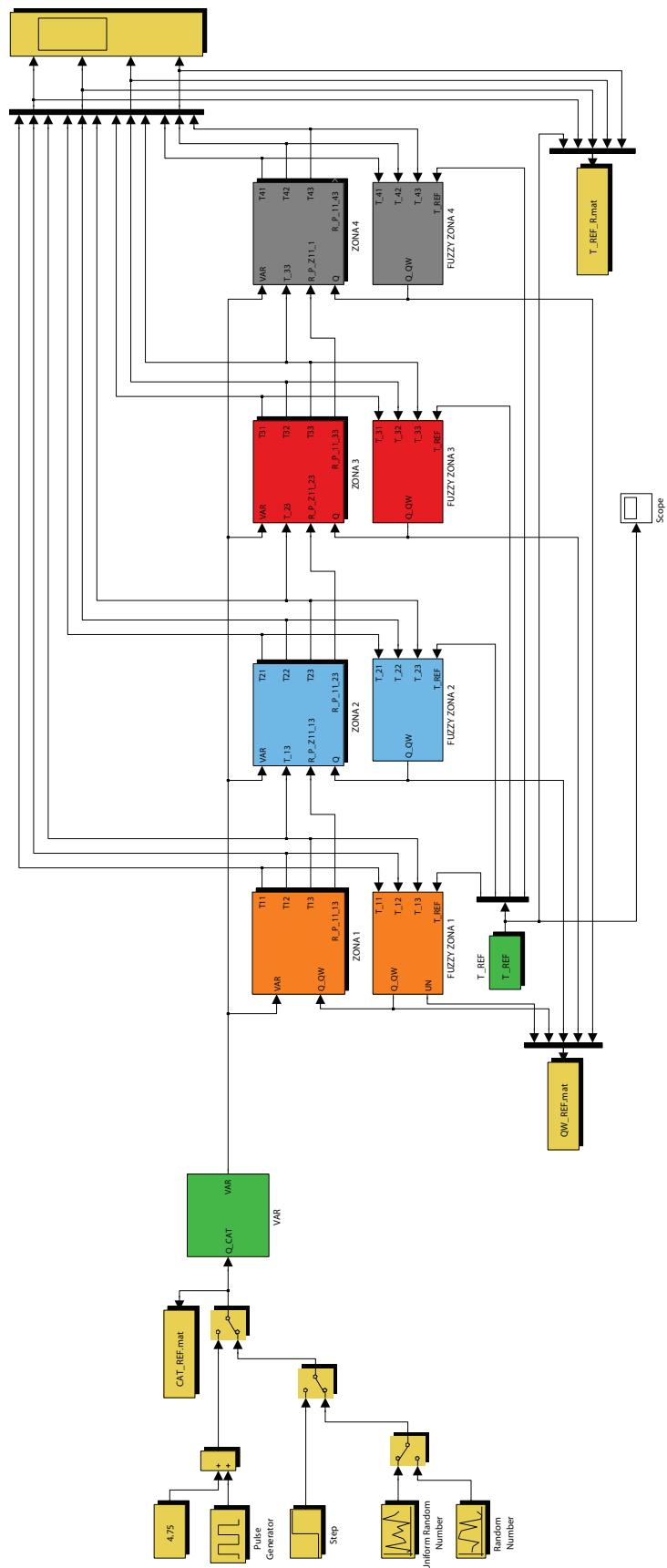
ZIEGLER-NATTA CATALYST (cit. 2008-05-05), *Ziegler-Natta catalyst*, From Wikipedia, the free encyclopedia. (<http://en.wikipedia.org/wiki/Ziegler-Natta-catalyst>)

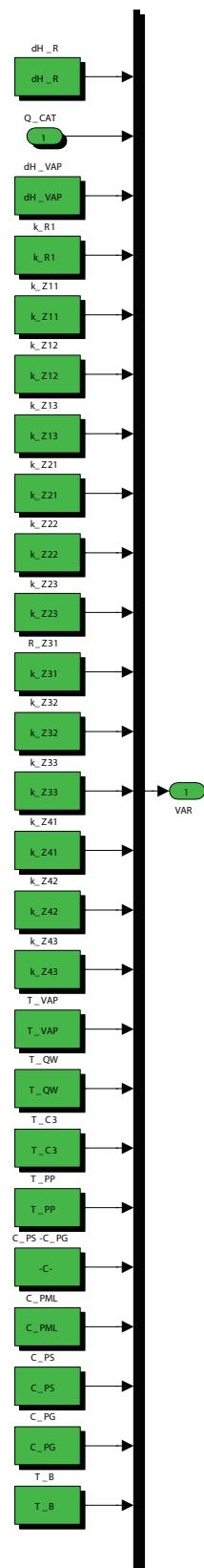
- ALKENE (cit. 2008-05-04), *Alkene*, From Wikipedia, the free encyclopedia. <<http://en.wikipedia.org/wiki/Alkene>>
- PROPENE (cit. 2008-06-04), *Propene*, From Wikipedia, the free encyclopedia. <<http://en.wikipedia.org/wiki/Propene>>
- LINSTROM, P. J., MALLARD, G. W., EDS. (June 2005), *NIST Chemistry WebBook*, *NIST Standard Reference Database Number 69*, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg MD, 20899. <<http://webbook.nist.gov>>
- CHISSO GAS PHASE PP PROCESS (cit. 2008-05-04), *Chisso Gas Phase PP Process* <<http://www.chisso.co.jp/english/international/pp.html>>
- BUCHELLI, A., CARACOTSIOS, M. (1993), *Polymerization of alpha - olefins*, International patent, International publication Number WO 93/24533 <<http://www.wipo.int/pctdb/en/wo.jsp?wo=1993024533>>
- KHARE, N. P. (2003), *Predictive modeling of metal - catalyzed polyolefin processes* - Doctor of philosophy tesis, Blacksburg, VA: Faculty of the Virginia Polytechnic Institute and State University. <<http://scholar.lib.vt.edu/theses/available/etd-11252003-115529/>>
- JURA, P. (2003), *Základy fuzzy logiky pro řízení a modelování*, Brno: VUTIUM.
- BARTOVSKÁ, N (2008), *Chemická kinetika V1.0-Kapitola 6. Katalizované reakce* <<http://vydavatelstvi.vscht.cz/informace/uid-isbn-978-80-7080-670-8-cze.html>>
- MINAŘÍK, D. (2002), *Fuzzy řízení pro systém aktivního tlumení automobilu - diplomová práce*, Praha: ČVUT.
- KOZOJED, A. (2006), *Aktivní tlumení pérování automobilu - bakalářská práce*, Praha: ČVUT.

