

Doktori (PhD) értekezés tézisei

Reaktorelfutási kritériumok fejlesztése és alkalmazása

Kummer Alex

Pannon Egyetem

Vegyésmérnöki és Anyagtudományok

Doktori Iskola

Témavezetők:

Dr. Varga Tamás



Folyamatmérnöki Intézeti Tanszék

Veszprém

2020.

1 Bevezetés és célok

A reaktorelfutás legsúlyosabb következménye (ami a reaktor felrobbanása) mutatja, hogy a vegyiparban dolgozó folyamatmérnököknek részletes és mély tudással kell rendelkezniük erről a jelenségről. Számtalan halálesettel járó baleset történt a közelmúltban a reaktorelfutásnak köszönhetően. Az utolsó általam ismert eset 2012-ben történt, amikor egy polimerizációs reaktor robbant fel. A motivációmát tekintve mély és biztos tudást szeretnék szerezni a termikus biztonság területén, valamint megbízható módszereket szeretnék kidolgozni a reaktorok biztonságos üzemeltetésére.

A reaktorelfutás témakörét részleteiben tanulmányoztam és bemutatok egy összefoglalót a témakörrel a következő területeket tárgyalva: lehetséges okok és okozatok, prevenciós lépések és termikus kockázati módszerek, korai előrejelző rendszerek. Az úgynevezett reaktorelfutási kritériumok alkalmazhatók az elfutás bekövetkezésének előre jelzésére, amelyek mögött lévő elméleteket részletesen bemutatom. Szintén tárgyalom a különböző beavatkozó eszközöket/biztonsági elemeket a következmények moderálására.

Az irodalomban található elfutási kritériumok részletes analízisével sikerült levezetnem két új reaktorelfutási kritériumot (Modified Slope Condition – MSC, Modified Dynamic Condition – MDC). A reaktorelfutási kritériumok a reaktorrendszer különböző állapotait vizsgálva eldöntik, hogy fennáll-e elfutás veszély, vagy sem, azonban a különböző kritériumok különböző állapotokat tekinthetnek veszélyesnek. Következésképpen lesznek fals és korrekt jelzéseink, azonban nincs konkrét és pontos definíció az elfutásos és nem elfutásos állapotok megkülönböztetésére. Két fő elvárásunk van a kritériumokkal szemben, mégpedig hogy minél korábban és minél megbízhatóbban tegyék meg a jelzésüket. A két új elfutási kritériumot egy általam definiált szempontrendszerben összehasonlítottam az irodalmi kritériumokkal, és a vizsgált esettanulmányokon az általam kidolgozott MDC kritérium bizonyult a legmegbízhatóbbnak.

A bemutatott elfutási kritériumok a különböző reaktorállapotok alapján döntenek el, hogy van-e elfutás veszély, vagy nincs, és nem vesznek figyelembe semmilyen rendszer specifikációt (például a maximálisan megengedett hőmérséklet). Genetikus programozás alkalmazásával rendszer specifikus összefüggéseket identifikáltam. Ebben a feladatkörben két szempont alapján fejlesztettem ezeket az összefüggéseket, még pedig hogy maximalizáljam a megbízhatóságot és minimalizáljam a jelzési időt.

Az elfutási kritériumok további vizsgálata céljából néhány irodalmi elfutási kritériumot (Inflexiós pont kritérium, Van Heerden kritérium, Strozzi-Zaldivar kritérium, stb.) felhasználtam rátáplálásos reaktorok optimális rátáplálási trajektóriájának meghatározására offline és online környezetben. Modell prediktív szabályozót (MPC) alkalmaztam a reaktor irányítására, ahol a paraméterbizonytalanságot is figyelembe vettem. MPC alkalmazása esetén kulcs fontosságú, hogy a predikciós horizont hosszát megfelelően válasszuk meg, mivel ha nem látjuk az elfutás bekövetkezését, akkor elkerülni sem tudjuk annak bekövetkezését. Módszert dolgoztam ki a predikciós horizont minimális hosszának meghatározására, amely időhosszat kritikus folyamatbiztonsági időnek hívok. A paraméter bizonytalanság kezelésére összehasonlítottam a többfokozatú NMPC-t (Multi-Stage NMPC) és a legrosszabb eset NMPC-t. Tanulmányaim alapján a legrosszabb eset NMPC megvalósítható, mivel az iterációnkénti számítási idő kisebb, mint az MPC mintavételezési ideje.

2 Tézisek

Tézis #1. Két új elfutási kritériumot dolgoztam ki, amelyek teljesítménye az irodalmi kritériumokkal összemérhető. Az általam javasolt „Modified Dynamic Condition” összefüggés megbízhatósága volt a legmagasabb a vizsgált esettanulmányokon, mindamellett a jelzési időben is középmezőnyben teljesít.

