

**ΜΕΛΕΤΗ ΑΝΤΙΣΤΑΘΜΙΣΗΣ ΔΙΑΤΑΡΑΧΩΝ ΣΕ ΟΛΟΚΛΗΡΩΜΕΝΟ ΣΥΣΤΗΜΑ  
ΑΝΑΜΟΡΦΩΣΗΣ ΜΕΘΑΝΟΛΗΣ ΠΡΟΣ ΠΑΡΑΓΩΓΗ ΥΔΡΟΓΟΝΟΥ  
ΚΑΙ ΕΝΕΡΓΕΙΑΣ ΣΕ ΚΥΨΕΛΗ ΚΑΥΣΙΜΟΥ**

**Δ. Ιψάκης<sup>1,2</sup>, Σ. Βουτετάκης<sup>1</sup>, Σ. Παπαδοπούλου<sup>1,3</sup>, Π. Σεφερλής<sup>1,4</sup>**

<sup>1</sup> Εθνικό Κέντρο Έρευνας και Τεχνολογικής Ανάπτυξης (Ε.Κ.Ε.Τ.Α.),  
Ινστιτούτο Τεχνικής Χημικών Διεργασιών (Ι.Τ.ΧΗ.Δ.), Τ.Θ. 60361, 57001 Θέρμη, Θεσσαλονίκη

<sup>2</sup> Τμήμα Χημικών Μηχανικών, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης (Α.Π.Θ.),  
Τ.Θ. 1517, 54124, Θεσσαλονίκη

<sup>3</sup> Τμήμα Αυτοματισμού, Αλεξάνδρειο Τεχνολογικό Εκπαιδευτικό Ίδρυμα Θεσσαλονίκης (Α.Τ.Ε.Ι.Θ.),  
Τ.Θ. 14561, 54101, Θεσσαλονίκη

<sup>4</sup> Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης (Α.Π.Θ.),  
Τ.Θ. 484, 54124, Θεσσαλονίκη

## **ΠΕΡΙΛΗΨΗ**

Η παρούσα εργασία μελετά την προσομοιωμένη λειτουργία ενός ολοκληρωμένου συστήματος αναμόρφωσης της μεθανόλης που αξιοποιεί το παραγόμενο υδρογόνο σε κυψέλη καυσίμου τύπου *PEM*. Για το σκοπό αυτό, αναπτύσσονται δύο εναλλακτικά διαγράμματα ροής που διαφέρουν ως προς τον τρόπο κάλυψης των θερμικών αναγκών του συστήματος. Η θεωρία σχεδιασμού και ρυθμισιμότητας (*design & controllability*) εφαρμόζεται στα δύο διαγράμματα λειτουργίας και εξετάζει πολλαπλά σενάρια επίδρασης διαταραχών (π.χ. μερικής απενεργοποίησης καταλυτών) με στόχο την καταγραφή των ποσοστιαίων μεταβολών των μεταβλητών χειραγώγησης που τροποποιούνται για τη διατήρηση των μεταβλητών ελέγχου στα σημεία αναφοράς του συστήματος. Η τιμή ενός στατικού κριτηρίου ρυθμισιμότητας και ενός οικονομικού κριτηρίου επιτρέπει α) την εξακρίβωση μη αποδεκτών καταστάσεων που απορρίπτονται ως πιθανές λύσεις, β) τη σύγκριση των αποτελεσμάτων προσομοίωσης για τα δύο διαγράμματα ροής και γ) την επιλογή του βέλτιστου σχεδιασμού λειτουργίας του ολοκληρωμένου συστήματος αναμόρφωσης της μεθανόλης.