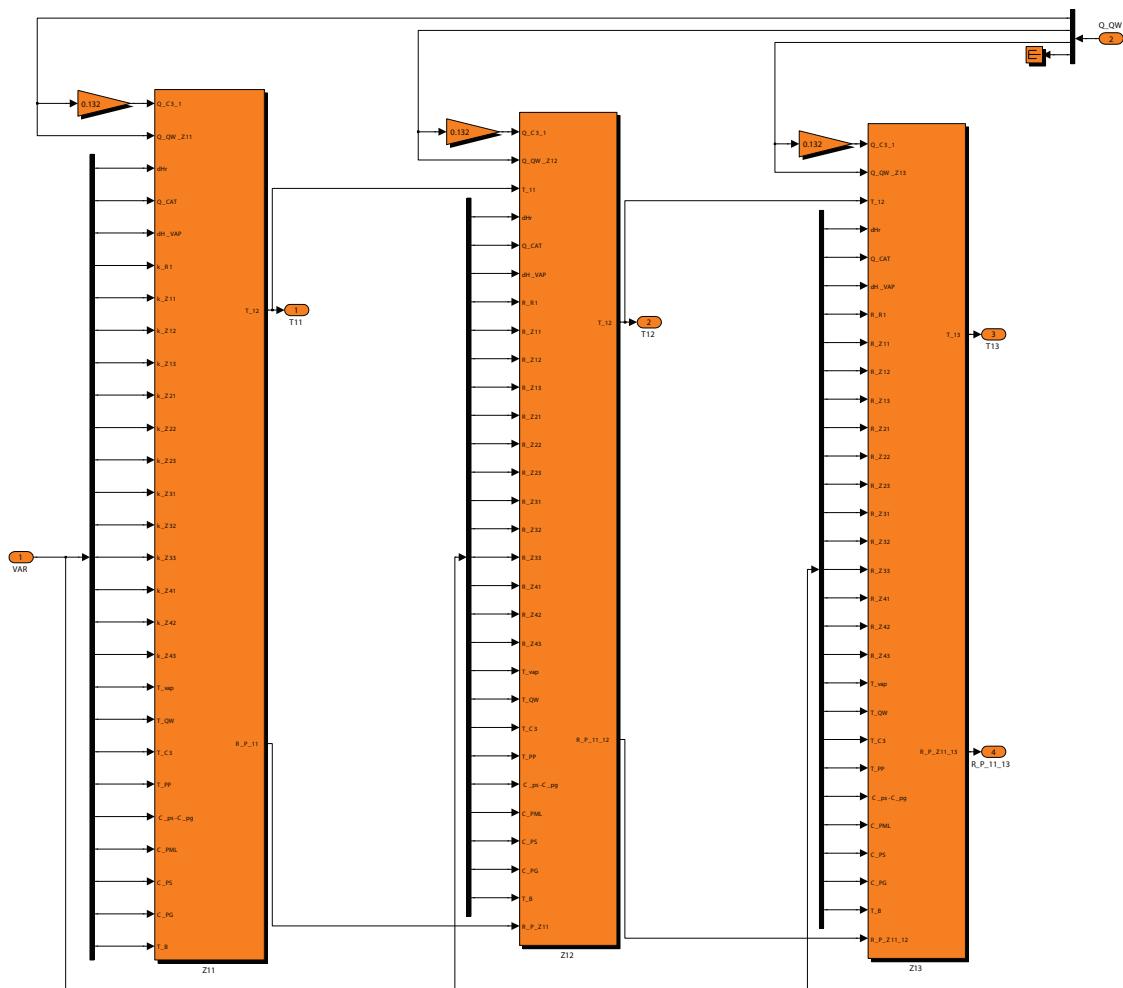
## Příloha A

### Simulinková simulační schéma zapojení

Vzhledem k rozsáhlosti modelu reaktoru v simulinku budou dále uvedená zapojení společná pro celý reaktor a zapojení pro subzónu  $Z_{11}$ , odlišnosti subzóny  $Z_{11}$  budou uvedeny na příkladu subzóny  $Z_{43}$ .

Obrázek A.1: Celkové zapojení modelu reaktoru v prostředí *Simulink*

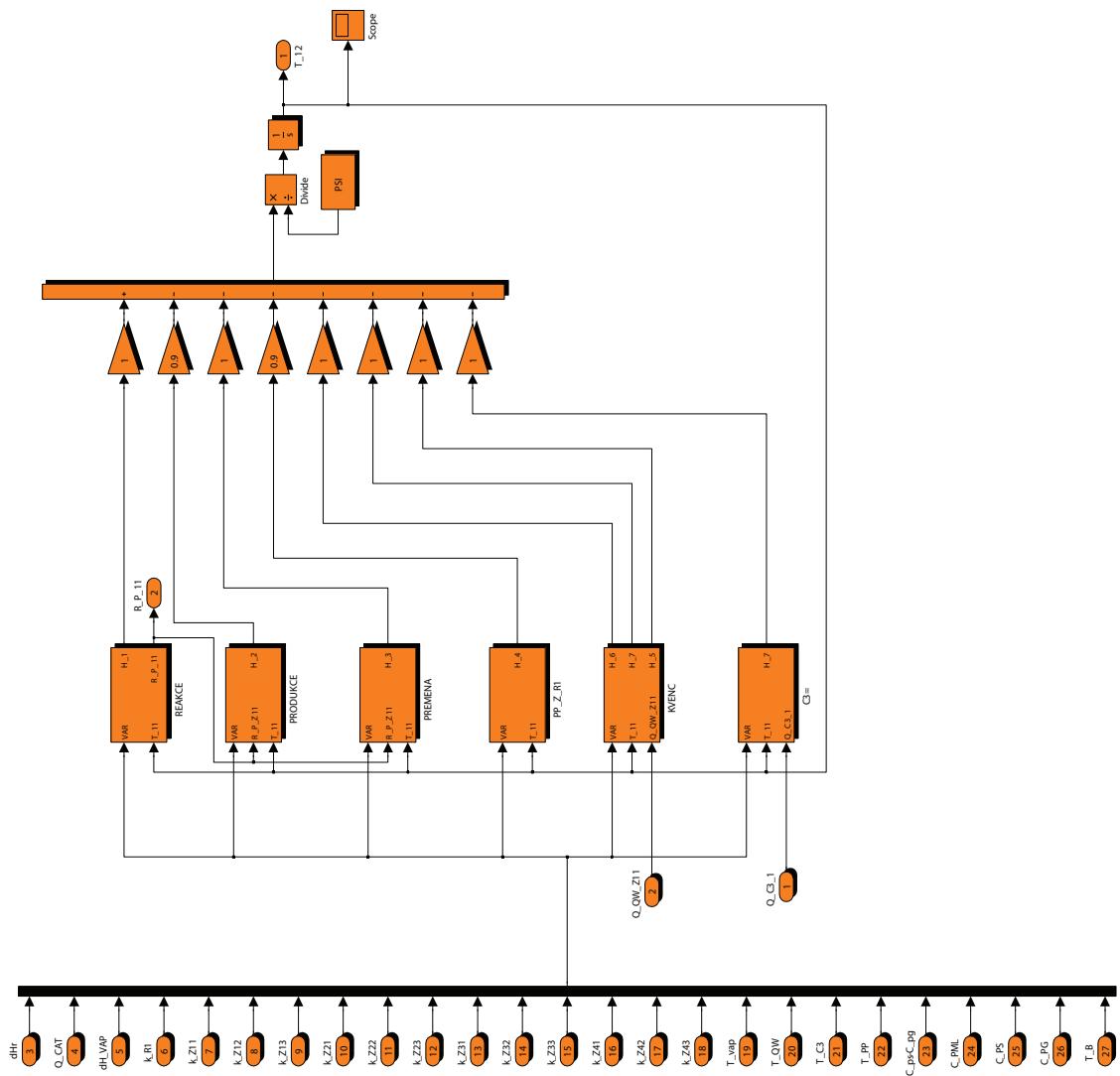
Obrázek A.2: Simulinkové zapojení bloku **VAR**



