

## CAT-SAVE

Erforschen einer Softsensorik-Methode zur punktgenauen zeitlichen und örtlichen Vorhersage von Reaktorzuständen

<b>Programm / Ausschreibung</b>	Produktion der Zukunft, Produktion der Zukunft, 24. AS PdZ nationale Projekte 2017	<b>Status</b>	abgeschlossen
<b>Projektstart</b>	01.01.2018	<b>Projektende</b>	30.06.2019
<b>Zeitraum</b>	2018 - 2019	<b>Projektlaufzeit</b>	18 Monate
<b>Keywords</b>	Prozess- und Produktqualitätssicherung; Softsensorik; thermodynamische Modelle		

### Projektbeschreibung

Die Erforschung einer neuartigen Softsensorik für chemische Reaktoren auf Basis thermodynamischer Modelle eröffnet bisher nicht verfügbare Optimierungsmöglichkeiten in chemischen Produktionsprozessen und ist Ausgangspunkt des Projektes. Die Problemstellung in CAT-SAVE ist, dass im Inneren kontinuierlicher chemischer Reaktoren, bei denen während der Reaktion Phasenübergänge stattfinden, thermodynamische Zustände sowie Zusammensetzungen des Prozessstroms derart starken örtlichen und zeitlichen Veränderungen unterliegen, dass es aktuell nicht möglich ist, die Zustände innerhalb des chemischen Reaktors auf Basis von messbaren Ein- und Austrittsbedingungen über Softsensorik zu erfassen. Dies birgt ein erhebliches Risiko hinsichtlich Produktqualität und Prozesssicherheit. Insbesondere exotherme Prozesse weisen im Inneren eines Reaktors oft Temperaturspitzen auf, welche Katalysatoren und Bauteile zerstören bzw. in ihrer Standzeit negativ beeinflussen. Es bedarf daher eines neuen Ansatzes für die Prozessindustrie im Bereich Softsensorik, der es ermöglicht, aufgrund exakter thermodynamischer Modelle punktgenau (örtlich und zeitlich) den Reaktionsfortschritt im Apparat vorherzusagen. Da es sich in der chemischen Produktionstechnik oft um Multikomponentengemische mit bis zu mehr als hundert Einzelkomponenten handelt, stellt sich die Modellierung für die Softsensorik innerhalb des Reaktors sehr komplex dar, da mit dem Reaktionsfortschritt auch die Phasengleichgewichte des Multikomponentengemisches modelliert werden müssen. Daran angelagert ergibt sich folgende Zielsetzung:

- Im Projekt CAT-SAVE soll anhand eines realen Chemiereaktors einer petrochemischen Produktionsanlage eine Softsensorik-Methode erforscht werden, welche es erlaubt, Druck, Temperatur, Phasenzustände und Zusammensetzungen eines Prozessstroms im Inneren eines Mehrphasen-Reaktors zeitlich und örtlich punktgenau vorzuberechnen. Die dafür notwendige reale Prozesssensorik liefert lediglich die Prozessparameter der Ein- und Ausgangsströme.
- Echtzeitvisualisierung der Schlüsselparameter
- Destruktive Temperaturspitzen sowie ungewollte Nebenproduktbildungen sollen dadurch vermieden werden
- Anlagendurchsätze sollen exakt unter Einbeziehung von Materialstandzeiten und Katalysatorlebenszyklen optimiert werden
- Dadurch soll eine Steigerung des durchsatzbezogenen Katalysatorlebenszyklus um bis zu 10% in der Referenzanlage erfolgen
- Die Methode soll höchste Reproduzierbarkeit in andere Prozesse aufweisen.

Geplante Ergebnisse: Simulationsmodell der Kondensatoreinheit der Referenzanlage und Algorithmus zur Ermittlung der

Wandtemperatur; Möglichst realitätsnahes Simulationsmodell; Implementierung der Schnittstelle zwischen Prozessdatenbank und CAT-SAVE-Modell und Simulation der Anwendung im realen Betriebsparametern; Wertekriterien der Leistungsstandards;

## **Abstract**

The research of a novel system for chemical reactors based on thermodynamic models opens up unavailable possibilities for the optimization in chemical production processes and is the starting point of the project. The problem in CAT-SAVE is that in the interior of continuous chemical reactors, in which transitions occur during the reaction, thermodynamic conditions as well as compositions of the process stream are subject to such strong local and temporal changes, that it is currently not possible to determine the states within the chemical reactor on the basis of measurable entry and exit conditions via software sensors. This poses a considerable risk with regard to product quality and process reliability. In particular, exothermic processes often have temperature peaks inside a reactor, which destroy catalysts and components or adversely affect their service life. Therefore, a new approach is required for the process industry in the area of sensor technology, which makes it possible, on the basis of exact thermodynamic models, to predict the progress of the reaction in the plant. Since the chemical production technique is often a multicomponent mixture with up to more than a hundred individual components, the modelling for the sensor system within the reactor is very complex, since the phase equilibria of the multicomponent mixture must also be modelled with the reaction progress. Based on this problem the following objectives arise:

- In the project CAT-SAVE a sensor-based method should be investigated with the help of a real chemical reactor of a petrochemical production plant, which allows to calculate the pressure, temperature, phase conditions and compositions of a process flow within a multi-phase reactor. The necessary real process sensors provide only the process parameters of the input and output currents.
- Real-time visualization of the key parameters
- Destructive temperature peaks as well as undesired by-product formation should be avoided
- Plant throughputs should be optimized precisely, taking into account material life and catalyst life cycles
- Increasing the throughput-related catalyst life cycle by up to 10% in the reference plant
- The method should be easy to reproduce in other processes.

Planned results: simulation model of the condensation unit of the reference plant and algorithm for determining the wall temperature; a realistic simulation model; implementation of the interface between process database and CAT SAVE model and simulation of the application in real operating parameters; value criteria of performance standards;

## **Projektkoordinator**

- Technische Universität Graz

## **Projektpartner**

- Prozess Optimal CAP GmbH