- Kidolgoztam a „Modified Slope Condition” és „Modified Dynamic Condition” kritériumokat az irodalmi összefüggések szisztematikus vizsgálata alapján.
- Az elfutási kritériumok megbízhatóság vizsgálatára a tévesztési mátrixot javasoltam, ahol egy-egy reaktor üzemeltetés elfutottnak tekinthető, ha az alkalmazott kritériumok több mint fele elfutást indikál.
- Az elfutási kritériumokat általános esettanulmányokon vizsgáltam, melyek paraméterkészlete a valós gyakorlatban előforduló anyagi rendszerekre jellemző értékeket tartalmaz.

Kapcsolódó publikáció: 1

Tézis #2. Reaktor elfutás bekövetkezésének megbízható jelzésére rendszer-specifikus kritikus összefüggéseket dolgoztam ki genetikus programozással.

- Reaktorelfutási kritériumok nem veszik figyelembe a különböző rendszer specifikációkat (mint például a maximális reakcióhőmérséklet), így olyan esetekben is jeleznek, amikor a reaktorelfutás nem okoz problémát, ezért olyan összefüggéseket határoztam meg, amelyek alkalmasak ezek figyelembe vételére.
- Olyan kritikus összefüggések meghatározásának menetére tettem javaslatot, amelyek figyelembe veszik a maximálisan megengedett hőmérsékletet.
- Új kritikus összefüggéseket definiáltam szakaszos és folyamatos üstreaktor esetén úgy, hogy azok minél nagyobb megbízhatósággal és minél korábban jelezzék az elfutás bekövetkezését.

- A javasolt kritikus összefüggések teljesítettek a legjobban a vizsgált irodalmi kritériumokhoz képest.

Kapcsolódó publikációk: 2, 8, 9

Tézis #3. Meghatároztam az irodalomban gyakran vizsgált elfutási kritériumok sorrendjét azok konzervatív volta alapján.

- Az elfutási kritériumokat, mint nem lineáris korlátozó feltétel alkalmaztam egy valós rátáplálásos reaktor, optimális rátáplálási stratégiájának meghatározása során.
- Az elért konverziók és szelektivitások alapján rangsoroltam a vizsgált elfutási kritériumokat konzervatív szempontból.

Kapcsolódó publikációk: 1, 3

Tézis #4. Rátáplálásos reaktorok irányítására kidolgoztam egy irányítási struktúrát modell prediktív szabályozó és elfutási kritérium együttes alkalmazásával.

- Az alkalmazott kritériummal a reagáltatást alacsonyabb hőmérsékletről is biztonságosan el lehet indítani alacsonyabb energiafogyasztást eredményezve.
- Kidolgoztam egy módszert a minimális predikciós horizont meghatározására, ahol a legrosszabb esetet feltételezve kell vizsgálni a folyamatbiztonsági időket.

Kapcsolódó publikáció: 4

Tézis #5. A Tézis #4-ben javasolt irányítási struktúrát kibővítettem a modell bizonytalanságok kezelésére.

- A paraméterbizonytalanság kezelésére alkalmas módszer, ha az optimalizálás során mindig a legrosszabb esetet feltételezzük és az időben előre haladva, frissítjük a bizonytalan paraméterek értékeit az új információk alapján.
- Igazoltam, hogy a bizonytalan paraméterekkel bővített kiterjesztett Kalman-szűrőt alkalmazva az állapotbecslés pontossága növelhető.
- Szimulációs vizsgálatokkal alátámasztottam, hogy a javasolt struktúra megfelelő rátáplálásos reaktorok irányítására.

Kapcsolódó publikációk: 5, 7

3 Eredmények hasznosítása és jövőbeli célok

Az elfutási kritériumok részletes vizsgálatát követően elmondható, hogy nincs legjobb vagy legrosszabb összefüggés, mindegyiknek megvan a maga igaza. A két általam újonnan kidolgozott kritérium (Modified Slope and Dynamic Condition) alkalmasak az elfutás jelzésére, és ezek alapján különböző biztonsági lépéseket életbe lehet léptetni. Az általam javasolt genetikus programozáson alapuló módszerrel rendszer specifikus kritikus összefüggéseket lehet identifikálni, amelyek nagyobb megbízhatósággal és korán jeleznek elfutás veszélyt.

Ahogy bemutattam, reaktorelfutási kritériumok alkalmasak arra, hogy a reaktorüzemeltetés biztonságát növeljék, valamint a reaktorok tervezési lépéseiben is felhasználhatóak. Bemutattam, hogy elfutási kritériumok online alkalmazása is megvalósítható, amely segíti a nem kívánatos és veszélyes események bekövetkezésének elkerülését.