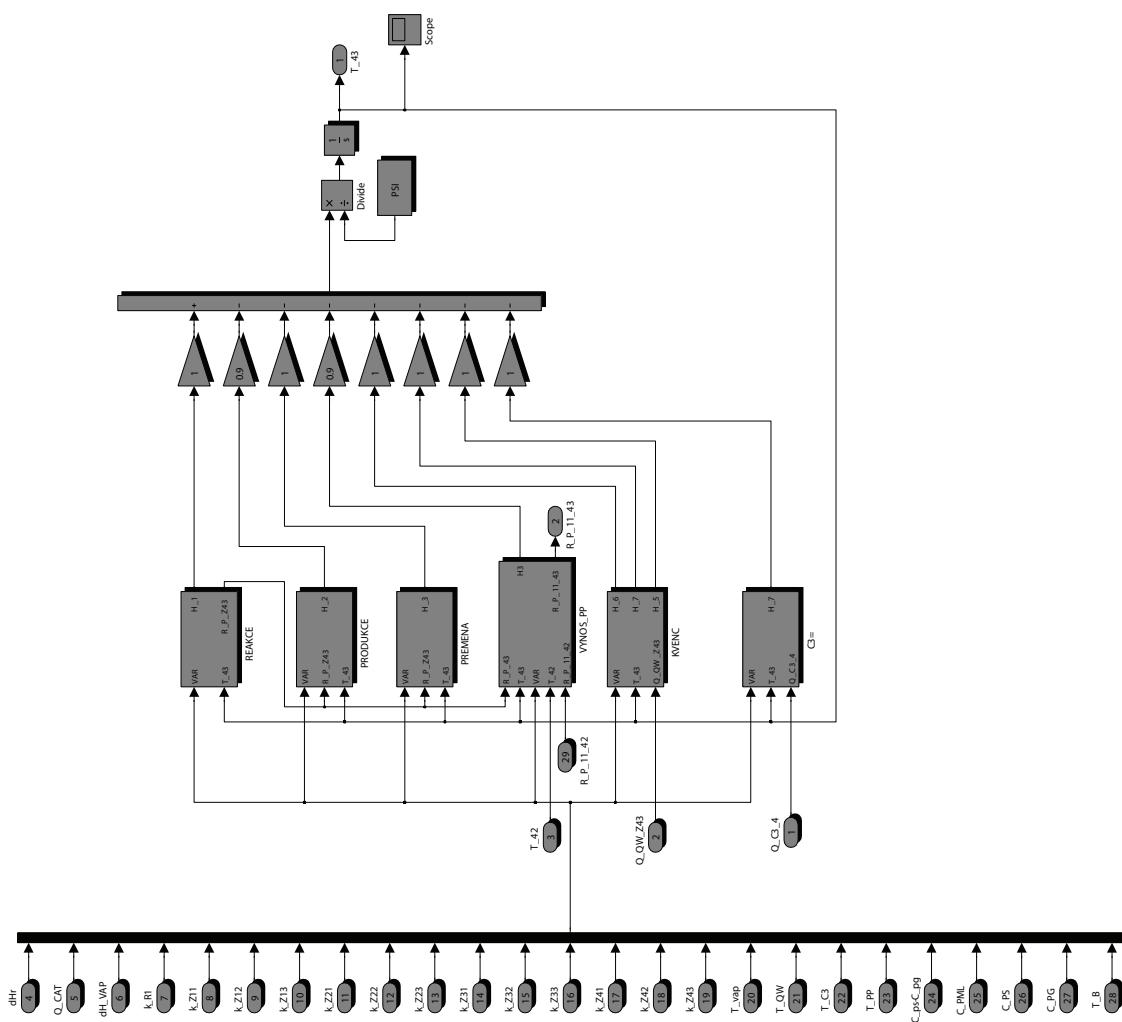
Obrázek A.3: Simulinkové zapojení zóny  $Z_1$

