NORGE

(12) **PATENT**

(19) NO (11) **315563** (13) B1

(51) Int Cl[7] C 08 F 10/00, 2/00, 210/00,
G 05 B 13/02, G 05 D 21/02

Patentstyret

(21) Søknadsnr	19975780	(86) Int. inng. dag og søknadsnummer	1996.06.01, PCT/EP96/02408
(22) Inng. dag	1997.12.08		
(24) Løpedag	1996.06.01	(85) Videreføringsdag	1997.12.08
(41) Alm. tilgj.	1998.02.06	(30) Prioritet	1995.06.09, BE, 9500506
(45) Meddelt dato	2003.09.22		

(71) Patenthaver Solvay Polyolefins Europe-Belgium SA,
Rue du Prince Albert, 44, B-1050 Brussel, BE
(72) Oppfinner Jaques de Selliers, B-1050 Brussel, BE
(74) Fullmektig Bryn Aarflot AS, 0104 Oslo

(54) Benevnelse **Fremgangsmåte for styring av kjemiske synteseprosesser**

(56) Anførte publikasjoner Ingen

(57) Sammendrag

En fremgangsmåte for styring av en synteseprosess for minst ett kjemisk produkt i et utstyr som omfatter minst en reaktor (R) som kan betraktes som en perfekt blandet reaktor, hvor manipulerte variabler (GC) tillater innvirken på prosessens forløp for å gjøre en eller flere variabler som er relatert til produktets egenskaper og/eller til prosessens forløp og som benevnes styrte variabler (GR), lik de tilsvarende innstillingspunkter (C_{GR}), og hvor fremgangsmåten innbefatter de følgende trinn:

(a) innmating av innstillingspunkter som vedrører de styrte variablene (C_{GR});
(b) beregning ved hjelp av en prediksjonsenhet (OP), av prediksjoner av de styrte variablene (P_{GR}). basert på målinger av prosessens manipulerte variabler (M_{GC})
(c) anvendelse av en styringsenhet (OC) for å beregne innstillingspunktene for prosessens manipulerte variabler (C_{GC}). basert på innstillingspunktene (C_{GR}) og prediksjonene (P_{GR}) for de styrte variablene,
(d) overføring av innstillingspunktene for prosessens manipulerte variabler (C_{GC}) til aktuatorer for å innvirke på prosessens forløp;

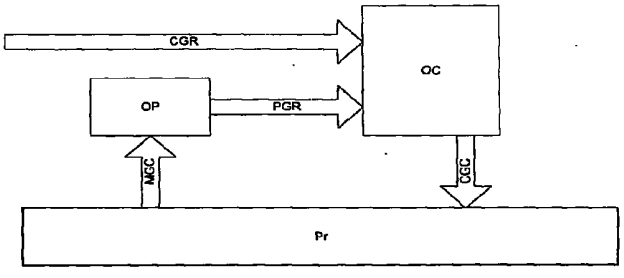
hvor prediksjonsenheten (OP) er basert på en matematisk modell av prosessen, kalt en direkte modell (M), og er utformet på en slik måte at massen (M_{XR}) av minst en bestanddel (X) i reaktoren (R) predikteres ved hjelp av ligningen: $M_{XR} = LAG(F_{XRin} \cdot \tau_X, \tau_X)$

hvor:

F_{XRin} er massestrømmen for bestanddel X som går inn i reaktoren R;

- τ_X er
- tilstedeværelses-tiden for X i reaktoren;
- funksjonen y = LAG (u, τ) er løsningen av differensialligningen $u = \tau \cdot \frac{dy}{dt} + y$

beregnet med den øyeblikkelig verdi av u og τ, og med den sist beregnede verdi av y.



Foreliggende oppfinnelse angår en fremgangsmåte for styring av prosesser for syntese av kjemiske produkter. Den angår også en styringsanordning for å gjøre bruk av denne fremgangsmåten, og en syntese prosess, spesielt syntese av polymer, styrt ved hjelp av denne fremgangsmåten.

I en prosess for syntese av kjemiske produkter som utføres på konvensjonell måte, benyttes det kontrollere av PID-type (proporsjonal-integral-differensial) for å styre individuelt et høyt eller lavt antall variabler (temperaturer, strømningshastigheter, trykkverdier osv.) som påvirker forløpet av syntesen. For hver temperatur, hver strømningshastighet eller hvert trykk som skal styres, måles med andre ord parameterens faktiske verdi kontinuerlig (eller intermitterende), og en PID-kontroller sammenligner denne faktiske verdien med et instillingspunkt, og virker på den variabel som skal styres for å redusere, dersom dette er korrekt, forskjellen mellom innstillingspunktet og den målte verdien.

I betraktning av kompleksiteten av de fleste industrielle prosesser med kjemisk syntese, må instillingspunktene for de forskjellige kontrollerne i dag fremdeles justeres empirisk for til slutt å oppnå de ønskede egenskaper ved det syntetiserte produktet. Det benyttes oppskrifter for dette formål, som tilveiebringer kombinasjoner av parametre som er bestemt empirisk, for i en stabil tilstand å oppnå de ønskede egenskaper for det syntetiserte produktet.

Empiriske forhold mellom de kontrollerte variablene og egenskapene ved det syntetiserte produktet kan utledes fra disse oppskriftene ved hjelp av mer eller mindre sofistikerte statistikk-verktøy. Det er imidlertid åpenbart at disse empiriske forholdene neppe kan ta i betraktning de mange innbyrdes avhengigheter som eksisterer mellom de forskjellig variablene som styres separat, eller de ukjente perturbasjoner slik som råmaterialenes innhold av urenheter.

Det er også åpenbart at en tradisjonell styring av typen lukket sløyfe, som anvender målinger av vesentlige egenskaper ved det syntetiserte produktet som tilbakekoplings-korreksjoner, er vanskelig å anvende i de fleste syntese prosesser. Dette er fordi dødtidene som inngår enten i prosessen elle målingene eller analysene som benyttes som tilbakekoplings-korreksjoner, er alt for lange, og uavhengighetene mellom de forskjellige variablene som styrer prosessen, er altfor komplekse.

Internasjonal søknad WO 93/24533 beskriver en styringsmetode for en prosess for gassfase-polymerisering av en alfa-olefin i en horisontal reaktor, hvor styringsparametere gjør det mulig å agere i løpet av prosessen for å få polymerens smelte-indeks (MFR) lik det tilsvarende innstillingspunkt, idet metoden innbefatter de følgende trinn:

- bestemmelse av forholdene mellom polymerens smelteindeks når den forlater reaktoren, og en første rekke parametere,
- styring av denne første rekken av parametere,
- beregning av polymerens MFR,
- tilpasning av minst en av parameterne for å justere den beregnede MFR til en forutbestemt verdi.

Det har lenge vært kjent at syntheseprosesser, spesielt prosesser ved kontinuerlig polymer-syntese (polymeriserings-prosesser), utstyrt med kontrollere med empirisk justerte instillingspunkter, har vesentlige ulemper som kan oppsummeres som følger:

- oppstartinger av syntesprosessen tar mye tid, og frembringer store mengder av produkt utenfor spesifikasjonene;
- kvalitetsforandringer foregår langsomt, hvilket også resulterer i produksjon av store mengder av overgangs-produkter som er utenfor spesifikasjonene;
- prosessens produksjonshastighet, dvs. massen av produkt(er) som syntetiseres pr. tidsenhet, er vanskelig å forandre uten å forverre egenskapene ved dette produktet eller disse produktene;
- konsistens av det/de syntetiserte produktets/produktenes vesentlige egenskaper er ofte svak, selv i en stabil tilstand.

For å unngå empirisk justering av innstillingspunktene, er det foreslått i faglitteraturen å benytte styringsmetoder for syntheseprosesser som gjør bruk av karakteristiske ligninger som benytter modelldannelse av syntheseprosessen for å relatere noen egenskaper ved det/de syntetiserte produktet/produktene til reaktorens/reaktorenes arbeidsbetingelser under syntesen. For å begrense kompleksiteten av disse karakteristiske ligningene, er det imidlertid til nå regnet med at det i praksis er nødvendig enten å betrakte utelukkende det statiske tilfellet (stabil tilstand), eller å begrense seg til en høyt forenklet empirisk modelldannelse av

prosessens dynamikk. Anvendelsen av en statisk modell er begrenset til styring av en produksjon med temmelig stabil tilstand.

I tilfellet med empirisk modelldannelse, er de karakteristiske ligningene gyldige bare for et smalt gyldighetsområde (nær det punkt hvor modelldannelsen er utført). I begge tilfeller styres oppstartings-fasene og overgangsfasene dårlig. Det er utvilsomt mulig å se for seg «dekning» av et bredere område av driftsbetingelser ved å foreta slik lokal modelldannelse på flere forskjellige punkter i området med driftsparametere, men en slik tilnærmelse blir uoverkommelig så snart det gjøres et forsøk på å styre et antall variabler ved å innvirke på mange parametere.

Det er følgelig ønskelig å ha tilgjengelig en enkel styringsmetode og en enkel styringsanordning som er bedre tilpasset til de spesifikke trekk ved dynamikken i syntesprosesser for kjemiske produkter.

For dette formål angår foreliggende oppfinnelse en fremgangsmåte for styring av en synteseprosess for minst ett kjemisk produkt i et utstyr som omfatter minst en reaktor (R) som kan opptas i en perfekt blandet reaktor, hvor en eller flere manipulerte variabler (GC) gjør det mulig å innvirke på forløpet av prosessen for å gjøre en eller flere variabler som er relatert til produktets egenskaper og/eller til forløpet av prosessen, og som kalles styrte variabler (GR), lik de tilsvarende innstillingspunkter (C_{GR}) (eller i det minste så nær de sistnevnte som mulig), hvor fremgangsmåten innbefatter de følgende trinn:

(a) innmating av innstillingspunkter som vedrører de styrte variablene (C_{GR});

(b) beregning ved hjelp av en prediksjonsenhet (OP), av prediksjoner for de styrte variablene (P_{GR}), basert på målinger av de prosess-manipulerte variablene M_{GC});

(c) anvendelse av en styringsenhet (OC) for å beregne innstillingspunktene for de prosess-manipulerte variablene (C_{GC}), basert på innstillingspunktene (C_{GR}) og prediksjonene (P_{GR}) for de styrte variablene;

(d) overføring av instillingspunktene for de prosess-manipulerte variablene (C_{GC}) til aktuatorer eller til styringsenheter som styrer aktuatorene, for å innvirke på prosessens forløp;

hvor prediksjonsenheten (OP) er basert på en matematisk modell av prosessen, kalt en direkte modell (M), og er utformet på en slik måte at massen M_{XR} av minst en bestanddel (X) i reaktoren (R) predikteres ved hjelp av ligningen:

$$M_{XR} = LAG\ (F_{XRin} \cdot \tau_X,\ \tau_X)$$

hvor:

- F_{XRin} er massestrømmen av bestanddelen X som går inn i reaktoren R;
- τ_X er oppholdstiden for X i reaktoren (tidskonstant), som er

$$\tau_X = M_{XR} / (\Sigma\ Fxdis)$$

hvor:

- M_{XR} betegner den sist beregnede verdi av massen av bestanddelen X som er tilstede i reaktoren R;
- Σ Fxdis betegner summen av alle massestrømmer Fxdis som bestanddelen X forsvinner fra reaktoren R for, spesielt ved reaksjon og/eller ved å forlate reaktoren;
- funksjonen y = LAG (u, τ) er løsningen av differensialligningen

$$u = \tau \cdot \frac{dy}{dt} + y$$

beregnet med den øyeblikkelige verdi av u og av τ, og med den sist beregnede verdi av y.

Fordelen ved denne fremgangsmåten er at den ovenstående differensialligningen løses ved en enkel algebraisk beregning, f.eks. ved bruk av den følgende formel (hvor T betegner det tidsintervall,vanligvis kort i sammenligning med τ, som atskiller de suksessive beregningene), eller ved å benytte en formel som er ekvivalent med den sistnevnte:

$$y\ (t) = \frac{y\ (t - T) + u\ (t) \cdot \frac{T}{\tau\ (t)}}{1 + \frac{T}{\tau\ (t)}}$$

I det tilfelle hvor massene av flere bestanddeler blir evaluert slik som fremstilt ovenfor, er fremgangsmåten ifølge oppfinnelsen spesielt fordelaktig, siden disse massene kan beregnes sekvensielt ved slik enkle algebraiske beregninger,

ved hyppig om-beregning (generelt er $T << \tau$). På den annen side krever tradisjonelle metoder samtidig løsning av et system av differensialligninger, og dette krever generelt stor regnekraft og sofistikerte algoritmer for numeriske beregninger (integrasjon); som resultat av dette tar hver iterasjon med beregninger lang tid, og følgelig reagerer en styring av denne type dårlig på hurtige variasjoner.

Den styrte syntheseprosessen kan benyttes for syntese av en monomerisk eller polymerisk forbindelse; svært gode resultater er oppnådd i tilfellet med styring av polymeriseringsprosesser. Prosessen strekker seg også til det tilfelle hvor et antall nyttige produkter syntetiseres samtidig i samme prosess. Prosessen kan være kontinuerlig eller ikke-kontinuerlig (sats); styrings-fremgangsmåten ifølge oppfinnelsen gir utmerkede resultater i tilfellet med kontinuerlige prosesser. Den styrte syntheseprosessen kan eventuelt utgjøre bare en del av en større prosess, hvor de andre delene av prosessen styres på annerledes måte, eller ikke styres. For at styringsmetoden ifølge oppfinnelsen skal være anvendbar, er det nødvendig at minst en reaktor kan bli opptatt i en perfekt blandet reaktor, dvs. en reaktor hvor de forskjellige variablene (temperatur, konsentrasjoner av tilstedeværende bestanddeler og lignende) er virtuelt identiske i hvert punkt. Andre mulige reaktorer kan være av stempel-typen (plugg-strøm); slike reaktorer modelldannes matematisk ved bruk av dødtider. Fremgangsmåten er også anvendelig for en prosess som finner sted i et antall reaktorer anordnet i serie og/eller i parallell, og i stand til å frembringe produkter med identiske eller forskjellige egenskaper.

«Bestanddeler» er ment å betegne alle de stoffer/substanser som er tilstede i reaktoren og er ment å inngå i syntesen eller å tillate den: ikke bare startreagensene samt det/de syntetiserte produktet/produktene, men også eventuelle stoffer som ikke opplever noen omforming, slik som løsemidler, katalysatorer og lignende.

I tillegg til en eller flere reaktorer kan eventuelt anlegget hvor prosessen finner sted, innbefatte andre konvensjonelle anordninger slik som trykkreduserende ventiler, strippere, kondensatorer, tørkere, destillasjonskolonner og lignende. Disse hjelpeanordningene kan videre også generelt betraktes som reaktorer (perfekt blandede eller av pluggstrøm-type), selv om det ikke forgår noen kjemisk reaksjon i dem.

I tilfellet med en polymeriserings-prosess kan f.eks. «variablene som angår produktets egenskaper» velges blant molekylmassen, smelte-indeksen, standard densitet, komonomer-innhold når en komonomer er tilstede, og lignende.

Eksempler på «variabler relatert til prosessen» er spesielt temperaturen og trykket som hersker i reaktoren, prosessens produksjonshastighet, konsentrasjonene av de forskjellige reagenser i reaktoren, og lignende. Produksjonshastigheten betegner massen av syntetisert produkt pr. tidsenhet, hvilket imidlertid ikke nødvendigvis er det samme som strømningshastigheten for syntetisert produkt som forlater reaktoren: således er, som eksempel, og spesielt i oppstartingsfasene, massestrømmen av syntetisert produkt som forlater reaktoren, generelt svært liten, eller til og med null, selv om syntesen har begynt, dvs. at denne utløps-strømningshastigheten da er lavere enn produksjonshastigheten. På den annen side kan i en stabil tilstand produksjonshastigheten opptas i massen av syntetisert produkt pr. tidsenhet.

Eksempler på «manipulerte variabler» er strømningshastigheter for reagenser som går inn i reaktoren, effekten som mates til oppvarmingsanordningene, og lignende. Dette er variabler som gjør det mulig å innvirke på forløpet av prosessen, samt generelt på det syntetiserte produktets egenskaper.

Innstillingspunktet eller -punktene for den/de manipulerte variabel/variabler overføres direkte eller indirekte til konvensjonelle aktuatorer, slik som spesielt ventiler, oppvarmingsenheter og lignende. «Indirekte» betyr at de manipulerte variablene kan overføres gjennom en eller flere styringsenheter (som generelt styrer en enkelt variabel, f.eks. PID-kontrollere) som styrer aktuatoren eller aktuatorene («lokal» styring).

For så vidt angår maskinvare, så er generelt prediksjonsenheten og styringsenheten vanlige beregningsanordninger som muliggjør at beregninger kan utføres som en funksjon av deres kabling eller deres programmering; de kan spesielt være datamaskiner eller digitale systemer for ordre-styring (SNCC). En enkelt anordning kan med fordel kombinere prediksjons- og styringsfunksjonene. Beregningsanordningen eller -anordningene som benyttes, er fortrinnsvis av digital type, og leverer resultatene av sine beregninger med regelmessige intervaller (intermitterende). Tidsintervallene som atskiller utmatingen av disse resul-

tatene, kan variere med tiden, og kan også variere i samsvar med det resultat som inngår: det er klart at hurtig varierende variabler må beregnes på nytt hyppigere enn langsomt varierende variabler. Skiftregisteret kan anvendes for materiell simulering av dødtidene.

Prediksjonsenheten er basert på en direkte matematisk modell av prosessen (M), hvor reaktoren (R) er opptatt i en perfekt blandet reaktor; en eller flere rene forsinkelser (dødtider) kan eventuelt tas i betraktning for å representere eventuelle reaktorer av pluggstrøm-type, eventuelle transportforsinkelser eller forsinkelser ved oppnåelse av måleresultater osv.

Styringsenheten er fortrinnsvis basert på det omvendte av den direkte modell som anvendes i prediksjonsenheten (omvendt modell).

Generelt innbefatter summen $\sum$ Fxdis av alle massestrømmene (Fxdis) for hvilke bestanddelen X forsvinner fra reaktoren R, to ledd:

- F_{RX}, som betegner den massestrøm ved hvilken X forbrukes i en eller flere mulige kjemiske reaksjoner;
- F_{Xout}, som betegner den mulige massestrøm av X som forlater reaktoren ved avtapping under reaksjonen, i det (vanlige) tilfellet hvor X ikke forbrukes fullstendig ved reaksjon i denne reaktoren; eller f.eks. ved fordamping, i tilfellet med en åpen reaktor.