Az eredmények azt mutatják, hogy már lehetne alkalmazni az összefüggéseket ipari környezetben is a jelenleg is üzemelő biztonsági rendszerek és szempontok mellett, így a kritériumok alkalmazhatóságát tovább lehetne tesztelni. A jövőben a kritériumok alkalmazásával az esetleges túlbiztosításokat csökkenteni lehet a jobb kihasználtság érdekében, de ehhez még számtalan laboratóriumi és pilot tesztet kell elvégezni.

4 Tézishez kapcsolódó publikációk

Cikkek nemzetközi folyóiratban

1. Kummer and T. Varga, “Completion of thermal runaway criteria: Two new criteria to define runaway limits” *Chemical Engineering Science*, vol. 196, pp. 277–290, Mar. 2019, doi: 10.1016/j.ces.2018.11.008.

Scimago Journal Ranking: Q1, Impact factor: 3.871

2. Kummer, T. Varga, and J. Abonyi, “Genetic programming-based development of thermal runaway criteria” *Computers & Chemical Engineering*, p. 106582, Sep. 2019, doi: 10.1016/j.compchemeng.2019.106582.

Scimago Journal Ranking: Q1, Impact factor: 4.000

3. Kummer and T. Varga, “Feeding trajectory optimization in fed-batch reactor with highly exothermic reactions” *Computers & Chemical Engineering*, vol. 98, pp. 1–11, Mar. 2017, doi: 10.1016/j.compchemeng.2016.12.008.

Scimago Journal Ranking: Q1, Impact factor: 3.334

4. Kummer, T. Varga, and L. Nagy, “Semi-batch reactor control with NMPC avoiding thermal runaway” *Computers & Chemical Engineering*, vol. 134, p. 106694, Mar. 2020, doi: 10.1016/j.compchemeng.2019.106694.

Scimago Journal Ranking: Q1, Impact factor: 4.000

5. Kummer, L. Nagy, and T. Varga, “NMPC-based control scheme for a semi-batch reactor under parameter uncertainty” *Computers & Chemical Engineering*, p. 106998, Jun. 2020, doi: 10.1016/j.compchemeng.2020.106998.

Scimago Journal Ranking: Q1, Impact factor: 4.000

6. Kummer and T. Varga, “What do we know about thermal runaway? – A review”, Submitted to the *Journal of Process*

Safety and Environmental Protection, vol. 147, pp.460-476, Mar. 2021, doi: 10.1016/j.psep.2020.09.059.

Scimago Journal Ranking: Q1, Impact factor: 4.966

Cikkek konferencia kiadványban

7. Kummer, L. Nagy, T. Varga, „ NMPC based temperature control in fed-batch reactor to avoid thermal runaway“, *Computer Aided Chemical Engineering*, 2020, doi: 10.1016/B978-0-12-823377-1.50182-8

Konferencia kivonatok

8. Kummer, T. Varga, J. Abonyi, “Genetic Programming based identification of reactor runaway criteria”, *Műszaki Kémiai Napok 2019: Chemical Engineering Conference 2019*, Veszprém, Hungary, A. Balogh, M. Klein, Eds.; University of Pannonia, pp. 58
9. Kummer, T. Varga, J. Abonyi, “Reaktorelfutási kritérium identifikálása genetikus programozással”, *Pannon Tudományos Nap*, 2019.10.16, Nagykanizsa

Tézisekhez nem kapcsolódó publikációk

Cikkek nemzetközi folyóiratban

1. Kummer and T. Varga, “Process simulator assisted framework to support process safety analysis” *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, vol. 58, pp. 22–29, Mar. 2019, doi: 10.1016/j.jlp.2019.01.007.

Scimago Journal Ranking: Q1, Impact factor: 2.473

2. Kummer and T. Varga, “Dynamic process simulator assisted optimization of operating point transition” *Chemical Engineering Transactions*, pp. 565–570, 2018008, doi: 10.3303/CET1870095.

Scimago Journal Ranking: Q3

Cikkek konferencia kiadványban

3. Kummer and T. Varga, “Dynamic process simulation based process malfunction analysis” in *Computer Aided Chemical Engineering*, vol. 43, Elsevier, 2018, pp. 1147–1152.
4. Kummer, T. Varga, , “Development of dynamic process simulator: Phenol production from cumene”, *Műszaki Kémiai Napok 2017, Chemical Engineering Conference 2017*, Veszprém, Hungary, J. Abonyi, A. Balogh, M. Klein, Eds.; University of Pannonia, pp. 17-22