## PŘÍLOHA A. SIMULINKOVÁ SIMULAČNÍ SCHÉMATA ZAPOJENÍ

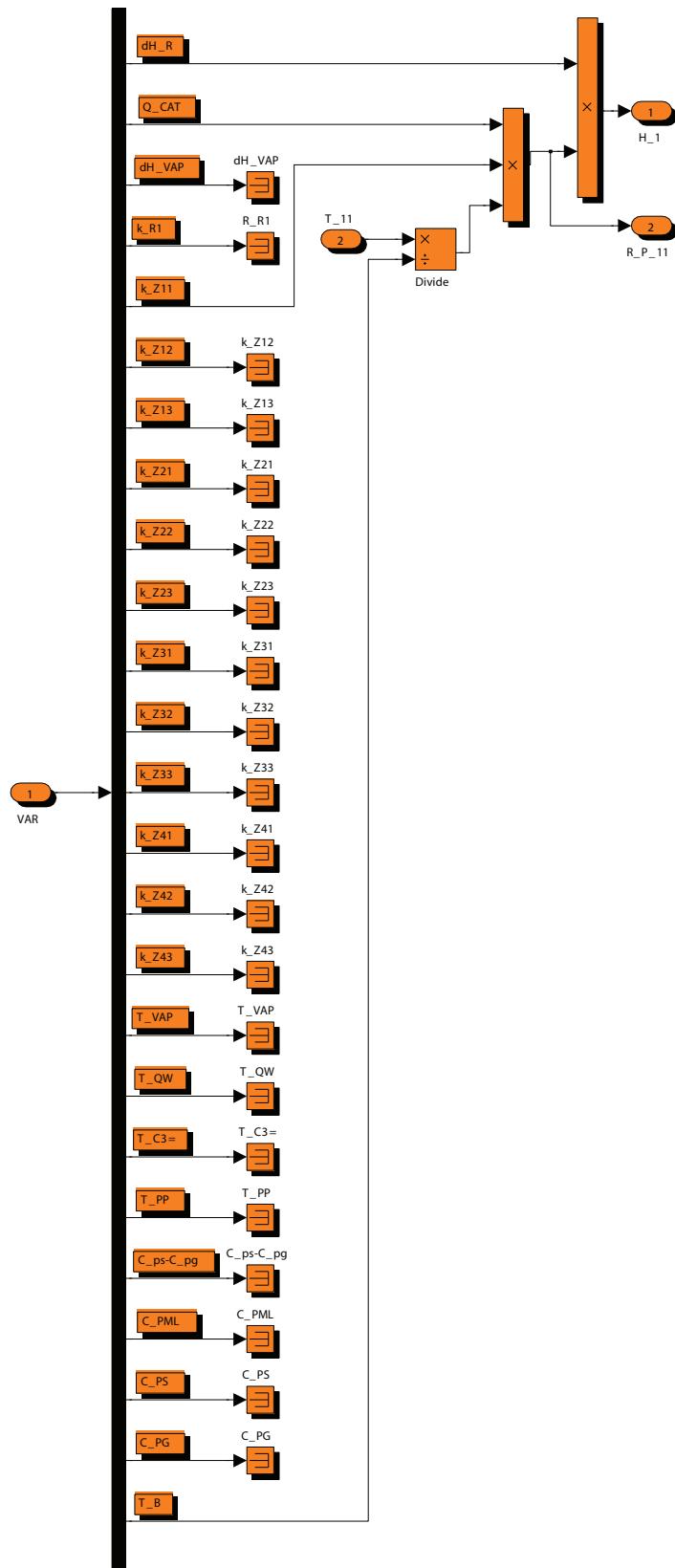
V

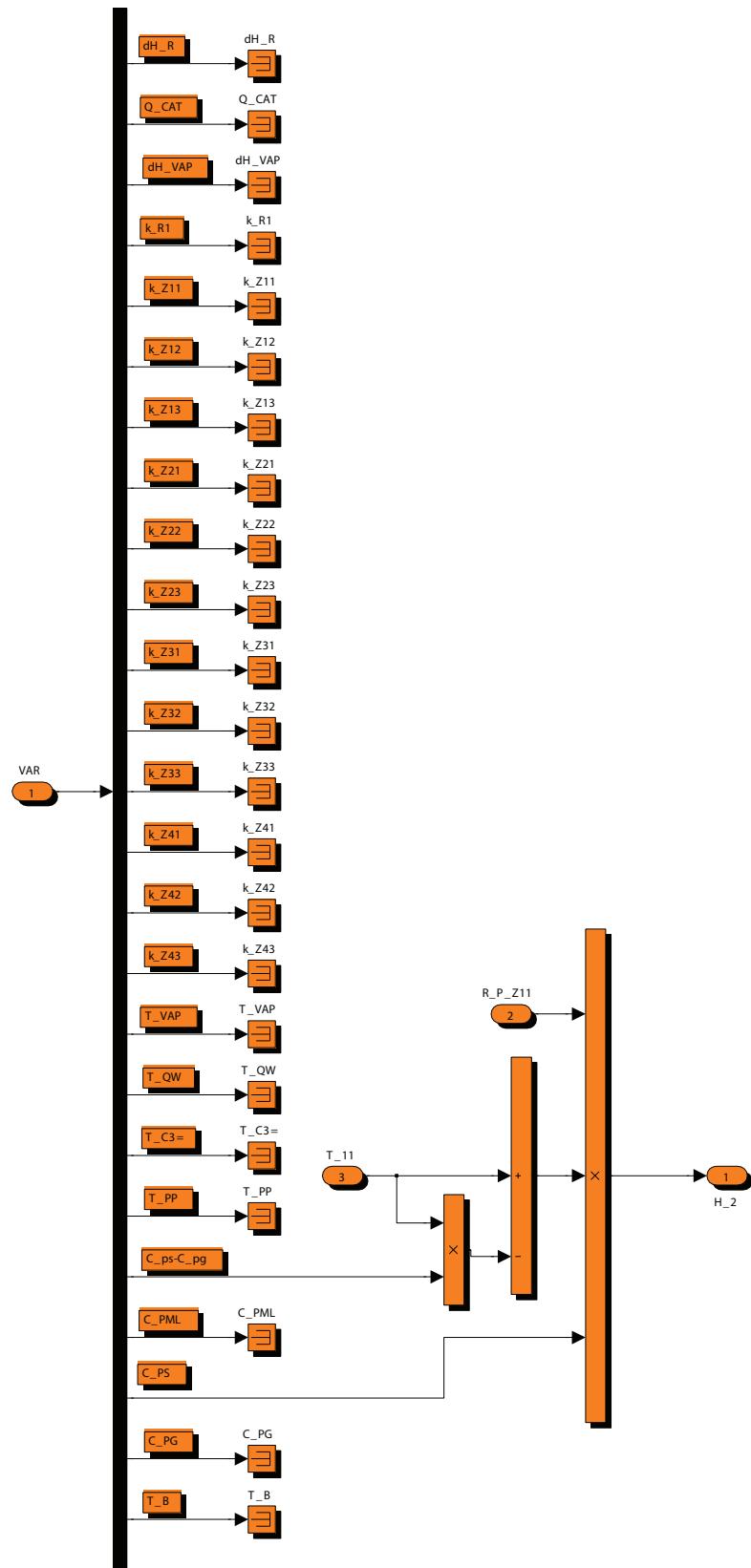


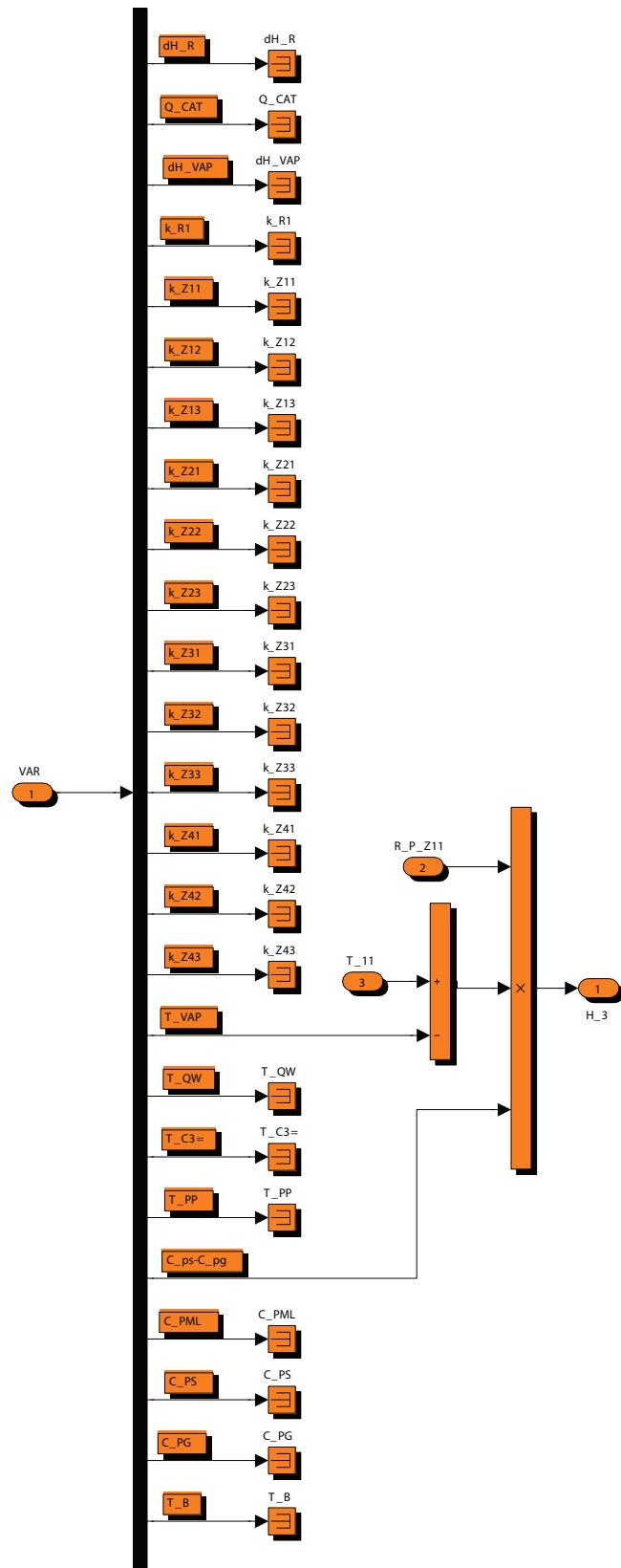
Obrázek A.4: Simulinkové zapojení subzóny  $Z_{11}$