Fordelen ved fremgangsmåten er at Fxdis-leddene generelt er proporsjonale *med* M_{XR}; *f.eks. er*

$F_{Xout} = M_{XR}/\tau_R$

(τ_R betegner tilstedeværelses-tid i reaktor R)

og $F_{RX} = R_X \cdot M_{XR}$

(R_X betegner reaktiviteten for X i reaktoren R).

I dette tilfelle forenkles uttrykket som gir τ_X, og blir:

$\tau_X = 1/ (R_X + 1/\tau_R)$

Dette uttrykket er uavhengig av M_{XR}, og dette utgjør en spesielt fordelaktig forenkling.

En annen fordel ved fremgangsmåten ligger i den periodiske beregning av tilstedeværelsestiden τ_X. τ_X representerer faktisk godt dynamikken for den bestanddel som betraktes i reaktoren. Dette gjør det mulig spesielt å følge forand-

ringen i denne parameteren, hvilket er viktig for å forstå prosessens dynamikk, og følgelig for styringen av den. På den annen side gjør de empiriske metodene av «black box»-type det ikke mulig å oppnå tilgang til denne parameteren.

Beregningen av prediksjonene av de styrte variablene (P_{GR}) kan med fordel i tillegg ta i betraktning en eller flere målinger av styrte variabler (M_{GR}), av manipulerte variabler (M_{GC}) og/eller andre variabler relatert til kjøringen av prosessen (M_{AP}).

På lignende måte kan med fordel beregningen av innstillingspunktene for de prosess-manipulerte variablene (C_{GC}) i tillegg ta i betraktning en eller flere målinger av styrte variabler (M_{GR}), av manipulerte variabler (M_{GC}) og/eller av andre variabler som er relatert til kjøringen av prosessen (M_{AP}) som er identisk med eller forskjellige fra de som eventuelt tas i betraktning med beregningen av prediksjonene av de styrte variablene (P_{GR}).

Alle målinger som diskuteres i herværende beskrivelse, er ikke nødvendigvis direkte målinger, i den forstand at en eller flere av dem kan eventuelt være målinger man kan slutte seg til, dvs. verdier oppnådd ved beregning ut fra en eller et antall andre direkte målinger. Således kan f.eks. ikke produksjonshastigheten for visse eksoterme synteseprosesser måles direkte, men en slutnings-måling av denne kan oppnås ved beregning, f.eks. ut fra (direkte) målinger av strømningshastigheten og av inngangs- og utgangs-temperaturene av kjøle-fluidet.

I det spesielle tilfelle med polymeriserings-prosesser, velges fortrinnsvis den egenskap eller de egenskaper ved polymeren som er involvert i styringen, blant polymerens spesifikke densitet (SD), polymer-smeltens reologiske egenskaper, og dens komonomer-innhold. Spesielt er den reologiske egenskap eller de reologiske egenskaper som inngår i styrings-fremgangsmåten, med fordel polymerens smelte-indeks og/eller en viskositetsmåling.

En eller flere egenskaper ved polymeren evalueres med fordel ved å anvende en teknikk valgt blant teknikkene nær infrarød-spektroskopi (NIR), Fourier transform infrarød-spektroskopi (FTIR) og kjernemagnetisk resonans (NMR).

Spesielt kan en eller flere egenskaper ved polymeren evalueres ved å anvende et på forhånd etablert korrelasjonsforhold med resultatene av målinger som utføres med nær infrarød spektroskopi (NIR) ved et antall bølgelengder forutbe-

stemt som en funksjon av polymerens egenskaper, og valgt mellom 0,8 og 2,6 mm.

Ytterligere detaljer vedrørende utførelsen av slike målinger i sammenheng med styring av polymeriserings-prosesser, kan finnes i patentsøknad EP328826 (US 5155184).

For å ta i betraktning mulige avvik mellom målingene og prediksjonene av de styrte variablene, kan det være nyttig å benytte seg av en korreksjon.

En første type korreksjon består i å korrigere innstillingspunktet for minst en styrt variabel (C_{GR}) på grunnlag av det (med fordel filtrerte) avvik mellom målingen (M_{GR}) og prediksjonen (P_{GR}) av denne styrte variabelen, for å gjøre styringen effektiv ($M_{GR} = C_{GR}$) også i nærvær av en feil i prediksjonen av denne styrte variabelen. Denne teknikken kalles vanligvis «intern modell-styring» (IMC).

En andre type korreksjon består i periodisk å tilpasse modellen (M) av prosessen på grunnlag av det (med fordel filtrerte) avvik mellom prediksjonene (P_{GR}) og målingene (M_{GR}) av de styrte variablene, slik at også her modellen av prosessen bør levere prediksjoner av de styrte variablene (P_{GR}) som er så nær som mulig (ideelt like) målingene av disse variablene (M_{GR}), og dette er av avgjørende betydning for en effektiv styring.

Tilpasningen består i å rekalibrere modellen, dvs. i å beregne på nytt en eller flere av modellens parametere; normalt overskrider ikke antallet omberegnede parametere antallet styrte variabler som både en prediksjon og en måling er tilgjengelige for. En re-synkronisering (forskyvning i tid) av disse målingene er ofte ønskelig, fremfor alt når de er målinger av egenskaper ved det syntetiserte produktet som det tar lang tid å oppnå. Denne andre typen korreksjon er mer fordelaktig for så vidt den tillater modellen også å bli tilpasset med hensyn på sin dynamikk.

Tilpasningen angår ikke bare den direkte modellen av prosessen (prediksjonsenheten), men også den omvendte modellen (styringsenheten).

I samsvar med en fordelaktig alternativ form, er målingene (M_{GR}) av de styrte variablene bare involvert i den eventuelle tilpasning av modellen av prosessen, og er ikke direkte involvert i beregningen av innstillingspunktene for prosessens (C_{GC}) manipulerte variabler.

Dvs. at målingene av de styrte variablene ikke er involvert i den egentlige styringen: fordelen ved dette er at kvaliteten av styringen således ikke påvirkes av den eventuelle tregheten i evalueringen av produktets egenskaper.

Et annet aspekt ved oppfinnelsen er relatert til en styrings-fremgangsmåte slik som beskrevet ovenfor, anvendt på en polymeriseringsprosess, innbefattende ett eller fler av de følgende tilleggstrinn:

- beregning av et innstillingspunkt for temperatur i reaktoren som funksjon av ett eller flere innstillingspunkter for produktets egenskaper; og overføring av temperatur-innstillingspunktet til en eller flere aktuatorer som gjør det mulig å modifisere temperaturen i reaktoren (eventuelt indirekte, dvs. via en eller flere styringsenheter, f.eks. PID-kontrollere, som styrer aktuatoren/aktuatorene);
- beregning av en varmebalanse for reaktoren, basert spesielt på temperaturmålinger; anvendelse av denne varmebalansen for å bestemme mengden syntetisert polymer pr. tidsenhet (produksjonshastighet) og/eller katalysatorvirkningsgraden og/eller konsentrasjonen av minst en reagens i reaktoren;
- beregning av varmemengden som produseres ved polymeriseringen, ved hjelp av en beregning av mengden reagens eller reagenser som polymeriserer; bestemmelse ved hjelp av dette, av den varmemengde som må tilføyes eller fjernes for å opprettholde reaktor-temperaturen; anvendelse av resultatet av temperaturen denne beregningen (f.eks. ved fremad-mating) for å forbedre temperaturstyringen, for å gi så god tilpasning som mulig til innstillingspunktet for temperatur, spesielt i tilfelle av forandringer i produksjonshastigheten.

Disse alternative formene er basert på den relasjon som eksisterer mellom mengden reagens/reagenser som inngår i reaksjonen, og varmemengden som produseres eller absorberes ved reaksjonen.

I samsvar med en fordelaktig, alternativ form, beregnes egenskapen Px_R ved en bestanddel «x» i reaktoren R, som opptas i en perfekt blandet reaktor, som følger:

$$Px_R = LAG\ (Px_{IN},\ Mx_R/Fx_{IN})$$

hvor «Px» er en egenskap ved en bestanddel «x», som i hovedsak tilsvarer den lineære blande-loven

$$Px_{1+2} = w_1 \cdot Px_1 + w_2 \cdot Px_2,$$

hvor w_1 og w_2 er masse-fraksjonene av to blandede fraksjoner 1 og 2 av egenskap Px_1 og Px_2 ($w_1 + w_2 = 1$);

Px_{1+2} er egenskapen ved x når den forlater reaktoren etter blanding;

Px_{IN} er egenskapen ved bestanddelen «x» når den går inn i reaktoren R;

Mx_R er massen av bestanddelen x i reaktoren R;

Fx_{IN} er massestrømmen av bestanddel x som går inn i reaktoren R.

En matematisk transformasjon gjør det noen ganger mulig å gjøre noen variabler som ikke er lineære, lineære (additive): f.eks. adlyder smelte-indeksen for en polymer ikke noen lineær blande-lov, men dens logaritme; derfor utføres den ovenfor nevnte beregningen av Px_{1+2} på denne parameterens logaritme.

I samsvar med en annen fordelaktig og alternativ form, innbefatter styringsfremgangsmåten ifølge oppfinnelsen de følgende trinn:

- innmating av innstillingspunkter som angår en eller flere egenskaper ved det produkt som skal syntetiseres, i en hoved-algoritme;
- innmating av innstillingspunktet for prosessens produksjonshastighet i en slave-algoritme;
- beregning av konsentrasjons-innstillingspunktene for bestanddelene i reaktoren ved hjelp av hoved-algoritmen, spesielt som en funksjon av innstillingspunktene og av målingene av produktets egenskaper og av målinger eller prediksjoner av de forskjellige bestanddelenes konsentrasjoner i reaktoren;
- overføring av de konsentrasjons-innstillingspunkter som beregnes ved hjelp av hoved-algoritmen, som inngangsvariabler i slave-algoritmen;
- beregning av strømningshastighets-innstillingspunkter for de bestanddeler som går inn i reaktoren, ved hjelp av slave-algoritmen, spesielt som funksjon av innstillingspunktet for prosessens produksjonshastighet, av konsentrasjons-innstillingspunkter og av strømningshastighets-målinger for de bestanddeler som går inn i reaktoren, og
- overføring av de strømningshastighets-innstillingspunkter som beregnes ved hjelp av slave-algoritmen, til en eller flere aktuatorer (eventuelt indirekte, dvs. via en eller flere styringsenheter, f.eks. PID-kontrollere som styrer aktuatoren/aktuatorene) for å styre strømninghastighetene for de bestanddeler som går inn i reaktoren,

hvor hoved-algoritmen og/eller slave-algoritmen benyttes slik som beskrevet ovenfor, dvs. ved å anvende LAG-funksjonen til å beregne massen av minst en bestanddel i reaktoren.

Hoved- og slave-algoritmene benyttes også ved hjelp av en eller flere konvensjonelle beregningsanordninger. I samsvar med en fordelaktig, alternativ form, utføres alle beregninger (prediksjon, styring og lignende) med disse to algoritmene ved hjelp av samme beregningsanordning.

Målinger av temperatur (f.eks. temperatur i reaktoren og/eller inngangs- og/eller utgangs-temperaturen for et eventuelt kjølefluidum) inngår med fordel som ytterligere variabler for innmating i prediksjons- og/eller styringsenheten.

Slave-algoritmen tar også fortrinnsvis hensyn til målingene av sammensetningen av bestanddeler som er tilstede i eller forlater reaktoren.

I tillegg innbefatter styrings-fremgangsmåten fortrinnsvis et beregningstrinn med hjelp av slave-algoritmen, som funksjon av strømningshastighets-målingene, av prediksjoner av konsentrasjoner overført til hoved-algoritmen for å beregne prediksjoner av egenskaper som benyttes som ytterligere inngangsvariabler ved beregningen av konsentrasjons-innstillingspunktene.

Hoved- og slavealgoritmene utgjør en styring av kaskade-typen. Det er spesielt fordelaktig at hovedalgoritmen og/eller slave-algoritmen bør være adaptive, dvs. at noen av deres parametere bør om-beregnes periodisk (med regelmessige eller uregelmessige intervaller). En slik tilpasning gjør det mulig spesielt å garantere at den matematiske modellen beskriver prosessen i dens aktuelle tilstand så pålitelig som mulig, selv ved forandringer i noen driftsbetingelser (temperatur, trykk, produksjonshastighet og lignende) og i tilfelle av perturbasjoner (forgifting av katalysatoren etc.).

Hovedalgoritmen utfører styringen av produktets egenskaper ved hjelp av en modell basert på karakteristiske ligninger som relaterer produktets egenskaper til de forskjellige bestanddelenes konsentrasjoner i reaktoren, samt eventuelt til temperaturen som hersker i reaktoren. Slave-algoritmen regulerer konsentrasjonene av en eller flere bestanddeler ved å innvirke på mate-strømningshastighetene for en eller flere bestanddeler, som kan være forskjellige.

Fordelen ved denne «hoved/slave»-kaskaden ligger i det faktum at hovedmodellen bestemmer med nøyaktighet konsentrasjonene av bestanddeler som er nødvendige for å oppnå egenskaper som er ønskelige for det syntetiserte produktet, og at slavemodellen sikrer at verdiene som påtvinges av hovedmodellen, adlydes. Slaven, som styres av hovedmodellen, er følgelig i stand til:

- å bringe konsentrasjonene hurtig til de verdier som er ønsket av hovedmodellen, og holde dem der; og
- å styre effektivt prosessens produksjonshastighet uten å forstyrre konsentrasjonene.

Denne hoved/slave-kaskaden er spesielt effektiv fordi både hovedmodellen og slavemodellen tar hensyn til prosessens dynamikk gjennom anvendelsen av LAG-funksjonen i beregningene.

Slavealgoritmen kan i tillegg utformes slik at den forsyner hovedalgoritmen med pålitelige prediksjoner av konsentrasjoner. Fra disse prediksjonene eller målingene av konsentrasjoner utleder hovedalgoritmen pålitelige prediksjoner av egenskaper ved produktet som er i ferd med å syntetiseres i reaktoren. Ved å sammenligne disse prediksjonene av egenskaper med innstillingspunktene for egenskapene, kan hovedalgoritmen, der det passer, gå inn og korrigere konsentrasjonenes innstillingspunkter. Denne korreksjonen er mulig også før en uoverenstemmelse oppstår mellom en variabel og dens innstillingspunkt. Det faktum at prediksjoner av egenskaper, oppnådd fra prediksjoner eller fra målinger av konsentrasjoner, tas hensyn til, gjør det mulig redusere i betraktelig grad de fluktuasjoner i tid i det syntetiserte produktets egenskaper, og dette resulterer i bedre ensartethet når det gjelder produktets kvalitet.

Hvis egenskapene ved det produkt som skal syntertiseres, avhenger av temperaturen i reaktoren/reaktorene, er det fordelaktig å tilveiebringe en temperaturstyring med slavealgoritmen. Denne stiller opp varmebalansen for hver reaktor, og ved hjelp av beregningen av produksjonshastigheten, bestemmer den den varmemengde som må tilføyes eller fjernes for å få tilpasning til de temperatur-innstillingspunkter som beregnes av hovedalgoritmen. Fra disse resultatene utleder den inngangs-innstillingspunkter for varme-styringsenheter i syntese-utstyret. Man vil forstå at denne typen prosedyre gjør det mulig å gripe inn på

varmestyringsenhetene i synteseutstyret også før temperaturen har foandret seg. Målinger av temperaturer går dessuten med fordel inn som ekstra inngangssignaler i slavealgoritmen.

Hovedalgoritmen innbefatter fortrinnsvis den følgende struktur:

- en prediksjonsenhet basert på en direkte modell av prosessen, som tillater at en prediksjon kan leveres av det syntetiserte produktets egenskaper som funksjon av målinger og/eller av prediksjoner av bestanddelenes konsentrasjoner;
- en tilpasningsenhet som sammenligner prediksjonene av egenskaper, beregnet av prediksjonsenheten, med verdier som faktisk er målt må det syntetiserte produktet, og som utleder tilpasningsparametere fra denne sammenligningen, hvor de nevnte tilpasningsparametrene inngår som ytterligere inngangssignaler til prediksjonsenheten for hovedalgoritmen; og
- en styringsenhet basert på en omvendt modell av prosessen, for å beregne som en funksjon av innstillingspunktene og av prediksjonene av egenskaper ved det produkt som skal syntetiseres, konsentrasjons-innstillingspunkter for slavealgoritmen, idet tilpasningsparametrene også inngår som ytterligere inngangssignaler til styringsenheten.

Slavealgoritmen innbefatter med fordel den følgende struktur:

- en prediksjonsenhet, basert på en direkte modell av prosessen, som tillater levering av en prediksjon av konsentrasjonene av en eller flere av bestanddelene, basert på en materialbalanse i reaktoren;
- en tilpasningsenhet som sammenligner prediksjonene av konsentrasjoner, beregnet med den direkte modellen, med målinger av konsentrasjon, og som utleder tilpasningsparametere fra denne sammenligningen, hvor tilpasningsparameterne inngår som ekstra inngangssignaler til prediksjonsenheten i slavealgoritmen; og
- en styringsenhet, basert på en revers-modell av prosessen, for å beregne, som en funksjon av innstillingspunktet for produksjonshastighet, av de konsentrasjons-innstillingspunkter som beregnes av styringsenheten i hovedalgoritmen, og av de konsentrasjonsprediksjoner som beregnes av prediksjonsenheten i slavealgoritmen, innstillingspunktene for de strømningshastigheter som går inn

i reaktoren, i det tilpasningsparametrene inngår som ytterligere inngangssignaler til styringsenheten i slavealgoritmen.

Prosessens dynamikk beskrives og beregnes med fordel ved hjelp av funksjoner av typen Y = LAG (u, τ),

idet denne funksjonen er løsningen av differensialligningen

$$u = \tau \cdot \frac{dy}{dt} + y$$

hvor argumentene u og τ varierer med tid. Bruken av denne funksjonen i samsvar med teoremene 1 og 2 som oppstilles nedenfor, gjør det mulig å løse sekvensielt de material-balanser som benyttes av slavealgoritmen, og å beskrive prosessens kinetikk ved å anvende enkle karakteristiske ligninger i hovedalgoritmen. LAG-funksjonen gjør det videre mulig å redusere i betraktelig grad volumet av beregninger som er nødvendige, og gjør det følgelig unødvendig å benytte hurtige og kraftige datamaskiner. I tillegg gjør denne funksjonen det mulig å etablere de direkte og reverserte modellene av prosessen, eller av noen av prosessens deler, på en særlig enkel måte.

