

Ing. Svatopluk Henke

Název: Modelování, simulace a řízení separačních procesů

Školitel: Prof. Ing. Zdeněk Bubník, CSc.

Studijní program: Chemie a technologie potravin

Studijní obor: Technologie potravin

SOUHRN

Práce se zabývá řešením problematiky kontinuální kapalinové chromatografické separace pracující v režimu Simulated Moving Bed, tj. chromatografie se simulovaným pohybem pevné fáze. Na základě podrobného studia odborné literatury byly připraveny návrhy na kompletní rekonstrukci stávající chromatografické stanice, které byly ověřovány dílčími experimenty a inženýrskými výpočty. Zkrácením a unifikací délek dopravních cest se podařilo zvýšit separační účinnost stanice. Instalací elektromagnetických ventilů je nyní stanice robustnější a je připravena i na budoucí provoz v režimu s proměnnou délkou jednotlivých zón během periody posunu. V plné návaznosti na vývoj a konstrukci vlastní stanice byly ve spolupráci s Ústavem počítačové a řídicí techniky VŠCHT v Praze navrženy, realizovány a vyzkoušeny systémy měření, řízení a regulace chromatografické stanice s novými měřicími a řídicími prvky napojenými na programovatelný logický automat s operátorskou stanicí. V této fázi práce byl používán jak vlastní, tak i modifikovaný již existující software. Řídicí systém umožňuje také vzdálenou správu a stanice je zařazena do programu provozování virtuálních laboratoří, který je společným projektem českých vysokých škol a je zastřešován Fakultou elektrotechnickou ČVUT v Praze. Nejrozsáhlejší částí práce bylo sestavení matematických modelů, jež jsou nezbytné pro účinné a přesně zaměřené řešení požadovaných separací. Modely byly použity pro simulace a optimalizace procesů, tím umožnily výrazně zkrátit a zlevnit úvodní nastavení celé stanice a procesní náběhy. Matematické modely vyjádřené soustavami parciálních diferenciálních rovnic byly řešeny převážně numericky pomocí vlastních programových nástrojů. Modelové parametry se určovaly z chromatogramů získaných při pulzních a průnikových experimentech za pomoci různých analytických a optimalizačních metod. V oblasti řízení kontinuálního chromatografického procesu byly vyvinuty dva systémy vyššího řízení, jeden je založený na optimalizaci a používá heuristickou simplexovou metodu, druhý je založen na fuzzy přístupu a využívá jednak znalostí chování ideálních chromatografických modelů a jednak znalostí získaných ze zkušenosti při provozu stanice a z chování procesu. Výsledky a poznatky o chování jednotlivých modelů získané ze simulace byly využity při ověřovacích zkouškách. Chromatografické kolony byly naplněny silně kyselým katechem v Na cyklu ve formě monosférických částic, tvořených polystyren-divinylbenzenovým skeletem s navázanou kyselinou sulfonovou. Při jednotlivých zkouškách byly separovány vybrané sacharidy a další látky buď z průmyslových produktů nebo z jejich modelových roztoků. Při separaci reálných průmyslových roztoků se podařilo z řepné melasy získat frakci s majoritním zastoupením betainu, při separaci laktosového hydrolyzátu byla významně separována frakce obsahující galaktooligosacharidy a laktosu od zbytku reakční směsi. V případě modelových roztoků řepné melasy byly separovány roztoky sacharosy a chloridu draselného, sacharosy a betain hydrochloridu a roztok glukosy a betain hydrochloridu, úspěšně také proběhla separace směsi monosacharidů glukosy a mannosy ve vodném roztoku. Celé vyvinuté zařízení včetně měřicího a řídicího systému, modely separačních procesů a simulační prostředí byly úspěšně zařazeny do pedagogických programů fakulty Potravinářské a biochemické technologie VŠCHT v Praze v magisterském a doktorském studiu a dále do řešení fakultního výzkumného záměru.

Ing. Svatopluk Henke

Title: Modeling, simulation and control of separation processes

Supervisor: Prof. Ing. Zdeněk Bubník, CSc.

Study programme: Food Chemistry and Technology

Subprogramme: Food Technology

SUMMARY

This work deals with the area of continuous chromatographic separation operating as a Simulated Moving Bed, i.e. the movement of stationary phase is simulated. On the basis of detailed survey new designs for a total reconstruction of existing chromatographic station were laid out. The suggested solutions were verified by experimental work and chemical engineering calculations. The separation efficiency of the station has been improved by reduction and unification of transportational paths. Due to the installation of electromagnetic valves the station is more robust and ready for a future operation in a regime of variable zone length during the switch period. Following the development and the arrangement of chromatographic station new systems for measurement, control and regulation using programmable logic controller and operational station were realised and tested in cooperation with the Department of Computing and Control Engineering, ICT Prague. This stage of work required new software or a modification of existing one. The control system enables remote control and the station has been implemented into the program of virtual laboratories, which is a common project of Czech universities covered by the Faculty of Electrical Engineering, Czech Technical University in Prague. The most extensive part covered a development of mathematical models which were necessary for efficient and precisely targeted solution of separations. The models were applied for process simulations reducing the time and costs of separation comparing to the previous set-up. Mathematical models expressed in a system of partial differential equations were solved numerically using own programme tools. Model parameters were determined from chromatograms obtained during pulse or breakthrough experiments using analytical and optimizing methods. Two systems for higher control were developed; one is based on optimization and uses heuristic simplex method, the other is based on fuzzy approach and uses both knowledge of ideal chromatographic model behaviour and experience obtained during separation and station operation. Achieved results and knowledge of behaviour of individual models were applied during pilot tests. The sorbent used was strongly acidic catex in Na form, sulphonated polystyrene-divinylbenzene matrix in form of monospheric particles. Chosen sugars and other compounds were separated from industrial or model solutions. Hence, a fraction containing mainly betaine was isolated from sugar beet molasses as well as galactooligosaccharides and lactose present in lactose hydrolysate were separated from reaction mixture, both representing real industrial materials. In model solutions, separations of sucrose/potassium chloride, sucrose/betaine hydrochloride, glucose/betaine hydrochloride and mannose/glucose were successfully tested. The developed instrument including measuring and control system, models of separation processes and simulating tools were successfully implemented into master and postgraduate teaching programs of the Faculty of Food and Biochemical Technology, ICT Prague and into the solution of Research plan: Theoretical Fundamentals of Food and Biochemical Technologies.