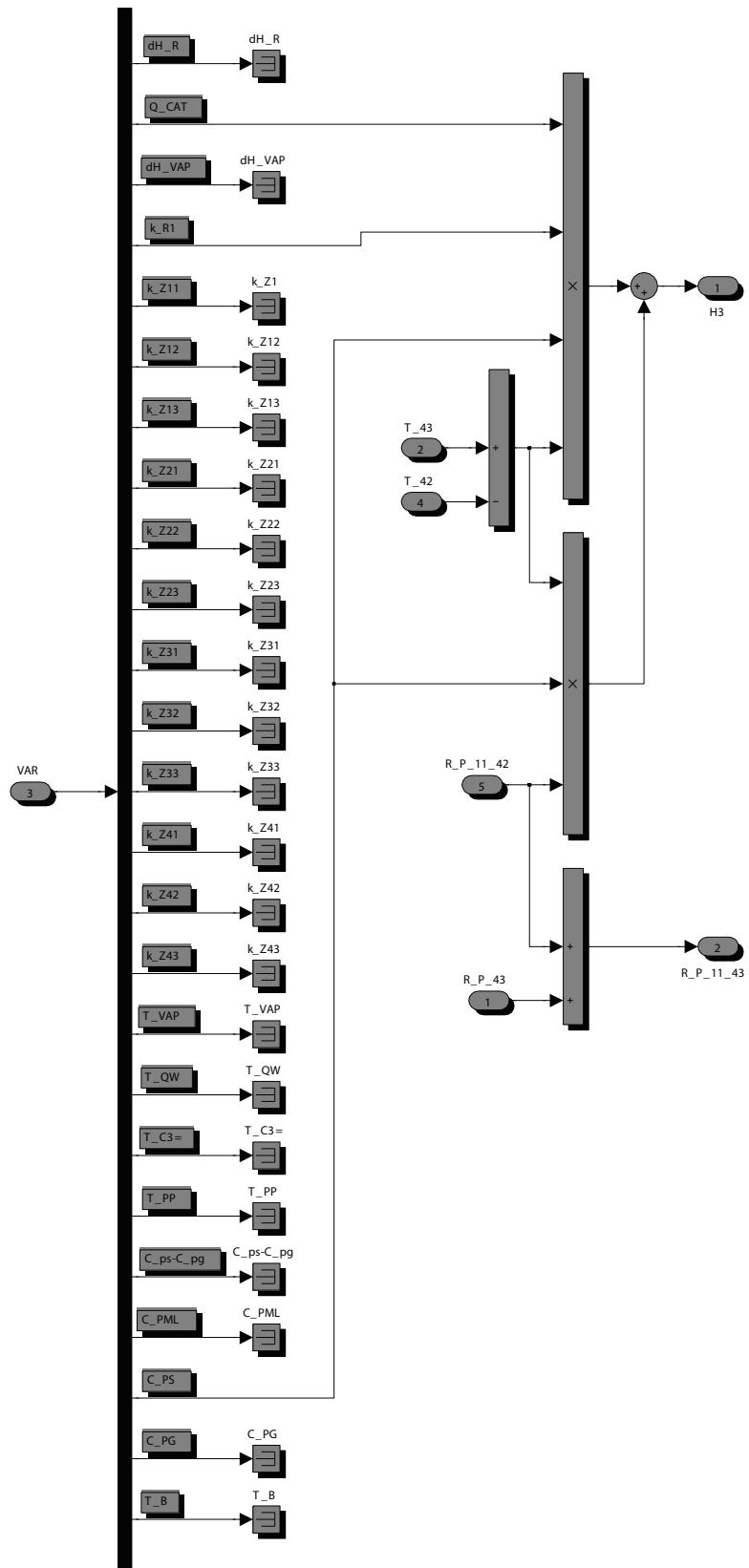


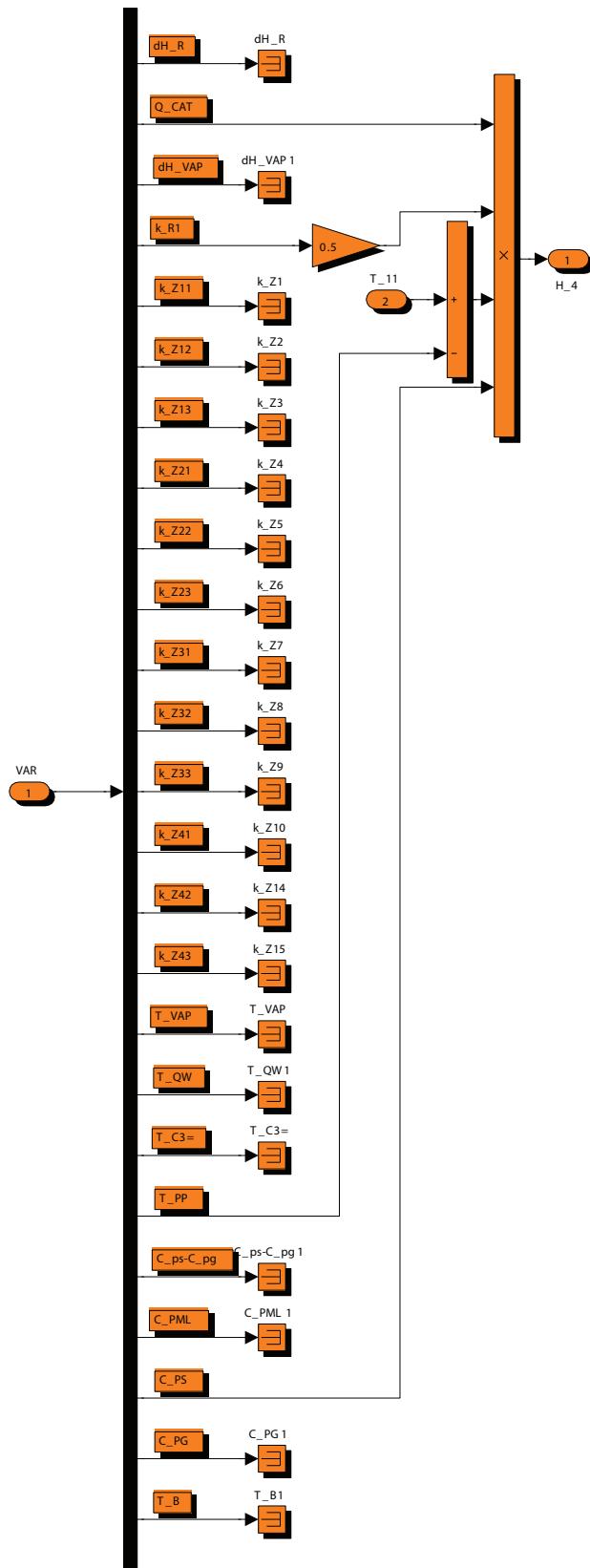
Obrázek A.5: Simulinkové zapojení subzóny  $Z_{43}$