De viktigste egenskaper ved den foreslåtte styringen kan oppsummeres som følger:

- forventning: styringen begynner å korrigere de målte forstyrrelsene/perturbasjonene også før virkningen av dem er sett på målingene av egenskapene (anvendelse av prediksjoner av konsentrasjoner, av prediksjoner av egenskaper og av prediksjoner av temperaturer i algoritmene);
- nøyaktighet også i nærvær av perturbasjoner: den direkte modellen og den omvendte/reverserte modellen omkalibreres kontinuerlig ved anvendelse av målingene av egenskapene (tilpasning);
- utvidet gyldighet: algoritmen beholder sin gyldighet under forandringene i produksjonshastighet og forandringer i kvalitet, og under oppstartinger og ved stopp (prosessens dynamikk uttrykt som en ligning, anvendelse av prediksjoner for de variabler ved målinger som innebærer lange dødtider);
- enkelhet: utviklingen og implementeringen forenkles ved hjelp av en original fremgangsmåte for å uttrykke prosessens dynamikk som en ligning (LAG-funksjonen).

Synteseprosessen som skal styres, modelldannes således på en form som generelt omtales som en «kunnskapsmodell» (første prinsipp-modell), dvs. at dens modell utvikles fra ligninger som reflekterer det detaljerte fysiokjemiske forløp av prosessen. En slik tilnærmingsmåte gjør det mulig å oppnå, ved hjelp av en matematisk relativt enkel mengde ligninger, resultater som er overlegne i forhold til de som ville ha blitt oppnådd ved hjelp av en empirisk modell av «black box»-type, ved å levere spesielt parametre relatert til virkelige variabler, og bedre gyldighet utenfor identifikasjons-rommet (ekstra polering). De fleste av de empiriske modellene benytter komplekse ligninger, ofte av høy orden hvis det er ønskelig å oppnå en korrekt simulering av prosessens dynamikk, og hvor parametrene (spesielt tidskonstantene) må identifiseres for et nøyaktig driftspunkt; modellen er gyldig bare i det nærmeste området omkring dette driftspunktet. Det er vanskelig å generalisere en slik tilnærmingsmåte til et høyt antall driftspunkter i tilfellet med en faktisk prosess med kjemisk syntese som involverer mange variabler.

I kontrast til dette, og i samsvar med styrings-fremgangsmåten ifølge oppfinnelsen, anvendes en mengde rent statiske, enkle ligninger; prosessens dynamikk simuleres ved hjelp av enkle funksjoner (jamfør LAG-funksjonen ovenfor). Med fordel kan oppholds-tidene (tidskonstanter for ligningene) beregnes på nytt så ofte det er ønskelig, og dette oppstiller ikke noe problem tatt i betraktning ligningenes enkelhet. I det endelige resultatet oppnås en mengde med ligninger som er ekstremt enkle og lette å løse i sann tid, også ved en høy frekvens.

Den foreslåtte styrings-fremgangsmåten kan anvendes med fordel på synteseprosesser, spesielt ved kontinuerlig syntese av polymerer (polymerisering), og spesielt kontinuerlig polymerisering av olefiner slik som f.eks. etylen eller propylen, i flytende fase og i gassfase.

Det beskrives også også en prosess for syntes av ett eller flere kjemiske produkter, styrt ved hjelp av en styrings-fremgangsmåte i samsvar med oppfinnelsen. Spesielt er det oppnådd svært gode resultater i tilfellet med styring av en prosess for kontinuerlig syntese av polyetylen ved polymerisering av etylen i minst en reaktor, idet reagensene innbefatter etylen, hydrogen og/eller en eventuell komonomer, hvor polymeriserings-reaksjonen finner sted i et løsningsmiddel i nærvær

av en katalysator, og en del av innholdet i reaktoren fjernes kontinuerlig eller intermitterende. Denne prosessen kan like gjerne finne sted i flytende fase og i gassfase; den foregår fortrinnsvis i flytende fase (i et løsningsmiddel).

Fremgangsmåten anvendes på lignende måte ved syntese av polypropylen (idet den viktigste start-monomer i dette tilfellet er propylen istedenfor etylen), idet det også er mulig at propan er tilstede hvis prosessen finner sted i gassfase. I tilfellet med polypropylen omtales ofte smelte-indeksen som MFI istedenfor MI.

Oppfinnelsen angår også en styringsanordning, ment for å iverksette styrings-fremgangsmåten ifølge oppfinnelsen, for syntese av ett eller flere kjemiske produkter, innbefattende en slik styringsanordning.

Mer nøyaktig angår oppfinnelsen også en anordning for styring av en synteseprosess for et kjemisk produkt i et synteseutstyr som innbefatter minst en reaktor, hvor anordningen innbefatter:

- minst en beregningsenhet;
- en anordning for innmating av innstillingspunkter for egenskaper ved det produkt som skal syntetiseres, i beregningsenheten;
- en anordning for innmating av innstillingspunkter for produksjonshastighet for det produkt som skal syntetiseres, i beregningsenheten;
- enheter for måling av strømningshastigheten for de strømmer som går inn i reaktoren;
- enheter for måling av sammensetningen av de strømmer som forlater reaktoren;
- enheter for styring av strømningshastigheter (aktuatorer) for å regulere strømningshastighetene for strømmene som går inn i reaktoren;
- anordninger for kommunikasjon mellom beregningsenheten, enhetene for måling av strømningshastighet og reguleringsenhetene;

hvor:

- massen av minst en bestanddel beregnes ved hjelp av LAG-funksjonen som er omtalt ovenfor;
- beregningsenheten er i stand til å beregne ved hjelp av en hovedalgoritme, og som en funksjon av innstillingspunktene for egenskaper, innstillingspunktene for konsentrasjon av reagenser i reaktoren;

- beregningsenheten er i stand til å beregne ved hjelp av en slavealgoritme, og som funksjon av innstillingspunktene for utmating og av innstillingspunkter for konsentrasjon, innstillingspunkter for strømningshastighet for de strømmer som går inn i reaktoren, idet disse innstillingspunktene for strømningshastighet overføres som inngangs-innstillingspunkter til enhetene for styring av strømningshastigheter;
- målingene som utføres av enhetene for måling av strømningshastigheter, inngår som ytterligere inngangssignaler til slavealgoritmen, for å sette den sistnevnte i stand til å beregne prediksjoner av konsentrasjoner som funksjon av disse målingene av strømningshastigheter, idet disse prediksjonene av konsentrasjoner inngår i hovedalgoritmen for å beregne prediksjoner av egenskaper, anvendt som ekstra inngangssignaler i beregningen av innstillingspunkter for konsentrasjoner.

Oppfinnelsen angår også en styringsanordning slik som beskrevet ovenfor, hvor:

- synteseutstyret i tillegg innbefatter:
  - enheter for varmestyring, i stand til å styre temperaturen i reaktoren, og
  - temperatursensorer;
- hovedalgoritmen er i stand til å beregne, som funksjon av innstillingspunktene for egenskaper, innstillingspunkter for temperaturer for reaktoren;
- slavealgoritmen er i stand til:
  - å beregne en varmebalanse for reaktoren,
  - å løse denne varmebalansen eller disse varmebalansene for å bestemme den varme som må tilføyes til, eller trekkes ut av, syntesen for å tilpasse til innstillingspunktene for temperatur, og
  - å utlede fra denne varmebalansen eller disse varmebalansene, inngangs-innstillingspunkter for enhetene for varmestyring av reaktoren, og
  - å motta, som ytterligere inngangsvariabler, de målinger som utføres av temperatursensorene.

Oppfinnelsen angår også en anordning slik som beskrevet ovenfor, hvor målinger som utføres temperatursensorene, inngår som ytterligere inngangssignaler i hovedalgoritmen.

Oppfinnelsen angår også en anordning slik som beskrevet ovenfor, innbefattende:

- minst en analysator som er i stand til å levere målinger av de egenskaper som inngår i hovedalgoritmen; og
- anordninger for å innmate disse målingene av egenskaper i beregningsenheten;

hvor denne beregningsenheten innbefatter:

- en første prediksjonsenhet basert på en første, direkte modell av prosessen som tillater prediksjon av egenskapene ved det syntetiserte produktet som funksjon av prediksjonene av konsentrasjoner beregnet av slavealgoritmen;
- en første tilpasningsenhet som sammenligner prediksjonene av egenskaper, beregnet av den første prediksjonsenheten, med de verdier som faktisk er målt på det syntetiserte produkter, og som fra denne sammenligningen utleder tilpasningsparametre som inngår som ekstra inngangssignaler i den første prediksjonsenheten; og
- en første styringsenhet, basert på en første reversert modell, for å beregne, som funksjon av innstillingspunktene og av prediksjonene av egenskaper, innstillingspunkter for konsentrasjoner for slavealgoritmen, idet tilpasningsparametrene også inngår som ekstra inngangssignaler i den første styringsenheten.

Oppfinnelsen angår også en anordning slik som beskrevet ovenfor, som i tillegg innbefatter:

- minst en analysator som er i stand til å levere målinger av konsentrasjon av reagensene; og
- anordninger for innmatinger av disse målingene av konsentrasjon, i beregningsenheten;

Idet denne beregningsenheten innbefatter

- en andre prediksjonsenhet, basert på en andre direkte modell som tillater prediksjon av konsentrasjonene som funksjon av material-balansen i reaktoren;
- en andre tilpasningsenhet som sammenligner prediksjonene av konsentrasjoner, beregnet av den andre prediksjonsenheten, med målingene av konsentrasjon, og som fra denne sammenligningen utleder andre tilpasningsparametre som inngår ytterligere inngangssignaler i den andre prediksjonsenheten; og

- en andre styringsenhet, basert på en andre, reversert modell, for å beregne, som funksjon av innstillingspunktene for utmating, innstillingspunkter for konsentrasjon beregnet av hovedalgoritmen og prediksjoner av konsentrasjon fra den andre prediksjonsenheten, innstillingspunkter for de strømningshastigheter som går inn i reaktoren, idet de andre tilpasningsparameterne inngår som ekstra inngangssignaler i den andre styringsenheten.

Oppfinnelsen er angitt i de vedføyde patentkravene.

En konkret utførelsesform av oppfinnelsen er illustrert på basis av en prosess for kontinuerlig syntese av polyetylen (PE), med henvisning til fig. 1 til 10. Disse figurene viser:

Fig. 1: et diagram over en krets for fremstilling av polyetylen;

Fig. 2: et forenklet diagram over strukturen av en avansert styring i samsvar med oppfinnelsen;

Fig. 3: et grunnleggende diagram over den avanserte styringen anvendt på fremstillingskretsen ifølge fig. 1;

Fig. 4: et grunnleggende diagram over en algoritme for adaptiv styring, anvendt i det avanserte styringssystemet ifølge fig. 2;

Fig. 5: et diagram over strukturen av hovedalgoritmen i det avanserte styringssystemet ifølge fig. 2;

Fig. 6: et diagram over strukturen av slavealgoritmen i det avanserte styringssystemet ifølge fig. 2;

Fig. 7: det generelle diagram over en styrings-fremgangsmåte i samsvar med oppfinnelsen; og

Fig. 8-10: diagrammet over spesielle, alternative former av fremgangsmåten ifølge oppfinnelsen.

I fig. 7 kan man først se den egentlige syntese prosessen (Pr), som kan styres ved å anvende minst ett innstillingspunkt for en manipulert variabel (CGC) (f.eks. en eller flere strømningshastigheter for bestanddeler som går inn i reaktoren, en temperatur og lignende) på en egnet aktuator (ventil, varme- eller kjøleanordning og lignende). Styringen utføres ved hjelp av en styringsenhet (OC) basert på den omvendte matematiske modell av prosessen, og hvis hovedfunksjon det er

å sammenligne innstillingspunktet/innstillingspunktene for de styrte variablene (CGR) (f.eks. en eller flere egenskaper ved det produkt som skal syntertiseres, og/eller en eller flere variabler relatert til forløpet av prosessen) med prediksjonen/prediksjonene for disse variablene (PGR). Prediksjonen eller prediksjonene av de styrte variablene (PGR) beregnes av en prediksjonsenhet (OP) basert på den direkte matematiske modell for prosessen, på grunnlag av målinger av de manipulerte variablene (MGC). Det skal bemerkes at ingen måling av en egenskap eller egenskaper ved det syntetiserte produktet inngår i styringen.

Fig. 8 viser en alternativ form av fremgangsmåten ifølge fig. 7, hvor den matematiske modellen for prosessen periodisk tilpasses ved hjelp av en tilpasningsenhet (OA) på grunnlag av avviket (fortrinnsvis filtrert eller behandlet digitalt) mellom prediksjonene (PGR) og målingene (MGR) av de styrte variablene. En resynkronisering (forskyving i tid) av disse målingene og av disse prediksjonene er ofte nødvendig, f.eks. når de angår målinger av egenskaper ved det syntetiserte produktet som det tar lang tid å oppnå. Tilpasningsenheten (OA) sender resultatene av sine beregninger, dvs. dens tilpasnings-instruksjoner, til prediksjonsenheten (for å tilpasse den direkte modell for prosessen) og til styringsenheten (for å tilpasse den reverserte modellen for prosessen). Det skal bemerkes at målingen/målingene av det syntetiserte produktets egenskap/egenskaper bare tas med i betraktningen i tilpasningsprosessen, som generelt finner sted med en mye lavere hyppighet enn den normale styringsprosessen. Disse målingenes eventuelle langsomhet har derfor ingen direkte virkning på kvaliteten av styringen.

Fig. 9 viser en annen alternativ form av oppfinnelsen, hvor en eller flere målinger av styrte variabler (M_{GR}) tas i betraktning av styringsenheten (OC), og en eller flere målinger av styrte variabler (M_{GR}') (eventuelt forskjellige) tas i betraktning av prediksjonsenheten (OP). På lignende måte kan i tillegg en eller flere målinger av manipulerte variabler (M_{GC}') tas hensyn til av styringsenheten (OC).

Det er åpenbart at det vil være mulig å skape en annen alternativ form av fremgangsmåten ifølge oppfinnelsen, ved å kombinere de alternative former i fig. 8 og 9, dvs. ved samtidig å benytte en tilpasningsenhet og ved å ta i betraktning en eller flere målinger av manipulerte variabler i styringsenheten, og/eller en eller flere manipulerte variabler i prediksjonsenheten og/eller i styringsenheten.

I fig. 10 er ikke prosessens matematiske modell tilpasset i ordets egentlige forstand, men avviket (fortrinnsvis filtrert) mellom målingene og prediksjonene for de styrte variablene, benyttes til å korrigere innstillingspunktene for de styrte variablene (C_{GR}). Under disse forhold har denne korreksjonen her blitt vist som en enkel differans: et korrigerende ledd beregnet ved hjelp av tilpasningsenheten OA (som i realiteten her bare er en korreksjonsenhet) subtraheres fra hvert av innstillingspunktene for styrte variabler, og dette gir korrigerte innstillingspunkter C_{GR}', overført til styringsenheten OC. Det er åpenbart at i noen tilfeller kan korreksjonen involvere operasjoner som er mer komplekse enn en subtraksjon, f.eks. en divisjon (i dette tilfellet er det imidlertid mulig å gå tilbake til en subtraksjon ved å betrakte logaritmene av de variabler som behandles). Denne fremgangsmåten kalles vanligvis indre modell-styring (IMC, Internal Model Control).

Hvis det vises til fig. 1, som i form av et diagram viser en krets for kontinuelig syntese av polyetylen (PE), så foregår polymeriseringen av etylen i en sløyfereaktor 10, i suspensjon i et egnet løsemiddel slik som f.eks. heksan. Prosessen er kontinuerlig, dvs. at reagensene injiseres kontinuerlig, og at en del av reaktorens 10 innhold kontinuerlig tappes av. En sirkulasjonspumpe (ikke vist) sikrer homogenitet i reaktorens 10 innhold.

Reagensene som innføres i reaktoren, er etylen «Et», hydrogen «Hy» og buten «Bt» (jamfør henvisningstall 11). En katalysator injiseres også kontinuerlig. Det er viktig å ha god styring over konsentrasjonene av reagensene i reaktoren, fordi egenskapene til PE-harpiksen bestemmes hovedsakelig av konsentrasjonsforholdene Hy/Et og Bt/Et.

Polymeriserings-temperaturen i reaktoren er en ytterligere parameter som påvirker PE-harpiksens egenskaper. Siden polymeriserings-reaksjonen er svært eksotermisk, må reaktorens temperatur styres ved bruk av en kjølekrets 12.

Reaktoren 10 inneholder derfor under drift løsningsmiddel, polymer og reagenser som ikke har reagert ennå, samt katalysator. Innholdet i reaktoren tappes av kontinuerlig gjennom uttappingsrøret 14. Dette uttappings-innholdet går inn i en «stripper» STP 16, som atskiller PE-polymeren og fluidene (løsningsmiddelet og reagensene). Disse fluidene fordampes ved hjelp av injisering av vanndamp, og fjernes til en kondensator CD 18. I denne sistnevnte kondenseres løsnings-

middelet på nytt, før det resykles. Reagensene som er lettere, atskilles fra løsningsmiddelet, og resykles også. En gassfase-kromatograf GC (20) plassert på utgangen fra kondensatoren 18, tillater at reagens-konsentrajonene Hy/Et og Bt/Et kan bestemmes.

Polymer som fjernes fra stripperen 16, konsentreres i en sentrifuge CFG 22, og tørkes så i en tørker SHLF 24 av fluidisert sjikt-type, før den sendes til avslutning for granulering der. Prøver tas ved tørkerens 24 utgang for å måle egenskapene til harpiksen i den: krystallinitet (målt via spesifikk densitet «SD») og reologiske egenskaper (smelte-indeks (MI) eller smelte-strømningsindeks (MFI) og smelte-viskositet «μ_2», målt i en kapilærstrømning under et skjær på 100 s^{-1}).

Denne PE-synteseprosessens dynamikk er langsom og kompleks:

- Sløyfereaktoren 10 oppfører seg som en perfekt blandet reaktor. Følgelig vil enhver endring i mate-strømningshastigheten for en av reagensene, bare bli gradvis reflektert i denne reagensens konsentrasjon i reaktoren. Dette er fordi den nye strømningshastigheten må blandes med hele reaktorens 10 volum for å bringe den til ny likevekts-konsentrasjon.
- Målingen av konsentrasjonen av reagensene foretas av en gassfase-kromatograf 20; dette er et ikke-kontinuerlig instrument som arbeider i suksessive trinn: en gassprøve tas, analyse og deretter utledning av resultatene. Det er derfor en dødtid (fra 5 til 15 min.) mellom forandringene i konsentrasjon og målingen av dem.
- Egenskapene ved den polymer som fremstilles, avhenger i ethvert øyeblikk av reagensenes konsentrasjoner. Enhver forandring i disse konsentrasjonene påvirker derfor øyeblikkelig egenskapene ved den polymer som fremstilles. På den annen side forandrer gjennomsnitts-egenskapene seg i reaktoren bare gradvis, fordi nylig produsert polymer må blande seg med den polymer som allerede er tilstede i reaktoren 10 (tilstedeværelses-tid: $\pm$ 2 h).
- Når polymeren tappes av fra reaktoren 10, opplever den på nytt en rekke blandinger i de forskjellige utstyrsenheter (STP, CFG og SHLF), i den hensikt å tørke den (tilstedeværelses-tid: $\pm$ 2 h). Prøver av polymer blir så tatt, og analysert av anleggs-laboratoriet. Resultatene av disse analysene vil derfor bare kunne meddeles til produsenten etter en ny dødtid, som kan være betraktelig $\pm$ 2 h).

