

## 36

## Anwendungsorientierte Prozeßmodellierung und -simulation bei der Entwicklung eines Suspensions-Polymerisationsverfahrens

W. WOLF (Vortragender), DR. K.-H. HENKEL,  
DR. K. DAMERT, L. TEICHERT

BSL Olefinverbund GmbH, D-06202 Schkopau.

Die Anwendung der mathematischen Prozeßmodellierung bietet besonders dann Vorteile, wenn das Prozeßmodell die zu bearbeitenden praktischen Aufgabenstellungen bereits hinreichend berücksichtigt. Spezielle Anforderungen bei der Entwicklung eines Suspensions-Polymerisationsverfahrens bestehen z. B. in

- Auslegung des Reaktors, Gestaltung der Heiz- bzw. Kühlanlagen,
- Regelung der Reaktorinnentemperatur während der Polymerisation und
- Auslegung des Verfahrens unter sicherheitstechnischen Gesichtspunkten.

Die Prozeßsimulation für das betrachtete Suspensions-Polymerisationsverfahren wird mit Hilfe eines dynamischen Modells für den Ablauf einer chemischen Reaktion in einem Rührkessel mit Mantelheizung bzw. -kühlung durchgeführt. Dieses besteht entsprechend der konkreten Prozeßbedingungen und o. g. Anforderungen aus folgenden Hauptbausteinen:

- Bilanzgleichungen für Monomer, Polymerisat, Aktivatoren und Wärme,
- Gleichungen zur Berechnung des Reaktorinnendrucks,
- Bilanzierung der äußeren Wärmeübertragung am Kessel (Heiz- und Kühlkreisläufe),
- Regelung der Reaktorinnentemperatur und
- Algorithmen zur Simulation von Gegenmaßnahmen bei Havariezuständen während der Reaktion (z. B. Wasserzulauf und gleichzeitige Suspensionsentnahme bei Rührerausfall).

Die mathematische Formulierung des Prozeßsimulationsmodells hat die Gestalt eines Anfangswertproblems für ein System von 20 Differentialgleichungen. Besonders bei Beginn der Regelung, am Anfang der Abkühlung und beim Eingriff bei Havariesituationen ergeben sich wegen auftretender Steifheit des Differentialgleichungssystems erhöhte Anforderungen an den numerischen Lösungsalgorithmus.

Die Regelung erfolgt mit Hilfe eines Heuristischen Prädiktiv-Reglers (HPR). Ein programmtechnisches Problem besteht für die Simulation in der Ansprechzeit auf das Reglersignal (Reglertotzeit, Ventildynamik, Reaktionszeit des Kühlmittelstroms nach Änderungen von Ventilstellungen u. a.)

Für diese Zielstellungen der Prozeßsimulation wurden mit Hilfe des Modells praktisch wertvolle Ergebnisse erzielt. Beispiele für solche Ergebnisse sind:

- Apparate werden kostengünstig ausgelegt durch die Optimierung von Prozeßparametern wie Druck und Temperatur.
- Die Kosten des Kühlungsaufwandes werden minimiert durch optimale Einstellung des Verhältnisses von Kühlzeit (Zykluszeit) und Kühlwasseraufwand sowie weitgehender Abschätzung des maximalen Kühlungsaufwandes im Störfungsfall.

- Die Reglerparameter für den praktischen Betrieb (Verkürzung des Probetriebs) werden vorgegeben. Der Vergleich verschiedener Varianten zur Reglersimulation weisen den installierten HPR-Regler als robuste Alternative zu einem praktisch aufwendig einstellbaren konventionellen PID-Regler aus.
- Abschätzung der notwendigen sicherheitstechnischen Verfahrensanforderungen. Die mathematische Modellierung gestattet Vorhersagen zum Ablauf möglicher Störfälle im Reaktorbetrieb bei Havarien und die Einschätzung des Gefährdungspotentials zu verschiedenen Zeitpunkten des Reaktionsablaufs. Die gerechneten Simulationsvarianten sind Voraussetzung für die Einleitung entsprechender Gegenmaßnahmen und eines kostengünstigen Sicherheitssystems insgesamt.

Die durchgeführten Simulationsstudien zeigen deutlich die Vorteile, die mit der Prozeßmodellierung als Hilfestellung bei der praktischen Verfahrensauslegung geboten sind, weiter die Relevanz der berechneten Ergebnisse für die praktische Prozeßführung.

Für den untersuchten Polymerisationsprozeß hat sich die mathematische Prozeßmodellierung als wichtiges Werkzeug bei der Verfahrensgestaltung, vor allem für die Verminderung der Risiken durch die Beherrschung von Havariesituationen, als wesentliche Entscheidungshilfe bei der Auswahl kostengünstiger Auslegungsvarianten und als Voraussetzung für eine optimale Parametrierung der Regler erwiesen.

Im Vortrag wird das dynamische Verhalten des Polymerisationsprozesses im praktischen Reaktorbetrieb mit den Simulationsergebnissen verglichen.

## 37

## Modellgestützte Entwicklung einer zeitoptimalen Produktwechselstrategie für Rektifikationskolonnen

DIPL.-ING. M. FLENDER (Vortragender),  
PROF. DR.-ING. G. WOZNY

Technische Universität Berlin, Institut für Prozeß- und Anlagentechnik, D-10623 Berlin,

DR.-ING. G. FIEG

Henkel KGaA, D-40191 Düsseldorf.

Produktwechselvorgänge an Rektifikationskolonnen stellen in der Regel unproduktive Zeiträume dar, welche es zu minimieren gilt. Bisher werden in der industriellen Praxis häufig zu Beginn des Produktwechselvorgangs alle relevanten Prozeßgrößen auf die des neuen stationären Zustands eingestellt. Gegenüber dieser, als konventionelle Strategie bezeichnete Vorgehensweise, bringt die in der Vergangenheit entwickelte zweischrittige Strategie (modifizierte Strategie) eine Zeitersparnis von bis zu 70 %, auf den gesamten Produktwechselvorgang bezogen. Die modifizierte Strategie besteht aus folgenden Teilschritten. Zu Beginn des Produktwechsels werden alle relevanten Prozeßgrößen auf den Wert des neuen stationären Zustands eingestellt, mit Ausnahme des Rücklaufverhältnisses. Dieses wird auf Null oder unendlich eingestellt.