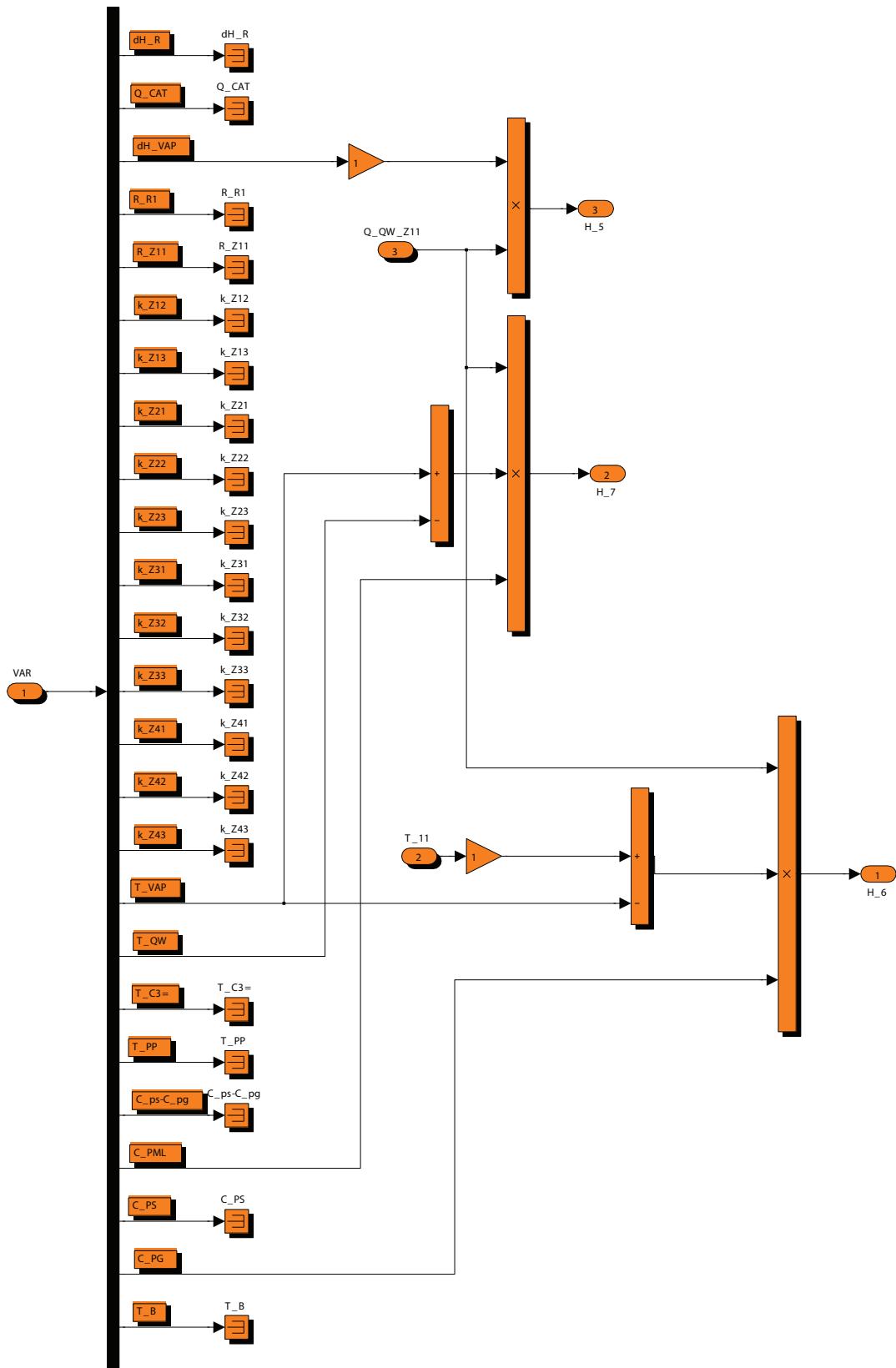
Obrázek A.6: Simulinkové zapojení bloku **REAKCE**, subzóna  $Z_{11}$