Modelldannelse av prosessen med hjelp av en LAG-funksjon

I samsvar med fremgangsmåten ifølge oppfinnelsen utføres den dynamiske modelldannelse av en kontinuerlig synteseprosess ved å ty til antakelser om perfekte blandinger og rene forsinkelser. De perfekte blandingene uttrykkes som en ligning ved hjelp av en funksjon som er velkjent for ingeniører, «LAG»-funksjonen, eller et lavpassfilter (av første orden); denne funksjonen er lineær og enkelt programmerbar.

Den defineres på følgende måte: y = LAG (u, τ)

(kjent som «LAG av u i løpet av τ») som er løsningen av differensialligningen

$$u = \tau \cdot \frac{dy}{dt} + y$$

hvor argumentene u og τ varierer med tid.

Denne ligningen kan løses numerisk (også i sann tid) ved hjelp av en algebraisk ligning av første orden, som har de følgende variabler som argumenter:

- prøvetakingsperioden «T» (eller forløpt tid siden siste iterasjon).
- tilstedeværelsestiden (eller «tidskonstanten») «τ» i øyeblikket «T».
- tilstandsvariabelen «y» i det foregående øyeblikk «t-T».
- styringsvariabelen «u» i nåværende øyeblikk «t» (u og τ representerer i realiteten de målte eller beregnede verdier i øyeblikket «t» for variablene «u» og «τ», som antas å ha vært konstante gjennom det forutgående intervall «T»).

T er fortrinnsvis liten i forhold til τ (f.eks. minst 10 ganger mindre), for å øke beregningens nøyaktighet.

Løsningen av den ovenstående ligningen kan f.eks. beregnes ved hjelp av følgende formel:

$$y(t) = y(t-T) \cdot e^{-T/t(t)} + u(t) \cdot 1\text{-}e^{-T/t(t)})$$

eller enklere (omtrentlig):

$$y(t) = \frac{y(t-T) + u(t) \cdot \frac{T}{\tau(t)}}{1 + \frac{T}{\tau(t)}}$$

Modelldannelse av prosessen ved hjelp av LAG-funksjonen baserer seg på de følgende teoremer:

La det være en perfekt blandet reaktor (CSTR) med volum V_R. Denne mates med forskjellige bestanddeler (reagenser eller inerte substanser), innbefattende reagensen «x» (strømningshastighet inn Fx_{IN}) som har egenskapen «Px_{IN}» på inngangen. Strømningshastigheten ut «F_{OUT}» (uttapping) måles også.

Teorem 1: Anvendelse av LAG-metoden ved beregning av en massebalanse:

I hvert øyeblikk er massen «Mx_R» av en bestanddel «x» i en perfekt blandet reaktor (CSTR) lik LAG av produktet av inngangs-massestrømmen «Fx_{IN}» og en tid «τ_X», i løpet av denne samme tiden «τ_X»:

$Mx_R = LAG\ (Fx_{IN} \cdot \tau_X,\ \tau_X)$ (i kg)

Tiden «τ_X» er «tilstedeværelsestiden for «x»; dens verdi er massen av bestanddel Mx_R delt på summen av de «utgående» massestrømmer (mengde for brukt ved reaksjonen «FRx», strømningshastighet som forlater reaktoren «Fx_{OUT}», osv.).

$\tau_X = Mx_R/Fx_{OUT} + FRx + osv.)$ (i h)

Dette teoremet gir således en nøyaktig metode for dynamisk beregning (også i sann tid) av konsentrasjonene i en perfekt blandet reaktor. I realiteten har, hvis «V_R» er reaktorens volum, konsentrasjonen «Cx_R» av bestanddelen «x» verdien

$Cx_R = Mx_R/V_R$ (i kg/m^3)

Siden den totale volumstrømmen av «FV_{OUT}» som forlater reaktoren, er kjent, er reaktorens tilstedeværelsestid «τ_R» definert:

$\tau_R = V_R/FV_{OUT}$

Massestrømmen «Fx_{OUT}» for bestanddel «x» som forlater reaktoren (avtapping) er således:

$Fx_{OUT} = Mx_R/\ \tau_R$

Det skal bemerkes at hvis «x» er en inert substans (som ikke gjennomgår noen reaksjon, og forlater reaktoren bare ved avtapping), så gir dette:

$\tau_X = \tau_R$

I det hyppige tilfelle hvor reaksjonshastigheten for «x» er proporsjonal med dens konsentrasjon Cx_R, med en proporsjonalitetsfaktor Rx, gir dette videre:

$FRx = R_X \cdot Mx_R$, og følgelig

$\tau_X = 1/ (R_X + 1/\tau_R)$

Teorem 2: Anvendelse av LAG-metoden ved beregning av en egenskap ved en blanding:

La det være en egenskap «Px» ved en bestanddel, som adlyder den lineære blandingsloven:

$Px_{1+2} = w_1 \cdot Px_1 + w_2 \cdot Px_2$

hvor w_1 og w_2 er masse-fraksjonene for egenskap Px_1 og Px_2 (med $w_1 + w_2 = 1$).

I hvert øyeblikk er egenskapen Px_R i en perfekt blandet reaktor (CSTR) lik LAG av egenskapen ved inngangen Px_1, under en tilstedeværelsestid som har verdien masse-forholdet Mx_R som er bestanddelen i reaktoren dividert på den inngående massestrøm (og/eller som fremkommer ved reaksjon) Fx_{IN}:

$Px_R = LAG (Px_{IN}, Mx_R/Fx_{IN})$

Det er således mulig å ta prosessens dynamikk med i beregningen, og å om-beregne dens tidskonstanter kontinuerlig.

Som forklart ovenfor kan de «egnenskaper» som er involvert her, i noen tilfeller ha gjennomgått en matematisk transformasjon som gjør dem lineære (f.eks. kan logaritmen av smelte-indeksen for en polymer betraktes som å adlyde en lineær blandingslov).

Prinsipp for styringen:

Når modellen for synteseprosessen er etablert, er det nødvendig med en algoritme som betegner de nødvendige parametere for styringen av denne prosessen.

Fig. 2 viser et forenklet, generelt diagram over den type avansert styring (avansert prosesstyring eller «APC», Advanced Process Controll) som tas i bruk for polymeriserings-prosessen som er beskrevet ovenfor. Man ser at styrings-systemet innbefatter en kaskade av to algoritmer, hvor denne kaskaden spesielt styrer PID-kontrollerne for reagensmatingens strømningshastigheter.

De to algoritmene i kaskade også kalt hovedalgoritme og slavealgoritme, er begge adaptive, dynamiske algoritmer basert på modeller med opphav i kunnskap om prosessen (i kontrast til empiriske modeller), som er basert spesielt på den styrte prosessens material-balanser og kinetikk. De anvender den på forhånd definerte LAG-funksjonen.

I fig. 3, som viser prinsippet for styringssystemet i sammenheng med den polymeriseringsprosess som er beskrevet ovenfor, ses det at:

- hovedalgoritmen er basert på katalysatorenes karakteristiske ligninger, dvs. ligninger som angir egenskapene ved PE som funksjon av polymeriseringstemperaturen og av reagensenes konsentrasjoner i reaktoren; den gir slavealgoritmen innstillingspunktene for reagensenes konsentrasjoner for å tilfredsstille innstillingspunktene for egenskapene til PE;
- slavealgoritmen er basert på en material-balanse og reaksjonenes kjemiske kinetikk; den gir kontrollerne for mate-strømningshastighet innstillingspunktene for reagensenes strømningshastigheter, som er nødvendige for å tilfredsstille innstillingspunktene for konsentrasjoner, pålagt av hovedalgoritmen, og innstillingspunktet for prosessens produksjonshastighet. Fortrinnsvis beregner den også et antisiperende («feed forward») ledd for innstillingspunktet for temperatur, og forbedrer temperaturstyringen under forandringer i produksjonshastigheten.

Denne typen styring er bare fullstendig nøyaktig dersom modellen er perfekt og tar hensyn til alle mulige perturbasjoner. Generelt er dette ikke tilfelle. Dette er grunnen til at (se fig. 4) den direkte modellen (og den reverserte modellen) generelt tilpasses kontinuerlig ved å sammenligne prediksjonene med målingene av egenskapene. Denne «tilpasningen» av modellen tillater at dens nøyaktighet kan opprettholdes i nærvær av perturbasjoner som ikke er modelldannede, og gjør det således mulig å oppnå en nøyaktigere styring under alle forhold.

Slavealgoritmen

Fig. 6 illustrerer prinsippet for slavealgoritmen:

1. en prediksjonsenhet som benytter en direkte modell av den predikterte prosessen, fra målingene av strømningshastighetene som mater reaktoren, og reagens- og polymer-konsentrasjonene;
2. en tilpasningsenhet sammenligner konsentrasjonene av etylen (Et), hydrogen (Hy) og buten (Bt) målt av en analysator (gasskromatograf), med verdiene som er prediktert av den direkte modellen, for å bestemme tre tilpasningsparametere:

- den spesifikke aktivitet av katalysatoren for etylen «AET», i kg/h polyetylen pr. kg katalysator og pr. kg/cm^3 etylen
- forsterkningsfeilen ved målingen av strømningshastighet av hydrogen «KfHy»
- renheten av buten-matingen «KfBt»;

3. styringsenheten beregner innstillingspunktene for reagensenes mate-strømningshastigheter, fra innstillingspunkter for konsentrasjon, beregnet av hovedalgoritmen, og fra innstillingspunktet for produksjonshastighet; disse innstillingspunktene for strømningshastighet består av en fremovermating (feed forward) basert på den reverserte modellen, og av en tilbakekopling som er proporsjonal med avviket mellom den direkte modellen og innstillingspunktene for konsentrasjon.

For å forstå beregningene som utføres av slavealgoritmen i tilfellet med en prosess for syntese av polyetylen, må det aller først være kjent at det generelt aksepteres at polymeriserings-hastigheten «$VitP_{Et}$» er proporsjonal:

- med konsentrasjonen av upolymerisert ET cEt_R (i kg/m^3),
- med konsentrasjonen av aktiv katalysator i reaktoren cCA_R (i kg/m^3), og
- med en proporsjonalitetsfaktor, en funksjon (som er vanskelig å kvantifisere) av temperaturen, av konsentrasjonene av Hy, av Bt og av sam-katalysator, av nærvær av gifter og lignende. Dette leddet benevnes «katalytisk aktivitet» for etylen A_{Et}. I fravær av en større feilfunksjon (gift og lignende) varierer den relativt lite i løpet av en økt.

$$VitP_{Et} = A_{Et} \cdot cCA_R \cdot cEt_R) \quad (kg/m^3\ h)$$

Hvis V_R er reaktorens volum, er derfor mengden etylen «FpEt» som polymeriserer i reaktoren for hver tidsenhet («polymeriserings-strømningshastighet»):

$$FpEt = VitP_{Et} \cdot V_R \quad (kg/h)$$
$$= A_{Et} \cdot cCA_R \cdot MEt_R$$

hvor MEt_R er massen av etylen i løsning i reaktoren (i kg).

Det er videre kjent at inntakshastigheten for Hy er omtrent 100 ganger langsommere enn for Et og 10 ganger langsommere for Bt. Dette gir:

$$FpHy = A_{Et} \cdot cCA_R \cdot MHy_R/100$$
$$FpBt = A_{Et} \cdot cCA_R \cdot MBt_R/10$$

hvor MHy_R er massen av hydrogen i løsning i reaktoren (i kg), og
MBt_R er massen av buten i løsning i reaktoren (i kg)

Slavemodellen benytter nå de følgende målinger:

FEt_{IN} = mate-strømingshastighet for etylen (monomer) (kg/h)
FSv_{IN} = mate-strømningshastighet for løsningsmiddel (heksan) (kg/h)
FCA_{IN} = mate-strømningshastighet for katalysator (kg/h)
FHy_{IN} = mate-strømningshastighet for hydrogen (transportmiddel) (kg/h)
FBt_{IN} = mate-strømningshastighet for buten (komonomer) (kg/h)

Den benytter også de følgende tilpasningsparametere:

A_{Et} = «katalytisk aktivitet» for etylen
KfHy = forsterkningsfeil ved målingen av hydrogen-matingen
KfBt: = renhet av innmatet buten.

De følgende beregningene utføres sekvensvis, i følgende rekkefølge, med høy hyppighet (tidsintervallet som atskiller hver iterasjon er lite sammenlignet med den korteste av tilstedeværelsestidene τ_X).

Siden reaktorens volum er konstant, er utgående strømningshastighet pr. volumenhet ekvivalent med inngående strømningshastighet pr. volumenhet (ikke-kompresible fluider). Utgående strømningshastighet pr. volumenhet «Fv_{OUT}» kan derfor beregnes som summen av inngående massestrømmer dividert på den densitet som de har reaktoren

$$Fv_{OUT} = FSv_{IN}/650 + FEt_{IN}/950 + FBt_{IN}/600 \quad (m^3/h)$$

(hvor densitetene er som følger: 650 kg/m^3 for løsningsmiddelet, 950 kg/m^3 for polyetylen, 600 kg/m^3 for buten). Det antas her at all etylen øyeblikkelig omformes til polyetylen, og strømningshastigheten for hydrogen og for katalysator (noen få kg) ignoreres.

Løsningsmiddelet er kjemisk inert, og forlater reaktoren bare ved å tappes ut fra reaktoren. Løsningsmiddelets masse «MSv_R» i reaktoren beregnes ved å anvende teorem 1:

$\tau_R = V_R/FV_{OUT}$ (h) (tilstedeværelsestid i reaktoren)

$MSv_R = LAG\ (FSv_{IN} \cdot \tau_R, \tau_R)$ (kg)

Katalysatoren deaktiveres med en tidskonstant «kd»; massen «MCA_R» av den aktive katalysatoren i reaktoren beregnes som følger:

$\tau_{CA} = 1/(t/\tau_R + kd)$ (h)

$MCA_R = LAG\ (FCA_{IN} \cdot \tau_{CA}, \tau_{CA})$ (kg)

og derfor er konsentrasjonen «cCA_R» av aktiv katalysator i reaktoren:

$cCA_R = MCA_R/V_R)$ (kg/m^3)

Etylen «forlater» reaktoren i uttappings-strømmen og i polymeriserings-reaksjonen. Dens masse i reaktoren «MEt_R» beregnes på følgende måte:

$\tau_{Et} = 1/(1/\tau_R + A_{Et} \cdot cCA_R)$ (h)

$MEt_R = LAG\ (FEt_{IN} \cdot \tau_{Et}, \tau_{Et})$ (kg)

Den «rå» (ukalibrerte) masse av hydrogen i reaktoren «MHy_{RAW}» beregnes på lignende måte:

$\tau_{Hy} = 1/(1/\tau_R + A_{Et} \cdot cCA_R/100)$ (h)

$MHy_{RAW} = LAG\ (FHy_{IN} \cdot \tau_{HY}, \tau_{HY})$ (kg)

Massen «MHy_R», korrigert for å ta hensyn til forsterkningsfeilen ved målingen av hydrogen-matingen, er:

$MHy_R = KfHy \cdot MHy_{RAW}$ (kg)

Forholdet Hy: Et i reaktoren er derfor:

$HyEt_R = MHy_R/MEt_R$

Massen av «rå» buten «MBt_{RAW}» beregnes på lignende måte:

$\tau_{Bt} = 1/(1/\tau_R + A_{Et} \cdot cCA_R/10)$ (h)

$MBt_{RAW} = LAG\ (FBt_{IN} \cdot \tau_{Bt}, \tau_{Bt})$ (kg)

Massen «MBt_R», korrigert for å ta hensyn til renheten av buten-matingen, er:

$MBt_R = KfBt \cdot MBt_{RAW}$ (kg)

Forholdet Bt:Et i reaktoren er derfor:

$BtEt_R = MBt_R/MEt_R$

Som allerede påvist, er polymeriserings-strømningshastigheten «FpEt» (øyeblikkelig produksjonshastighet):

$FpEt = A_{Et} \cdot cCA_R/MEt_R$ (kg/h)

Siden polymeren er inert, og ikke gjennomgår noen reaksjon, er dens masse i reaktoren «MPE_R»:

$MPE_R = LAG\ (FpEt \cdot \tau_R, \tau_R)$ (kg)

Strømningshastigheten for polymer som forlater reaktoren «FPE_{OUT}» er derfor:

$FPE_{OUT} = MPE_R/\tau_R$ (kg/h)

Tilpasning av slavemodellen

Tilpasningsblokken anvender en analysator (f.eks. en gasskromatograf «GC») for å oppnå målingene av konsentrasjonene i reaktoren av etylen «cEt_{GC}», av hydrogen «cHy_{GC}» og av buten «cBt_{GC}» (f.eks. uttrykt i kg/m^3). Disse målingene sammenlignes med de verdier som er prediktert av den direkte modellen, for å bestemme de følgende tre tilpasningsparametere:

- den spesifikke aktivitet av katalysatoren for etylen «AEt», i kg/h polyetylen pr. kg katalysator og pr. kg/m^3 etylen.
- forsterkningsfeilen ved målingen av hydrogen-strømningshastighet «KfHy».
- renheten av buten-matingen «KfBt».

Gasskromatografen levere prøve-målinger med en forsinkelse på omtrent 6 minutter.