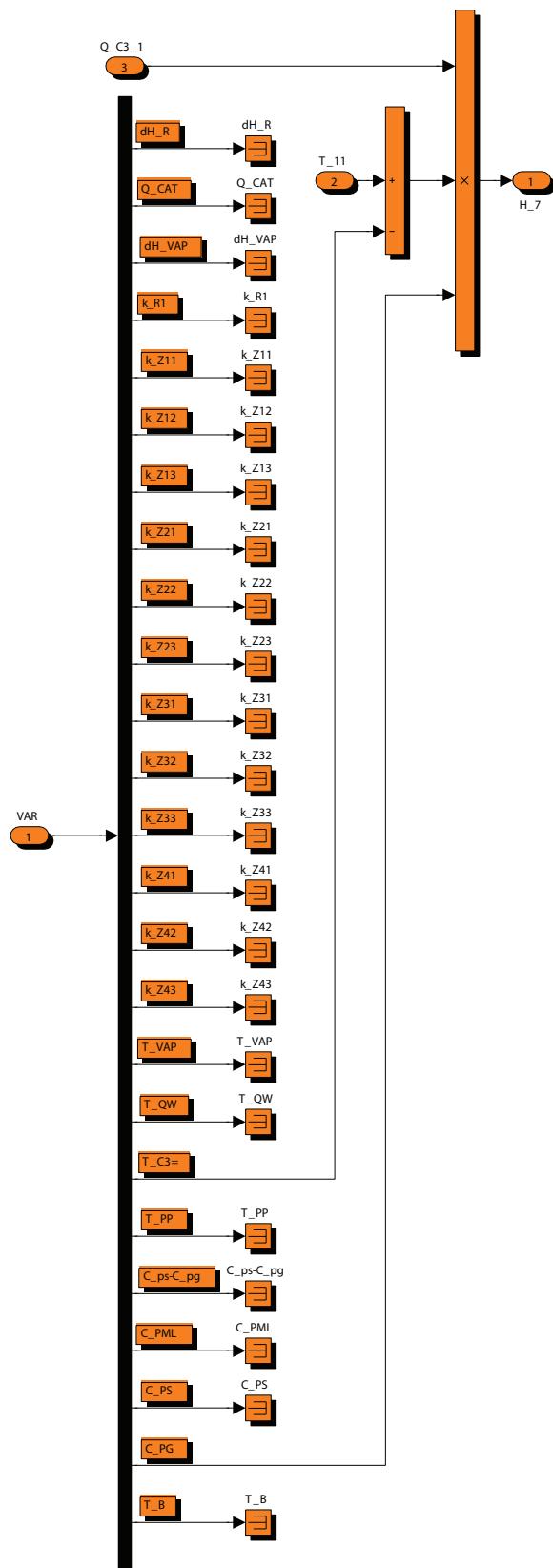
Obrázek A.7: Simulinkové zapojení bloku **PRODUKCE**, subzóna  $Z_{11}$

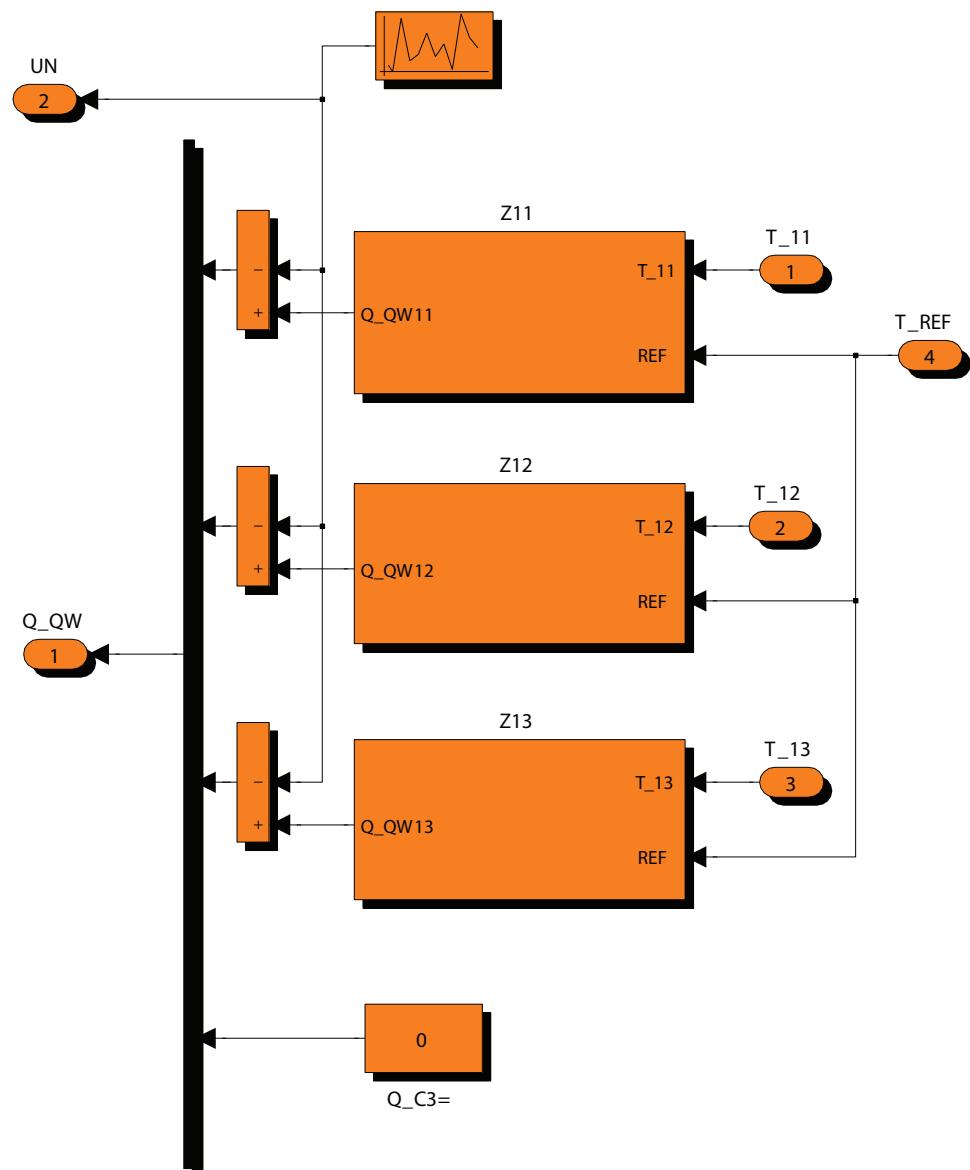
Obrázek A.8: Simulinkové zapojení bloku **PREMENA**, subzóna **Z11**