Beregningen av den spesifikke aktivitet for etylen «AEt» følger av likhetene nedenfor:

$cEt_{GC} = cEt_R$ (kg/m^3)

$= MEt_R/V_R$

$= LAG\ (FEt_{IN} \cdot \tau_{Et}, \tau_{Et})/V_R$

$= LAG\ (FEt_{IN}/\ (1/\tau_R + A_{Et} \cdot cCA_R), \tau_{Et})\ /V_R$

$\Rightarrow A_{Et}'' = (FEt_{IN}/LEAD\ \ (cEt_{GC} \cdot V_R, \tau_{Et})\ -1/\tau_R)\ /cCA_R$

Siden målingen cEt_{GC} er samplet og inneholder støy, er det ikke ønskelig å finne den i en LEAD; det er derfor en foretrukket løsning å anvende:

$A_{Et}' = LAG\ \ (A_{Et}'', \tau_{Et})$

$\approx LAG\ \ (FEt_{IN}/cCA_R, \tau_{Et})\ /\ (cEt_{GC} \cdot V_R)\ -\ 1/LAG\ \ (\tau_R \cdot cCA_R, \tau_{Et})$

Det tas hensyn til forsinkelsen på 6 minutter ved målingen av cEt_{GC} ved å innføre to LAG-er på tre minutter hver, i modellens verdier, og den endelige formel oppnås:

$A_{Et} = LAG\ \ (FEt_{IN}/cCA_R, \tau_{Et}, 3/60, 3/60)\ /\ (cEt_{GC} \cdot V_R)$

-1/LAG ($\tau_R \cdot cCA_R$, τ_{Et}, 3/60, 3/60)

Beregningen av økningen i hydrogen-strømningshastigheten «KfHy» følger av likhetene nedenfor:

$cHy_{GC} = cHy_R$ (kg/m^3)

$= MHy_R/V_R$

$= KfHy \cdot MHy_{RAW}/V_R$

$\Rightarrow KfHy = cHy_{GC} \cdot V_R/MHy_{RAW}$

Man tar hensyn til forsinkelsen på 6 minutter ved målingen av cHy_{GC} ved å innføre to LAG-er i rekke på 3 minutter hver, i modellens verdi, og den endelige formel oppnås:

$\Rightarrow KfHy = cHy_{GC} \cdot V_R/LAG\ (MHy_{RAW}, 3/60, 3/60)$.

På samme måte som for KfHy beregnes korreksjonsparameteren for buten-renhet «KfBt»:

$KfHy = cBt_{GC} \cdot V_R/LAG\ (MBt_{RAW}\ 3/60, 3/60)$

Styringsalgoritmen har som inngangsparametere:

- innstillingspunktene for konsentrasjon som beregnes ved hjelp av hovedalgoritmen; nærmere bestemt innstillingspunktene for konsentrasjonsforholdene cHY_R/cEt_R «$HyEt_{SP}$» og cBt_R/cEt_R «$BtEt_{SP}$» (i kg/kg)
- innstillingspunktet for prosessens produksjonshastighet $FpEt_{SP}$, fastsatt av operatøren
- innstillingspunktet for etylen-konsentrasjonen cEt_{SP}, fastsatt av operatøren; og
- konsentrasjonene som beregnes av modellen.

Den beregner innstillingspunktene for mate-strømningshastighetene for reagensene FET_{SP}, FCA_{SP}, FHY_{SP} og FBt_{SP}. Forskjellige algoritmer kan benyttes, innbefattende MBPC (Model Based Predective Control, modell-basert, prediktiv styring). De kan vanligvis finnes å bestå av en fremovermating basert på den reverserte modellen, og en tilbakekopling som er proporsjonal med avviket mellom den direkte modellen og innstillingspunktene for konsentrasjon.

<u>Styring av etylen-matingen:</u>

Fremovermating: verdi for å holde den aktuelle konsentrasjon ved like, basert på inversjon av den stasjonære verdi av følgende ligning:

$MEt_R = LAG\ (FEt_{IN} \cdot \tau_{Et}, \tau_{Et})$ (kg)

$\Rightarrow \quad FEt_{FF} = MEt_R/\tau_{Et}$

Tilbakekopling: proporsjonal med avviket mellom innstillingspunktet cEt_{SP} og modellen

$FEt_{FB} = 5 \cdot (cEt_{SP} \cdot V_R - MEt_R)$

Innstillingspunkt:

$FEt_{SP} = FEt_{FF} = FEt_{FB}$

Styring av katalysator-matingen:

Fremovermating: verdi for å holde den aktuelle konsentrasjonen vedlike, basert på inversjon av den stasjonære verdi av følgende ligning:

$MCA_R = LAG\ (FCA_{IN} \cdot \tau_{CA}, \tau_{CA})$ (kg)

$\Rightarrow \quad FCA_{FF} = MCA_R/\tau_{CA}$

Tilbakekopling: proporsjonal med avviket mellom innstillingspunktet $FpEt_{SP}$ og modellen, i samsvar med følgende formel:

$FpEt = A_{Et} \cdot MEt_R \cdot MCA_R/V_R$

$\Rightarrow \quad FCA_{FB} = 5 \cdot (FpEt_{SP}/ (A_{Et} \cdot MEt_R/V_R) - MCA_R)$

Innstillingsverdi:

$FCA_{SB} = FCA_{FF} + FCA_{FB}$

Styring av hydrogen-matingen:

Fremovermating: verdi for å holde den aktuelle konsentrasjon vedlike, basert på inversjon av den stasjonære verdi av følgende ligning:

$MHy_R = LAG\ (FHy_{IN} \cdot \tau_{Hy}, \tau_{Hy})$ (kg)

$\Rightarrow \quad FHY_{FF} = MHy_{RAW}/\tau_{Hy}$

Tilbakekopling: proporsjonal med avviket mellom innstillingspunktet for forholdet $HyEt_{SP}$ og modellen.

$FHy_{FB} = 5 \cdot (HyEt_{SP} \cdot MEt_R - MHy_R)$

Innstillingsverdi:

$FHy_{SP} = FHy_{FF} + FHy_{FB}$

Styring av buten-matingen (lignende som for hydrogen):

$FBt_{FF} = MBt_{RAW}/\tau_{Bt}$

$FBt_{FB} = 5 \cdot (BtEt_{SP} \cdot MEt_R - MBt_R)$

$FBt_{SP} = FBt_{FF} + FBt_{FB}$

De foranstående ligningene oppsummerer slavealgoritmens ligninger. De utføres hvert 10 sekund av den digitale styringen og ordre-systemet (SNCC).

Hovedalgoritmen

Fig. 5 illustrerer prinsippet ved hovedalgoritmen:

1. dens prediksjonsenhet (basert på en direkte modell) predikterer de viktigste egenskapene ved polymeren (MI og SD); for dette formål benytter den målingen av polymeriserings-temperaturen, prediksjonene for konsentrasjonene i reaktoren, som leveres av slavemodellen, og tilstedeværelsestidene for PE i de forskjellige enhetene av utstyret;
2. dens tilpasningsenhet sammenligner målingene av MI og SD, som utføres (også ved utgang fra tørkeren) enten av målelaboratoriet for hver annen time eller ved hjelp av en kontinuerlig analysator, med verdiene som predikteres av den direkte modellen, for å bestemme de to tilpasningsparametrene som er korreksjonsparametere, multiplikative i tilfellet med MI, og aditive i tilfellet med SD;
3. dens styringsenhet (basert på en reversert modell) beregner innstillingspunktene for konsentrasjonene i reaktoren (forholdene Hy:Et og Bt:Et) ut fra innstillingspunktene for MI og for SD, som operatøren leverer. Slik som i tilfellet med slavealgoritmen utgjøres denne beregningen av en fremovermating basert på den direkte modellen, og en tilbakekopling som er proporsjonal med avviket mellom den direkte modellen og operatørens innstillingspunkter.

For en gitt katalysator er harpiksens egenskaper i en stabil tilstand funksjoner av polymeriserings-temperaturen og av reagensenes konsentrasjoner. Blant de forskjellige statiske ligninger som inngår i litteraturen, er de følgende ligninger valgt:

$\log(MI) = a_0 + a_1 \cdot T^\circ + a_2 \cdot \log (Hy/Et) + a_3 \cdot Bt/Et$

$SD = b_0 + b_1 \cdot T^\circ + b_2 \cdot (Bt/Et)^{b3} + b_4 \cdot \log (MI)$.

Parameterne a_0 til a_3 og b_0 til b_4 oppnås ved identifikasjon i en stabil tilstand, for et antall harpikser som fremstilles med samme katalysator.

Videre kan alle de forskjellige utstyrsenheter som påmøtes av polyetylen inntil det tidspunkt hvor dets egenskaper blir målt (reaktor, stripper, sentrifuge og så tørker) inngå i, i en første aproksimasjon, perfekt blandede reaktorer.

Hovedalgoritmen benytter følgende målinger som inngangsparametere:

T_R	=	temperatur i reaktoren	(°C)
V_{stp}	=	væskevolum i stripperen (oppnådd ved nivåmåling)	(m^3)
MI_{MESS}	=	måling av MI (smelte-indeks)	
SD_{MESS}	=	måling av SD (spesifikk densitet)	

og de følgende beregninger utføres av slavealgoritmen:

FpEt	=	øyeblikkelig utmating av polymer (produksjonshastighet)	(kg/h)
FPE_{OUT}	=	strømningshastighet av PE som forlater reaktoren	(kg/h)
MPE_R	=	masse av PE i reaktoren	(kg)
$HyEt_R$	=	forholdet mellom Hy og Et i reaktoren	(kg/kg)
$BtEt_R$	=	forholdet mellom Bt og Et i reaktoren	(kg/kg)

De rå, øyeblikkelige verdier (før tilpasning) av SD og av loaritmen til MI («lMI») beregnes ved hjelp av:

$$SD_{INS} = b_0 + b_1 \cdot T_R + b_2 \cdot \log (BtEt_R)^{b3} + b_4 \cdot lMI_{INS}$$

$$lMI_{INS} = a_0 + a_1 \cdot T_R + a_2 \cdot \log (HyEt_R) + a_3 \cdot BtEt_R$$

De rå, gjennomsnittlige egenskaper ved utløpet fra reaktoren beregnes ved å anvende teorem 2:

$$lMIr = LAG\ (lMI_{INS}, MPE_R/FpEt)$$

$$SDr = LAG\ (SD_{INS}, MPE_R/FpEt)$$

Effektivt gjelder:

- egenskapene lMI og SD tilsvarer ganske godt en lineær lov for blandinger
- sløyfe-reaktoren kan settes lik en perfekt blandet reaktor
- massestrømmen av PE som «går inn i» (fremkommer i) reaktoren, er effektivt FpEt, mengden PE som polymeriserer i et hvilket som helst øyeblikk (produksjonshastighet).

Rå egenskaper ved målingen: siden det er kjent at det er omtrent 500 kg PE pr. m^3 i stripperen, og dersom det antas at stripperen er en perfekt blandet reaktor, beregnes de rå egenskapene ved stripperens utløp som følger:

$lMIstp = LAG (lMIr, 500 \cdot Vstp/FPE_{OUT})$

$SDstp = LAG (SDr, 500 \cdot Vstp/FPE_{OUT})$

Siden tilstedeværelses-tiden i sentrifugen er svært kort, kan den ses bort fra.

Tørkeren er en tørker av typen med fluidisert sjikt; den inneholder kontinuerlig omtrent 1400 kg PE. Det kan antas at nivået i stripperen ikke forandrer seg meget, og at strømmen som forlater den, er lik strømmen som går inn i den. Således er strømningshastigheten for PE som går inn i tørkeren, lik FPE_{OUT}. Ved tørkerens utløp, stedet hvor prøven tas for målingen av egenskapen, er det så de følgende rå verdier:

$lMIsh = LAG (lMIstp, 1400/FPE_{OUT})$

$SDsh = LAG (SDstp, 1400/FPE_{OUT})$

Egenskapene etter tilpasning oppnås ved å ta i bruk tilpasningsparametrene KMI (multiplikativ parameter) og kSD (additiv parameter); reaktorutgangens, stripperens og tørkerens egenskaper etter tilpasning er derfor:

$MIr_c = kMI \cdot 10^{lMIr}$

$SDr_C = kSD + SDr$

$MIstp_C = kMI \cdot 10^{lMIstp}$

$SDstp_C = kSD + SDstp$

$MIsh_C = kMI \cdot 10^{lMIsh}$

$SDsh_C = ksD + SDsh$

<u>Tilpasning av hovedalgoritmen:</u>

Målinger av egenskaper tar en viss tid for utførelse ± 5 min med en in-line analysator, ± 1 h med utførelse ved hjelp av laboratoriet). For å muliggjøre at tilpasningsparametrene kan beregnes, er det derfor nødvendig å resynkronisere (forskyve i tid) de rå prediksjoner fra modellen med målingene. Dette kan f.eks. gjøres ved hjelp av et skiftregister (her kalt «DELAY function»):

$lMI_{DEL} = DELAY (lMIsh, \tau_{MI})$

$SD_{DEL} = DELAY (SDsh, \tau_{SD})$

med τ_{MI} og τ_{SD} = ± 5 min eller ±1 h, i henhold til hvorvidt målingen utføres av en kontinuerlig analysator eller av laboratoriet.

Ved hver ny måling av MI eller av SD omberegnes den rå tilpasningsparameteren kMI' eller kSD' ved å sammenligne den resynkroniserte, rå modellverdien med den målte verdien:

$kMI' = \log (MI_{MES}) - lMI_{DEL}$

$kSD' = SD_{MES} - SD_{DEL}$

Disse rå verdiene filtreres for å dempe de hurtige reaksjonene som de eventuelle perturbasjonene (støy) i målingene kan virke inn på prosessen med:

$kMI = LAG (kMI', \pm 1\ h)$

$kSD = LAG (kSD' \pm 1\ h)$

Styringsenhet:

Styringsenheten har som innstillingspunkter verdiene MI_{SP} og SD_{SP}, inntastet av operatøren. Han beregner innstillingspunktene for forholdene mellom konsentrasjonene i reaktoren, $HyEt_{SP}$ og $BtEt_{SP}$, som er nødvendige for å oppnå hurtig de ønskede egenskaper MI_{SP} og SD_{SP}. Denne beregningen foretas i to trinn:

1. ut fra innstillingspunktene MI_{SP} og SD_{SP} som operatøren leverer, og ut fra verdiene etter tilpasning av MI og av SD i de forskjellige utstyrsenhetene, beregner styringsenheten innstillingspunktene MIi_{SP} og SDi_{SP} for den øyeblikkelige utmatingen. Disse øyeblikkelige innstillingspunktene består av en fremovermating og av en tilbakekopling som er proporsjonal med avviket mellom den direkte modellen og operatørens innstillingspunkter;
2. innstillingspunktene for konsentrasjonsforholdene $HyEt_{SP}$ og $BtEt_{SP}$ beregnes så ved å invertere den statiske ligningen som benyttes ovenfor for beregning av den øyeblikkelige verdi av MI og av SD.

Innstillingspunkter for de øyeblikkelige egenskapene: tørkerutgangsegenskapene sammenlignes med egenskapenes innstillingspunkter for å bestemme de ønskelige innstillingspunkter for egenskapene ved stripperens utløp (sentrifugen ses bort fra):

$MIstp_{SP} = 10^{(\log (MISP) + 0,1 \cdot (\log (MISP) - \log (MIshC)))}$

$SDstp_{SP} = SD_{SP} + 0,1 \cdot (SD_{SP} - SDsh_C)$

På tilsvarende måte beregnes de ønskede innstillingspunkter ved reaktorens utløp, ut fra avviket mellom disse stripperutløps-innstillingspunktene og de kalibrerte verdiene ved stripperen:

$$MIr_{SP} = 10^{(\log(MIstpSP) + 0,5 \cdot (\log(MIstpSP) - \log(MIstpC)))}$$

$$SDr_{SP} = SDstp_{SP} + 0,5 \cdot (SDstp_{SP} - SDstp_C)$$

Endelig beregnes de ønskede innstillingspunkter for den øyeblikkelige utmatingen, ut fra avviket mellom disse reaktorutløps-innstillingspunktene og de tilsvarende kalibrerte verdiene:

$$MIi_{SP} = 10^{(\log(MIrSP) + 2 \cdot (\log(MIrSP) - \log(MIrC)))}$$

$$SDSi_{SP} = SDr_{SP} + 2 \cdot (SDr_{SP} - SDr_C)$$

Innstillingspunkter for konsentrasjonsforholdene: innstillingspunktene for konsentrasjonsforholdene $HyEt_{SP}$ og $BtEt_{SP}$ oppnås ved å invertere den statiske ligningen som benyttes ovenfor for beregningen av øyeblikkelig verdi av MI og av SD, ved å substituere i MI- og SD-leddene de ønskede innstillingspunkter for den øyeblikkelige utmatingen, og ved å anvende tilpasningsparameteren.

Med start fra:

$$\log(MIi_{SP}/kMI) = a_0 + a_1 \cdot T_R + a_2 \cdot \log(HyEt_{SP}) + a_3 \cdot BtEt_R$$

$$SDi_{SP} - ksD = + b_0 + b_1 + T_R + b_2 \cdot (BtEt_{SP})^{b3} + b_4 \cdot IMI_{INS}$$

oppnår man:

$$a_2 \cdot \log(HyEt_{SP}) = \log(MIi_{SP}/kMI) - (a_0 + a_1 \cdot T_R + a_3 \cdot BtEt_R)$$

som gir:

$$HyEt_{SP} = 10^{((\log(MIiSP/kMI) - a0 - a1 \cdot TR - a3 \cdot BtEtR) / a2)}$$

og

$$b_2 \cdot (BtEt_{SP})^{b3} = SDi_{SP} - kSD - (b_0 + b_1 \cdot T_R + b_4 \cdot IMI_{INS})$$

som gir:

$$BtEt_{SP} = ((SDi_{SP} - kSD - b_0 - b_1 + T_R - b_4 \cdot Lmi_{INS}) / b_2)^{1/b3}$$

De ovenstående ligninger oppsummerer ligningene i hovedalgoritmen. De utføres for hver 30 sekunder ved hjelp av SNCC.

Med denne prosessen er det mulig å styre polymeriseringen med stor nøyaktighet. Spesielt:

- opprettholdes de styrte egenskapene (MI og SD) så nær som mulig opptil de ønskede verdier, med minimal spredning

- utføres forandringene i kvalitet (og følgelig i MI- og SD-egenskaper) med hurtighet og nøyaktighet
- utføres polymeriserings-oppstarting og -stopping, samt forandringer i prosessens produksjonshastighet på en hurtigere måte, mens MI og SD holdes svært nær de ønskede verdier.

Selv om styrings-fremgangsmåten ifølge oppfinnelsen er presentert med hjelp av en prosess for syntese av polyetylen ved kontinuerlig polymerisering av etylen, skal det forstås at styringsmetoden vil være effektiv generelt for andre syntheseprosesser, og spesielt for de prosesser som oppviser en eller flere av de følgende egenskapler:

- en flervariabel styring er nødvendig fordi et antall variabler påvirker mengden av egenskaper som skal reguleres;
- prosessens dynamikk er langsom: blandinger i serier, lange dødtider;
- målingene av egenskaper foregår med prøvetaking med lav hyppighet og/eller med støy;
- styringen må være dynamisk, dvs. gyldig uansett prosessens produksjonshastighet, samt gjennom forandringer i produksjonshastighet og i kvalitet (egenskaper) for det produkt som skal syntetiseres;
- det er fordelaktig å estimere noen variabler som ikke måles direkte.

For å kunne implementeres enkelt med de teknikker som er fremvist her, er det tilstrekkelig at:

- prosessens statiske ligninger er kjent (de er ofte kjent i det minste i en viss grad, ellers kan ikke prosessen styres);
- prosessens dynamikk kan tilnærmes ved bruk av perfekte blandinger og dødtider;
- de nødvendige målinger er tilgjengelige og har tilstrekkelig kvalitet (spesielt reagensenes strømningshastigheter og de strømningshastigheter som går gjennom de angjeldende lagringsbeholdere).

Den spesielle anvendelse av LAG-funksjonen som er beskrevet ovenfor, spesielt i teoremene 1 og 2, kan naturligvis utvides til styringsmetoder som er basert på en annen struktur enn den som er gjennomgått, som innbefatter en hovedalgoritme og en slavealgoritme som er forskjellige.

Den kan f.eks. anvendes i en styrt metode som omfatter bare en eneste algoritme.

Eksempler:

8 forsøk med syntese av polyetylen (PE) av 4 forskjellige typer (definert ved hjelp av MI, SD, osv.) ble utført, henholdsvis ved anvendelse av en konvensjonell styrings-fremgangsmåte og ved anvendelse av fremgangsmåten ifølge oppfinnelsen. Tabellen nedenfor oppsummerer de resultater som ble funnet på grunnlag av mange målinger av smelte-indeksen for de 8 oppnådde polymerer. Cpk betegner sentrert kapabilitetsverdi (centred capability value) for prosessen.

PE type	Konvensjonell styring		Styring i samsvar med oppfinnelsen	
	Standard-avvik	Cpk	Standard-avvik	Cpk
1	0,127	0,909	0,059	2,202
2	-	0,61	-	2,0
3	-	0,48	-	1,88
4	-	0,64	-	1,09

Det er funnet at kapabilitetsverdien Cpk mer enn dobles ved anvendelse av fremgangsmåten ifølge oppfinnelsen, hvilket viser at egenskapene bare er omtrent halvparten så spredt og/eller bedre sentrert i forhold til de pålagte innstillingspunktene.

Tabell over anvendte forkortelser

a_I	parametere for den statiske ligning for MI (I = 0 til 3)	
b_I	parametere for den statiske lingning for SD (I = 0 til 4)	
A_{Et}	katalytisk aktivitet for etylen	(m^3 kg^{-1} h^{-1})
CX_{GC}	konsentrasjon av «x» oppnådd ved måling fra analysatoren	(kg/m^3)
CX_R	konsentrasjon av «x» i reaktoren	(kg/m^3)
CX_{SP}	innstillingspunkt for konsentrasjonen av «x» i reaktoren	(kg/m^3)
Fpx	massestrøm for polymerisering av «x» (produksjonshastighet)	(kg/h)
FV_{OUT}	volumstrøm som går ut av reaktoren	(m^3/h)
Fx_{IN}	massestrøm av «x» som går inn	(kg/h)
Fx_{OUT}	massestrøm av «x» som går ut	(kg/h)
Kd	deaktiverings-konstant for katalysatoren	(l/h)
KfBt	korrigerende (tilpasnings-) parameter for buten	
KfHy	korrigerende (tilpasnings-) parameter for hydrogen	
kMI	korrigerende (tilpasnings-) parameter for MI	
ksD	korrigerende (tilpasnings-) parameter for SD	
LAG (,)	lavpass-filterfunksjon av første orden	
MI_{MES}	måling av MI (smelte-indeks)	
MIy	rå (ukalibrert) MI i «y»	
MIy_C	kalibrert MI (med tilpasning) i «y»	
MIy_{SP}	(kalibrert) innstillingspunkt for MI for «y»	
SD_{MES}	måling av SD (standard densitet)	
SD_y	rå (ukalibrert) SD (standard densitet) i «y»	
SDy_C	kalibrert SD (med tilpasning) i «y»	
SDy_{SP}	(kalibrert) innstillingspunkt for SD for «y»	
Mx_{RAW}	rå (ukalibrert) masse av «x» i reaktoren	(kg)
Mx_y	kalibrert masse av «x» (med tilpasning) i «y»	(kg)
R_X	reaktivitet av x i reaktoren	
V_y	volum av «y»	(m^3)
τ_R	tilstedeværelses-tid i reaktoren	(h)
τ_X	tilstedeværelses-tid for «x» i reaktoren	(h)
	«x» kan representere de følgende bestanddeler:	
Bt	buten	
CA	katalysator	
Et	etylen	
Hy	hydrogen	
Sv	løsningsmiddel	
	«y» kan representere de følgende utstyrsenheter:	
r	polymeriseringsreaktor	
stp	stripper	
sh	tørker (fluidisert sjikt)	

Henvisningstall i figurene

10	polymeriserings-reaktor
11	mating av reagenser (råmaterialer), katalysator, løsningsmiddel
12	kjølekrets
14	uttappings-rør
16	stripper
18	kondensator
20	gassfasekromatograf
22	sentrifuge
24	tørker av fluidisert sjikt-type
25	løsningsmiddel og reagenser som skal resykles
26	polyetylen
27	reagenser som skal resykles
28	løsningsmiddel som skal resykles
30	innstillingspunkter for polymer-egenskap
31	innstillingspunkter for prosessens produksjonshastighet
32	hovedalgoritme
33	slavealgoritme
34	innstillingspunkter for konsentrasjon
35	innstillingspunkter for inngangsstrømning
36	kontrollere (PID) for strømningshastigheter
37	målinger
38	temperaturstyring
39	temperaturfremovermating
40	polymeriserings-dynamikk: kjemisk kinetikk og material-balanse
41	simuleringer av produksjonshastigheten og av forholdene Hy/Et og Bt/Et
42	målinger av temperatur, strømningshastigheter og konsenstrasjoner
43	styrt prosess
44	analyse av en prøve av produktet som er syntetisert ved hjelp av prosessen
51	måling av størrelser som angår prosessens forløp
52	måling av polymer-egenskapene
53	direktemodell; prediksjon av egenskapene ved målingen
54	sammenligning: kalibrering av modellen (tilpasning)
55	styringsalgoritme basert på den reverserte modell (fremovermating + tilbakekopling)
56	innstillingspunkter for variabler relatert til prosessen
57	målinger og innstillingspunkter for innløps-strømningshastigheter
58	måling av temperaturen og prediksjon av konsentrasjonene
59	direkte modell: ligninger for egenskapene som funksjon av konsentrasjonene

60 prediksjon av egenskapene

61 innstillingspunkter for konsentrasjoner i reaktoren

62 måling av innløps-strømningshastighetene

63 måling av konsentrasjonene i reaktoren

64 direkte modell; prediksjon av konsentrasjonene basert på material-balansen

65 konsentrasjons-prediksjoner

66 sammenligning; beregning av tilpasningsparametrene

PATENTKRAV

1. Fremgangsmåte for styring av en syntéseprosess for minst ett kjemisk produkt i et utstyr som omfatter minst en reaktor (R) som kan tas opp i en perfekt blandet reaktor, hvor en eller flere manipulerte variabler (GC) tillater innvirken på prosessens forløp for å gjøre en eller flere variabler relatert til produktets egenskaper og/eller til prosessens forløp, og som benevnes styrte variabler (GR), lik de tilsvarende innstillingspunkter (C_{GR}), hvor fremgangsmåten innbefatter de følgende trinn:

(a) innmating av innstillingspunkter vedrørende de styrte variablene (C_{GR});

(b) beregning ved hjelp av en prediksjonsenhet (OP), av prediksjoner av de styrte variablene (P_{GR}), basert på målinger av prosessens manipulerte variabler (M_{GC});

(c) anvendelse av en styringsenhet (OC) for å beregne innstillingspunktene for prosessens manipulerte variabler (C_{GC}), basert på innstillingspunktene (C_{GR}) og prediksjonene (P_{GR}) for de styrte variablene;

(d) overføring av innstillingspunktene for prosessens manipulerte variabler (C_{GC}) til aktuatorer, eller til styringsenheter som styrer aktuatorene, for å innvirke på prosessens forløp;

hvor prediksjonsenheten (OP) er basert på en matematisk modell av prosessen, kalt en direkte modell (M),

k a r a k t e r i s e r t v e d at prediksjonsenheten (OP) er utformet på en slik måte at massen (M_{XR}) av minst en bestanddel (X) i reaktoren (R) predikteres ved hjelp av ligningen:

$$M_{XR} = LAG\ (F_{XRin} \cdot \tau_X, \tau_X)$$

hvor:

- F_{XRin} er massestrømmen av bestanddelen X som går inn i reaktoren R;
- τ_X er tilstedeværelsestiden for X i reaktoren, hvis verdi er

$$\tau_X = M_{XR} / (\sum Fxdis)$$

hvor:

- M_{XR} betegner den sist beregnede verdi av massen av bestanddelen X tilstede i reaktoren R;
- $\sum$ Fxdis betegner summer av alle massestrømmer Fxdis ved hvilke bestanddelen X forsvinner fra reaktoren R, spesielt ved reaksjon og/eller ved å forlate reaktoren;

- funksjonen y = LAG (u, τ) er løsningen av differensialligningen

$$u = \tau \cdot \frac{dy}{dt} + y$$

beregnet med den øyeblikkelige verdi av u og av τ, og med den sist beregnede verdi av y.

2. Fremgangsmåte ifølge krav 1,
k a r a k t e r i s e r t v e d at innstillingspunktet for minst en styrt variabel (C_{GR}) korrigeres på basis av avviket mellom målingen (M_{GR}) og prediksjonen (P_{GR}) for denne styrte variabelen, for å gjøre styringen effektiv også i nærvær av en feil i prediksjonen av denne styrte variabelen (P_{GR}).

3. Fremgangsmåte ifølge krav 1,
k a r a k t e r i s e r t v e d at modellen (M) av prosessen periodisk tilpasses på grunnlag av avviket mellom prediksjonene (P_{GR}) og målingene (M_{GR}) av de styrte variablene, slik at modellen av prosessen skal levere prediksjoner av de styrte variablene (P_{GR}) som er så nær som mulig opptil målingene av disse variablene (M_{GR}).

4. Fremgangsmåte ifølge krav 3,
k a r a k t e r i s e r t v e d at målingene (M_{GR}) av de styrte variablene bare inngår i den eventuelle tilpasning av modellen av prosessen, og ikke inngår direkte i beregningen av innstillingspunktene for prosessens manipulerte variabler (C_{GC}).

5. Fremgangsmåte ifølge et av kravene 1 til 4, anvendt i en polymeriseringsprosess,
k a r a k t e r i s e r t v e d at den innbefatter ett eller flere av de følgende tilleggstrinn:

- beregning av et innstillingspunkt for temperatur i reaktoren som funksjon av ett eller flere innstillingspunkter for produktets egenskaper; og overføring av dette temperatur-innstillingspunktet til en eller flere aktuatorer som gjør det mulig å modifisere temperaturen i reaktoren;
- beregning av en varme-balanse for reaktoren, basert særlig på temperatur-målinger; anvendelse av denne varmebalansen for å bestemme mengden av polymer syntetisert pr. tidsenhet og/eller katalysator-effektiviteten og/eller konsentrasjonen av minst en reagens i reaktoren;
- beregning av varmemengden som frembringes ved polymeriseringen, ved hjelp av en beregning av mengden av reagens eller reagenser som polymeriserer; bestemmelse ved hjelp av dette, av den varmemengde som må tilføyes eller fjernes for å opprettholde reaktorens temperatur; anvendelse av resultatet av beregningen for å forbedre temperaturstyringen, for å tilpasse så godt som mulig til innstillingspunktet for temperatur, spesielt i tilfelle av forandringer i produksjonshastighet.

6. Fremgangsmåte ifølge et av de foregående krav,
karakterisert ved at egenskapen Px_R ved en bestanddel «x» i reaktoren R, som opptas i en perfekt blandet reaktor, beregnes som følger:

$$Px_R = LAG\ (Px_{IN},\ Mx_R/Fx_{IN})$$

hvor «Px» er en egenskap ved en bestanddel «x», som tilsvarer hovedsakelig den lineære blandingsloven

$$Px_{1+2} = w_1 \cdot Px_1 + w_2 \cdot Px_2,$$

hvor w_1 og w_2 er masse-fraksjonene for to blandede fraksjoner 1 og 2 av egenskapene Px_1 og Px_2;
Px_{1+2} er egenskapen ved x når den forlater reaktoren etter blanding;
Px_{IN} er egenskapen ved bestanddelen «x» når den går inn i reaktoren R;
Mx_R er massen av bestanddelen x i reaktoren R;
Fx_{IN} er massestrømmen for bestanddel x som går inn i reaktoren R.

7. Fremgangsmåte i et av de foregående krav,
karakterisert ved at den innbefatter følgende trinn:

- innmating av innstillingspunkter som angår en eller flere egenskaper ved produktet som skal syntetiseres, i en hovedalgoritme;
- innmating av innstillingspunktet for prosessens produksjonshastighet i en slavealgoritme;
- beregning av innstillingspunktene for konsentrasjon av bestanddelene i reaktoren, med hovedalgoritmen, spesielt som funksjon av innstillingspunktene og av målingene av produktets egenskaper og målinger eller prediksjoner av konsentrasjonene av de forskjellige bestanddeler i reaktoren;
- overføring av innstillingspunktene for konsentrasjon som beregnes av hovedalgoritmen, som inngangsvariabler til slavealgoritmen;
- beregning av strømningshastighets-innstillingspunkter for bestanddelene som går inn i reaktoren, med slavealgoritmen, spesielt som funksjon av innstillingspunktet for prosessens produksjonshastighet, av konsentrasjons-innstillingspunktene og av strømningshastighets-målingene av bestanddelene som går inn i reaktoren, og
- overføring av strømningshastighets-innstillingspunktene som beregnes med slavealgoritmen, til en eller flere aktuatorer for å styre strømningshastighetene for de bestanddeler som går inn i reaktoren,

hvor hovedalgoritmen og/eller slavealgoritmen benyttes i samsvar med et av de foregående krav.

8. Fremgangsmåte ifølge krav 7,

k a r a k t e r i s e r t v e d at hovedalgoritmen innbefatter:

- en prediksjonsenhet basert på en direkte modell av prosessen, som gjør det mulig å levere en prediksjon av egenskapene ved det syntetiserte produktet som en funksjon av målinger og/eller av prediksjoner av konsentrasjonene av bestanddelene;
- en tilpasningsenhet som sammenligner prediksjonene av egenskaper beregnet av prediksjonsenheten, med verdier som faktisk er målt på det syntetiserte produktet, og som utleder tilpasningsparametre fra denne sammenligningen, hvor tilpasningsparametrene inngår som tilleggs-innmatingsverdier i prediksjonsenheten i hovedalgoritmen; og

- en styringsenhet basert på en reversert modell av prosessen, for å beregne som funksjon av innstillingspunktene og av prediksjonene av egenskaper ved produktet som skal syntetiseres, konsentrasjons-innstillingspunkter for slavealgoritmen, hvor tilpasningsparameterne også inngår som ytterligere inngangsverdier i styringsenheten.

9. Fremgangsmåte ifølge et av kravene 7 eller 8,
karakterisert ved at slavealgoritmen innbefatter:
- en prediksjonsenhet basert på en direkte modell av prosessen, og som gir mulighet for levere en prediksjon av konsentrasjonene av en eller flere av bestanddelene, basert på en material-balanse i reaktoren;
- en tilpasningsenhet som sammenligner prediksjonene av konsentrasjoner beregnet ved hjelp av den direkte modellen, med målinger av konsentrasjon, og som utleder tilpasningsparametere fra denne sammenligningen, hvor tilpasningsparametrene inngår som ytterligere innmatingsverdier i prediksjonsenheten i slavealgoritmen; og
- en styringsenhet basert på en reversert modell av prosessen, for å beregne som funksjon av produksjonshastighets-innstillingspunktet, av konsentrasjons-innstillingspunktene som er beregnet av styringsenheten i hovedalgoritmen, og av prediksjonene for konsentrasjon som er beregnet av prediksjonsenheten i slavealgoritmen, innstillingspunktene for strømmene som går inn i reaktoren, hvor tilpasningsparametrene inngår som ekstra innmatingsverdier til styringsenheten i slavealgoritmen.

10. Fremgangsmåte ifølge et av de foregående krav,
karakterisert ved at den er anvendt ved styring av den kontinuerlige syntese av polyetylen ved polymerisering av etylen i minst en reaktor, polymeriseringsreaksjonen foregår i nærvær av en katalysator, og idet en del av innholdet i reaktoren kontinuerlig eller intermitterende fjernes.

11. Fremgangsmåte ifølge krav 9 eller 10,
karakterisert ved at tilpasningsenheten i slavealgoritmen sammenligner målingene av konsentrasjoner av etylen (Et) hydrogen (Hy) og/eller eventuell ko-

monomer (Bt), med verdiene som predikteres av prediksjonsenheten i slavealgoritmen, for å bestemme minst en av de følgende tilpasningsparametere:

a) den spesifikke aktivitet av katalysatoren for etylen «AEt», i kg/h polyetylen pr. kg katalysator og pr. kg/m^3 etylen;

b) økningsfeilen i målingen av strømningshastighet for hydrogen «KfHy»;

c) renheten av komonomer-matingen «KfBt».

12. Fremgangsmåte ifølge et av kravene 1 til 9,
karakterisert ved at den er anvendt ved styring av kontinuerlig syntese av polypropylen ved polymerisering av propylen i minst en reaktor, hvor reagensene innbefatter propylen, hydrogen og/eller en eventuell komonomer, polymeriseringsreaksjonen foregår i nærvær av en katalysator, og en del av reaktorens innhold fjernes kontinuerlig eller intermitterende.

13. Fremgangsmåte ifølge krav 9 og 12,
karakterisert ved at tilpasningsenheten i slavealgoritmen sammenligner målingene av konsentrasjonene av propylen (Pe), hydrogen (Hy) og/eller eventuell komonomer (Et), med verdiene som er prediktert av prediksjonsenheten i slavealgoritmen, for å bestemme minst en av de følgende tilpasningsparametre:

a) den spesifikke aktivitet av katalysatoren for propylen «APe», i kg/h polypropylen pr. kg katalysator og pr. kg/m^3 propylen;

b) økningsfeilen i målingen av hydrogen-strømningshastighet «KfHy»;

c) renheten av komonomer-matingen (KfEt».