Obrázek A.9: Simulinkové zapojení bloku **VYNOS\_PP**, subzóna  $Z_{43}$

Obrázek A.10: Simulinkové zapojení bloku **PP\_Z\_R1**, subzóna **Z11**

Obrázek A.11: Simulinkové zapojení bloku KVENC, subzóna  $Z_{11}$

Obrázek A.12: Simulinkové zapojení bloku **C3=**, subzóna  $Z_{11}$



Obrázek A.13: Simulinkové zapojení bloku **FUZZY\_ZONA\_1**, subzóna  $Z_{11}$

# Příloha B

## Obsah přiloženého CD

Obsah adresáře : DP\_KOZOJED\_ALES\_2008

- DP\_KOZOJED\_ALES\_2008.pdf - Diplomová práce ve formátu PDF

Obsah adresáře : Fuzzy\_Regulatory

- PD11.fis - Navržený fuzzy PD regulátor pro subzónu  $Z_{11}$
- PD12.fis - Navržený fuzzy PD regulátor pro subzónu  $Z_{12}$
- PD13.fis - Navržený fuzzy PD regulátor pro subzónu  $Z_{13}$
- PD21.fis - Navržený fuzzy PD regulátor pro subzónu  $Z_{21}$
- PD22.fis - Navržený fuzzy PD regulátor pro subzónu  $Z_{22}$
- PD23.fis - Navržený fuzzy PD regulátor pro subzónu  $Z_{23}$
- PD31.fis - Navržený fuzzy PD regulátor pro subzónu  $Z_{31}$
- PD32.fis - Navržený fuzzy PD regulátor pro subzónu  $Z_{32}$
- PD33.fis - Navržený fuzzy PD regulátor pro subzónu  $Z_{33}$
- PD41.fis - Navržený fuzzy PD regulátor pro subzónu  $Z_{41}$
- PD42.fis - Navržený fuzzy PD regulátor pro subzónu  $Z_{42}$

- **PD43.fis** - Navržený fuzzy PD regulátor pro subzónu  $Z_{43}$
- **R2\_BASE\_CONST.m** - Základní konstanty nelineárního a lineárního modelu polymeračního reaktoru

#### Obsah adresáře : Mat\_Soubory

- **LTI.mat** - Linearizovaný model reaktoru
- **T\_STEP\_R.mat** - Datový soubor : odezva nelineárního regulovaného modelu na skokovou změnu poruchové veličiny, průběhy teplot
- **T\_STEP\_N.mat** - Datový soubor : odezva nelineárního neregulovaného modelu na skokovou změnu poruchové veličiny, průběhy teplot
- **QW\_STEP.mat** - Datový soubor : odezva nelineárního regulovaného modelu na skokovou změnu poruchové veličiny, akční zásahy
- **CAT\_STEP.mat** - Datový soubor : odezva nelineárního regulovaného modelu na skokovou změnu poruchové veličiny, průběh poruchové veličiny
- **T\_PULSE\_R.mat** - Datový soubor : odezva nelineárního regulovaného modelu na pulzní změnu poruchové veličiny, průběhy teplot
- **T\_PULSE\_N.mat** - Datový soubor : odezva nelineárního neregulovaného modelu na pulzní změnu poruchové veličiny, průběhy teplot
- **QW\_PULSE.mat** - Datový soubor : odezva nelineárního regulovaného modelu na pulzní změnu poruchové veličiny, akční zásahy
- **CAT\_PULSE.mat** - Datový soubor : odezva nelineárního regulovaného modelu na pulzní změnu poruchové veličiny, průběh poruchové veličiny
- **T RAND\_R.mat** - Datový soubor : odezva nelineárního regulovaného modelu na náhodně generovanou změnu poruchové veličiny, průběhy teplot
- **T RAND\_N.mat** - Datový soubor : odezva nelineárního neregulovaného modelu na náhodně generovanou změnu poruchové veličiny, průběhy teplot
- **QW RAND.mat** - Datový soubor : odezva nelineárního regulovaného modelu na náhodně generovanou změnu poruchové veličiny, akční zásahy

- **CAT\_RAND.mat** - Datový soubor : odezva nelineárního regulovaného modelu na náhodně generovanou změnu poruchové veličiny, průběh poruchové veličiny
- **T\_REF\_R.mat** - Datový soubor : odezva nelineárního regulovaného modelu na změnu referečních hodnot regulátorů, průběhy teplot
- **T\_REF\_N.mat** - Datový soubor : odezva nelineárního neregulovaného modelu na změnu referečních hodnot regulátorů, průběhy teplot
- **QW\_REF.mat** - Datový soubor : odezva nelineárního regulovaného modelu na změnu referečních hodnot regulátorů, akční zásahy
- **CAT\_REF.mat** - Datový soubor : odezva nelineárního regulovaného modelu na změnu referečních hodnot regulátorů, průběh poruchové veličiny
- **STEP\_PLOT.m** - Vykreslení odezvy nelineárního regulovaného a neregulovaného modelu na skokovou změnu poruchové veličiny
- **PULSE\_PLOT.m** - Vykreslení odezvy nelineárního regulovaného a neregulovaného modelu na pulzní změny poruchové veličiny
- **RAND\_PLOT.m** - Vykreslení odezvy nelineárního regulovaného a neregulovaného modelu na náhodně generovanou změnu poruchové veličiny
- **REF\_PLOT.m** - Vykreslení odezvy nelineárního regulovaného a neregulovaného modelu na změnu referečních hodnot regulátorů

### **Obsah adresáře : Simulinkove\_Modely**

- **LTI.mat** - Nelineární model použitý k získání modelu lineárního
- **R2\_STEP.mdl** - Nelineární regulovaný a neregulovaný model polymeračního reaktoru, odezva na skokovou změnu poruchové veličiny
- **R2\_PULSE.mdl** - Nelineární regulovaný a neregulovaný model polymeračního reaktoru, odezva na pulzní změnu poruchové veličiny
- **R2\_RAND.mdl** - Nelineární regulovaný a neregulovaný model polymeračního reaktoru, odezva na náhodně generovanou změnu poruchové veličiny

# Příloha C

## Seznam použitého softwaru

- Veškeré výpočty byli prováděny v programu **Matlab 2007b**, [⟨http://www.mathworks.com⟩](http://www.mathworks.com)
- Veškeré simulace byli prováděny v prostředí **Simulink**, který je součástí programu **Matlab**
- Návrh a implementace fuzzy regulátorů byl provedena prostřednictvím **Fuzzy Logic Toolboxu**, který je součástí programu **Matlab**
- Práce byla napsána v publikačním systému **L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X**⟨<http://en.wikipedia.org/wiki/LaTeX>⟩, s použitím program **TeXnicCenter**, [⟨http://www.texniccenter.org/⟩](http://www.texniccenter.org/)