14. Fremgangsmåte ifølge krav 8,
karakterisert ved at den er anvendt på en polymeriseringsprosess, hvor

- smelte-indeksen (MI) og/eller standard densitet (SD) for polymeren og/eller dens komonomer-innhold måles periodisk;
- prediksjonsenheten i hovedalgoritmen beregner rå prediksjoner av (MI) og av SD som funksjon av temperaturen i reaktoren, av konsentrasjonen i reaktoren og av tilstedeværelses-tiden i de forskjellige utstyrsenheter i polymeriseringskretsen;

- periodisk utfører tilpasningsenheten i hovedalgoritmen følgende:
  - resynkronisering av de rå prediksjoner av MI og SD, idet det tas hensyn til tiden som er gått mellom målingene foretatt av MI og SD og oppnåelse av resultatet av målingene, og sammenligning av de resynkroniserte, rå prediksjoner av MI og SD, med målingene av MI og SD,
  - beregning av en multiplikativ tilpasningsparameter kMI anvendt i den rå prediksjon av MI for å oppnå en kalibrert prediksjon av MI, og
  - beregning av en additiv tilpasningsparameter kSD som anvendes i den rå prediksjon av SD for å oppnå en kalibrert prediksjon av SD.

15. Fremgangsmåte ifølge et av de foregående krav, karakterisert ved at den er anvendt på en polymeriseringsprosess, hvor en eller flere egenskaper ved polymeren evalueres ved å anvende en teknikk valgt blant nær infrarød spektroskopi (NIR), Fourier-transform infrarød spektroskopi (FTIR) og kjernemagnetisk resonans (NMR).

16. Fremgangsmåte ifølge et av det foregående krav, karakterisert ved at den er anvendt på en polymeriseringsprosess, hvor en eller flere egenskaper ved polymeren evalueres ved å anvende et på forhånd etablert korrelasjonsforhold med resultatene av målinger utført med nær infrarød spektroskopi (NIR) ved et antall forutbestemte bølgelengder, som funksjon av polymerens egenskaper, og valgt mellom 0,8 og 2,6 mm.

17. Anordning for styring av en synteseprosess ifølge ett av kravene 1-16, for et kjemisk produkt i et utstyr for syntese, karakterisert ved at den innbefatter:

- minst en reaktor som kan opptas i en perfekt blandet reaktor;
- minst en anordning for innmating av et innstillingspunkt for en egenskap (CGR) ved produktet som skal syntetiseres, i beregningsenheten;
- minst en anordning for å innmate et innstillingspunkt for produksjonshastighet for produktet som skal syntetiseres (CGC), i beregningsenheten;
- minst en styringsenhet (OC);

- minst en prediksjonsenhet (OP);
- minst en anordning for å påtrykke en styrings-variabel (CGC) på en egnet aktuator.

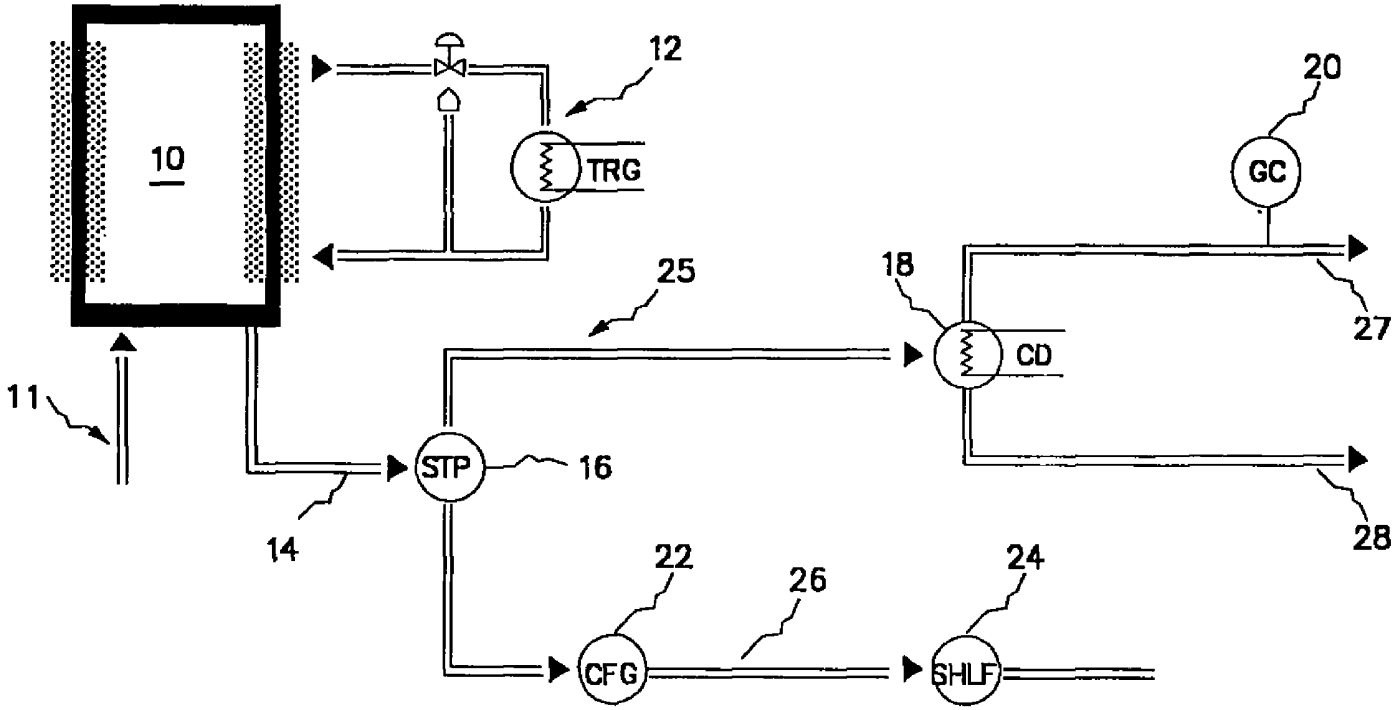


Fig 1

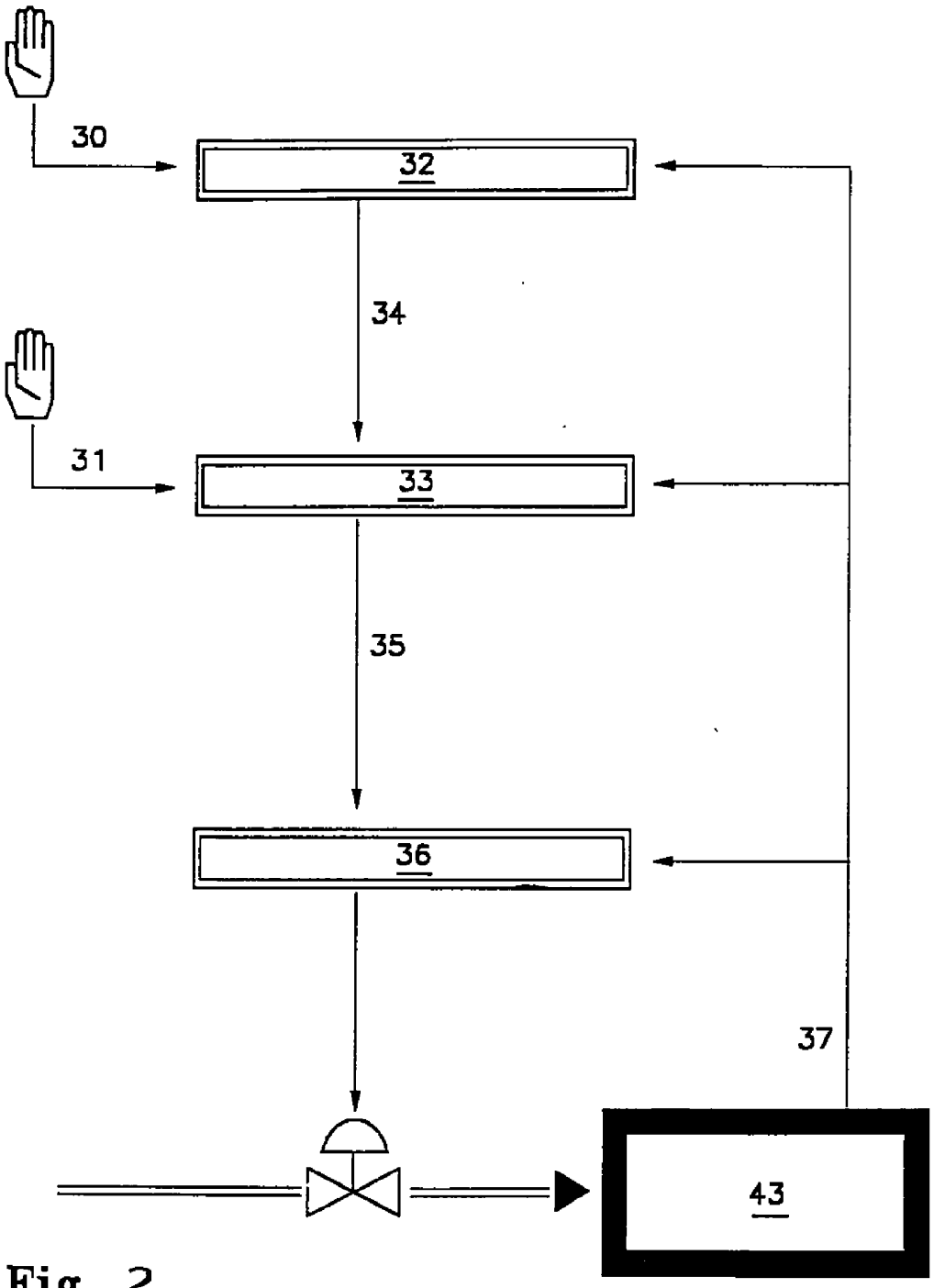


Fig. 2

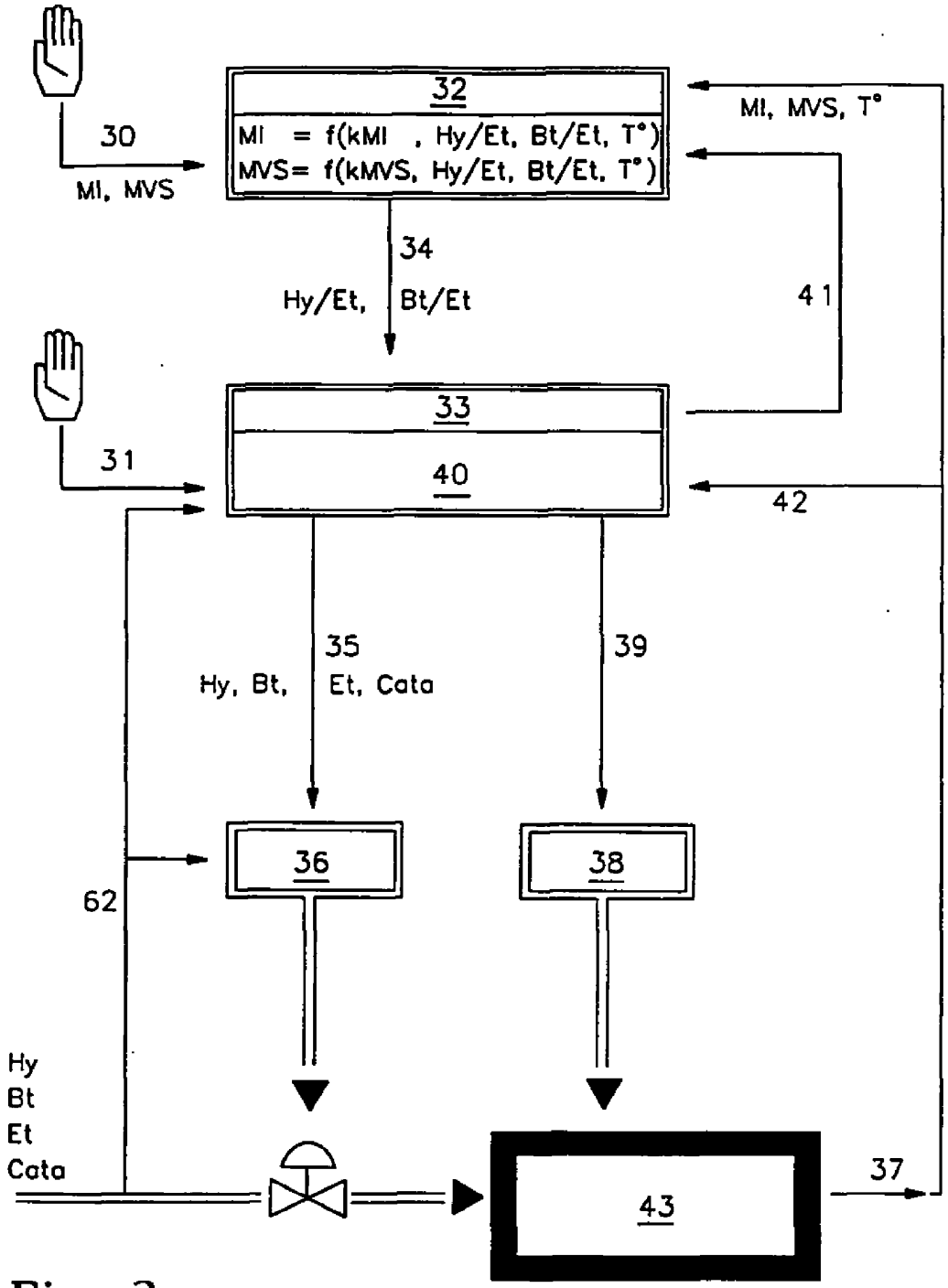

32
MI = f(kMI , Hy/Et, Bt/Et, T°)
MVS= f(kMVS, Hy/Et, Bt/Et, T°)
30
MI, MVS
MI, MVS, T°
34
Hy/Et, Bt/Et
41
33
40
31
42
35
Hy, Bt, Et, Cata
39
36
38
62
Hy
Bt
Et
Cata
37
43

Fig. 3

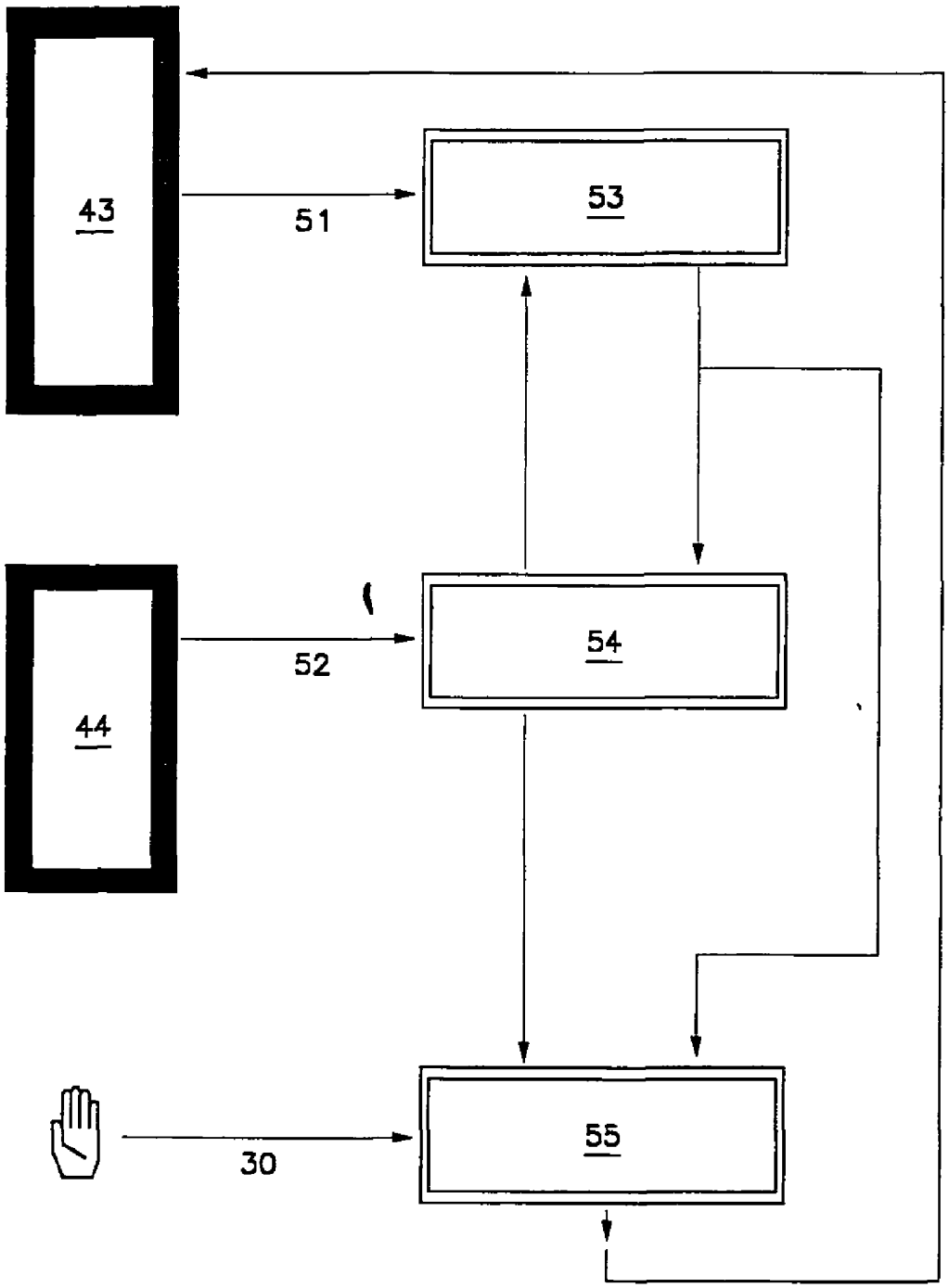


Fig. 4

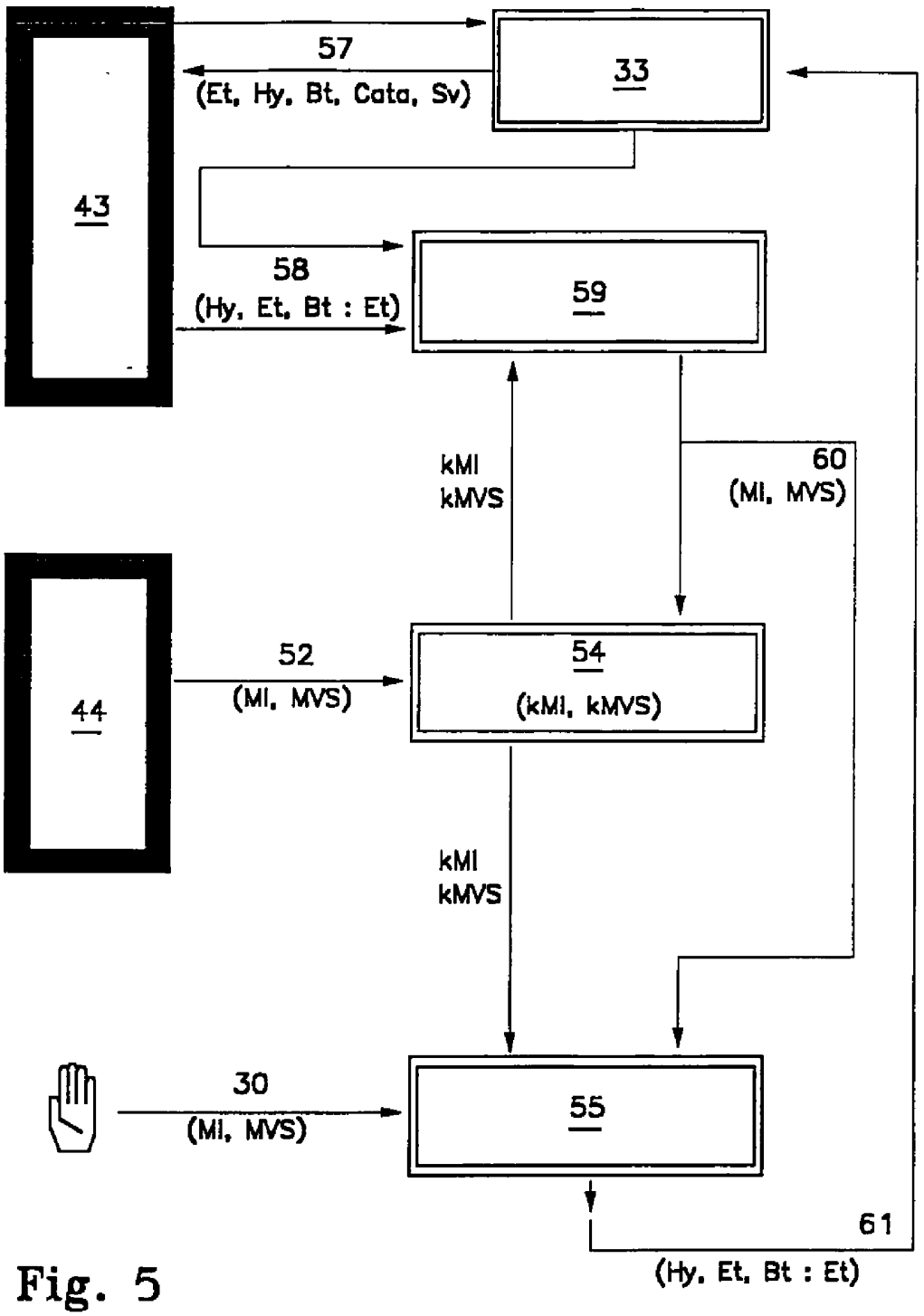

57
(Et, Hy, Bt, Cata, Sv)
33
43
58
(Hy, Et, Bt : Et)
59
kMI
kMVS
60
(MI, MVS)
44
52
(MI, MVS)
54
(kMI, kMVS)
kMI
kMVS
30
(MI, MVS)
55
61
(Hy, Et, Bt : Et)

Fig. 5

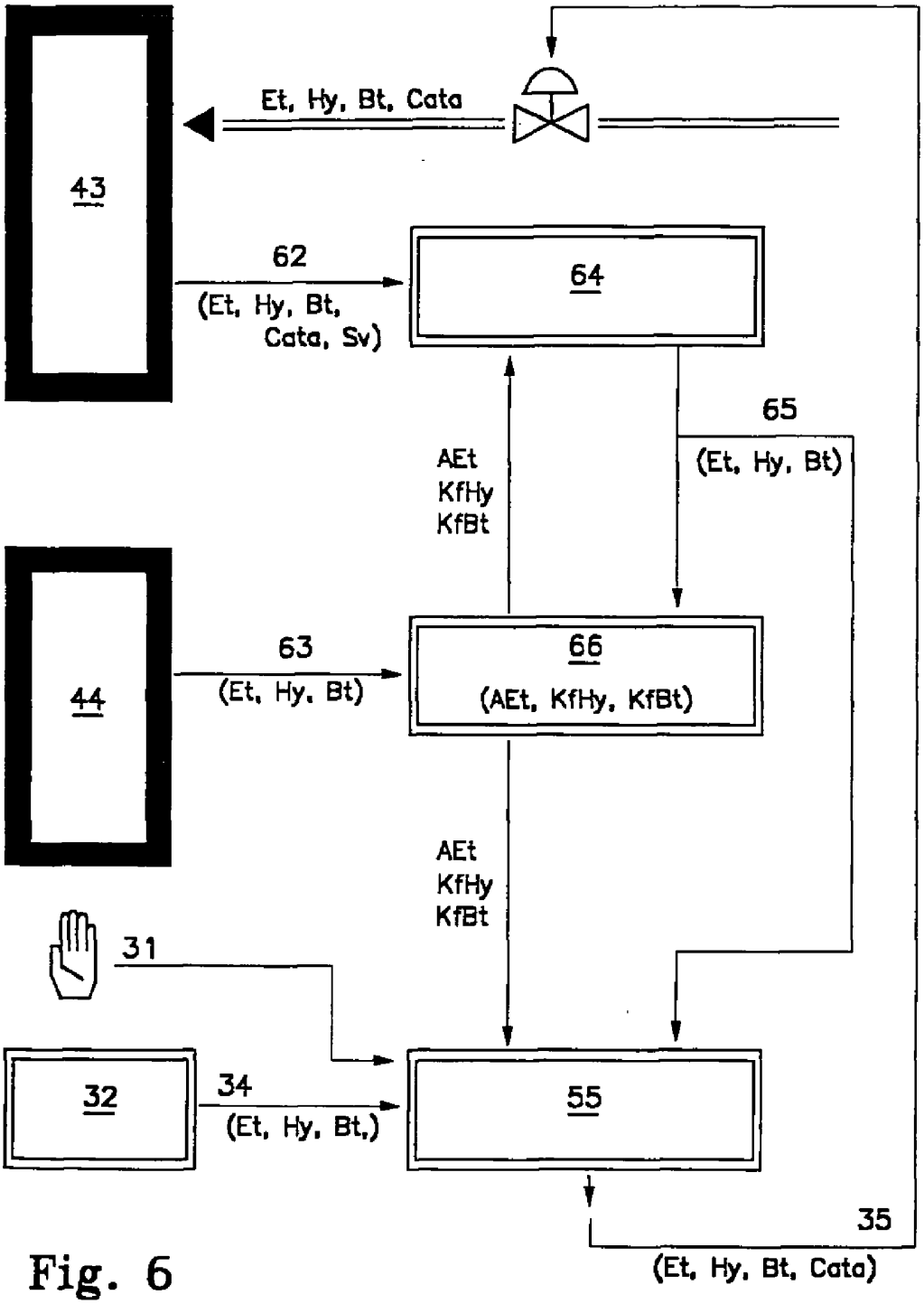

Et, Hy, Bt, Cata
43
62
(Et, Hy, Bt,
Cata, Sv)
64
65
(Et, Hy, Bt)
AEt
KfHy
KfBt
44
63
(Et, Hy, Bt)
66
(AEt, KfHy, KfBt)
AEt
KfHy
KfBt
31
32
34
(Et, Hy, Bt,)
55
35
(Et, Hy, Bt, Cata)

Fig. 6

Fig. 7

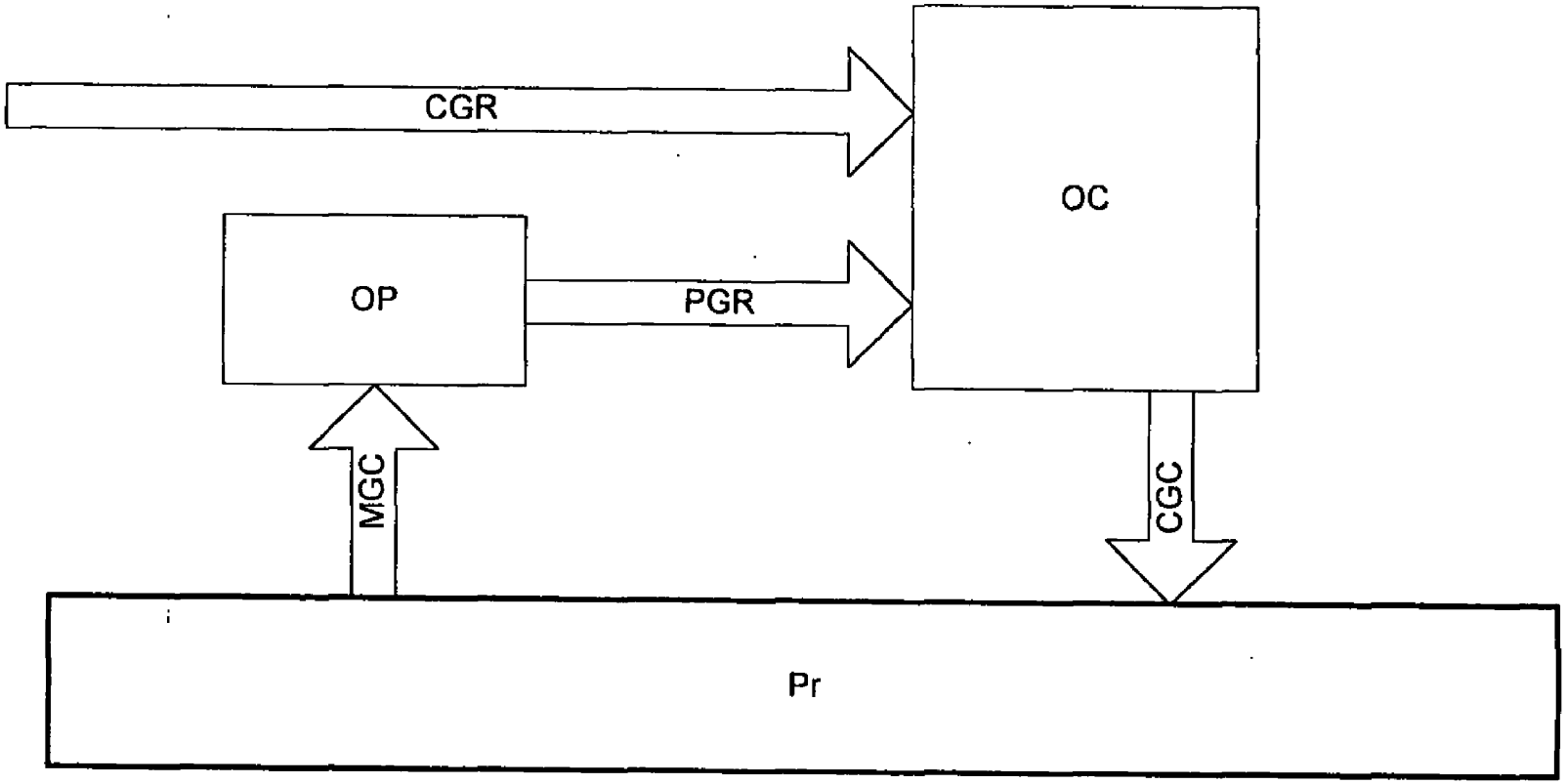


Fig. 8

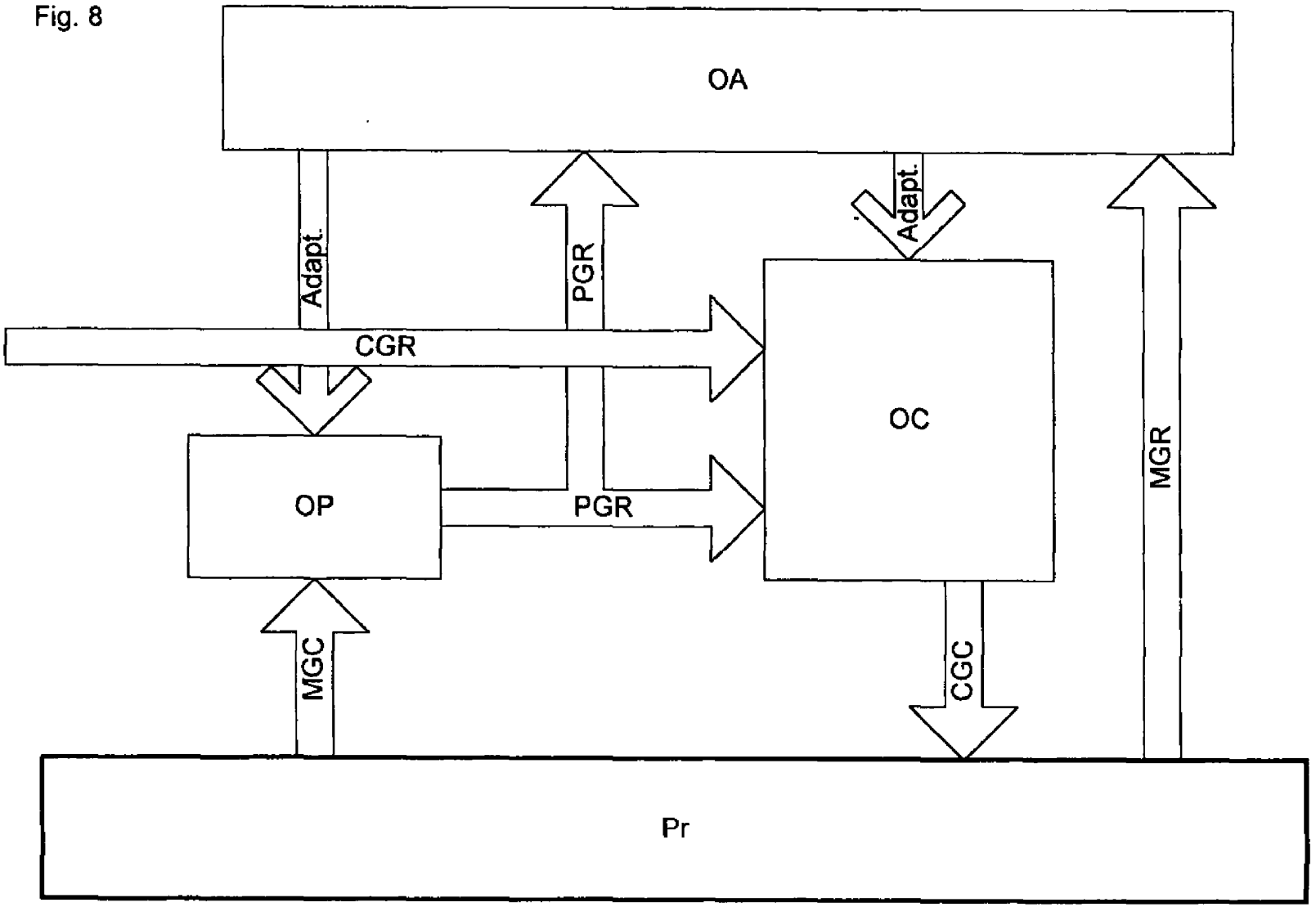


Fig. 9

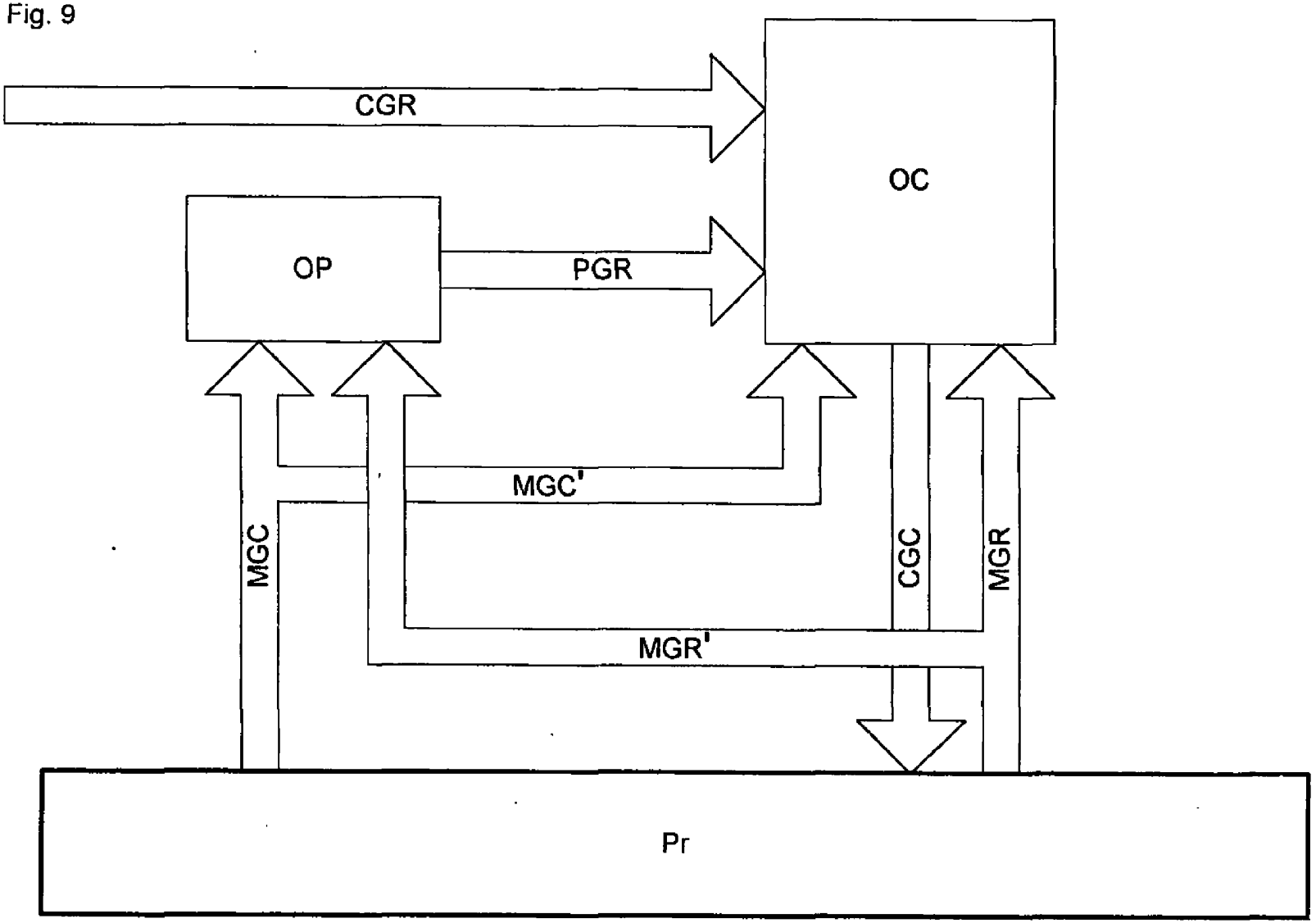


Fig. 10