## **ΕΙΣΑΓΩΓΗ**

Τις τελευταίες δεκαετίες, διαπιστώθηκε η άρρηκτη σχέση των αυξανόμενων περιβαλλοντικών προβλημάτων (φαινόμενο του θερμοκηπίου, όξινη βροχή, ερήμωση κ.α.) με την αλόγιστη χρήση των αποθεμάτων ορυκτών καυσίμων, όπως του πετρελαίου, του λιγνίτη και του γαιάνθρακα. Ως κοινός παρονομαστής των περιβαλλοντικών και ενεργειακών προβλημάτων, ορίστηκε το σύνολο των εκπομπών των αερίων του θερμοκηπίου στην ατμόσφαιρα, με κυριότερο αυτό του διοξειδίου του άνθρακα. Λύση στο πρόβλημα αποτελεί η μερική αντικατάσταση των συμβατικών μονάδων παραγωγής ενέργειας που μπορεί να προέλθει με την ανάπτυξη ολοκληρωμένων συστημάτων διεργασιών που αξιοποιούν

ανανεώσιμες και εναλλακτικές πηγές ενέργειας.

Η μεθανόλη αποτελεί εναλλακτική πηγή ενέργειας, που είναι εύκολα διαθέσιμη στο εμπόριο, δεν απαιτεί ιδιαίτερες συνθήκες αποθήκευσης (λόγω της υγρής της φύσης), ενώ η αναμόρφωση της προς παραγωγή υδρογόνου γίνεται σε ήπιες συνθήκες θερμοκρασίας και δεν συνοδεύεται από εκπομπές ανεπιθύμητων αερίων ( $SO_x$ ,  $NO_x$ ) που συνήθως απαντώνται κατά την αξιοποίηση του μεθανίου, του *LPG* και των ανώτερων υδρογονανθράκων [1-3]. Παράλληλα, η μεθανόλη μπορεί να θεωρηθεί σαν ανανεώσιμη πηγή όταν αυτή παράγεται από την μεθανολική ζύμωση υδατανθράκων, οπότε και διατίθεται με τον όρο βιομεθανόλη. Μπορεί επίσης να συντεθεί από το αέριο σύνθεσης που προέρχεται από την αεριοποίηση της υπολειματικής βιομάζας.

Η παραγωγή υδρογόνου από μεθανόλη υλοποιείται με τρεις διαδικασίες: α) την αναμόρφωση με ατμό, β) τη μερική οξειδωση και γ) το συνδυασμό των δύο ανωτέρω μεθόδων δηλαδή την αυτόθερμη αναμόρφωση. Όπως έχει παρατηρηθεί σε αντίστοιχες μελέτες [4], η μέθοδος της αναμόρφωσης αποτελεί μία ενδόθερμη διεργασία που απαιτεί την παρουσία ενός συστήματος συνεχούς θέρμανσης, ενώ η μέθοδος της μερικής οξειδωσης προκαλεί υψηλές θερμοκρασίες και τα συνεπακόλουθα προβλήματα στον καταλύτη με την εμφάνιση των “*hot spots*”. Αντιθέτως, η τρίτη μέθοδος περιλαμβάνει τη συντροφοδοσία μεθανόλης, νερού και αέρα σε συγκεκριμένη αναλογία, έτσι ώστε η όλη διεργασία στον αντιδραστήρα αναμόρφωσης να θεωρείται αυτόθερμη και να συγκεντρώνει τα πλεονεκτήματα των δύο πρώτων μεθόδων, αποφεύγοντας τα μειονεκτήματα τους και αποτελεί σαφέστατα την πλέον αξιόπιστη λύση για την παραγωγή υδρογόνου και ακολούθως ενέργειας από μεθανόλη [4].

Η άμεση αξιοποίηση του παραγόμενου υδρογόνου για την παραγωγή ηλεκτρικής ισχύος πραγματοποιείται με την διοχέτευσή του σε κυψέλη καυσίμου τύπου Πολυμερικής Μεμβράνης (PEM). Καθότι όμως, η ομαλή λειτουργία της κυψέλης καυσίμου τύπου *PEM* υφίσταται μόνο όταν η παρουσία του  $CO$  είναι χαμηλότερη των 50ppm (υψηλές συγκεντρώσεις δηλητηριάζουν την άνοδο της), απαιτείται ένα στάδιο καθαρισμού της εξόδου του αντιδραστήρα αυτόθερμης αναμόρφωσης. Μεταξύ των διαφόρων μεθόδων απομάκρυνσης του  $CO$  που περιλαμβάνουν: α) αντιδραστήρες με παρουσία μεμβρανών, β) αντιδραστήρες οξειδωσης, γ) αντιδραστήρες μετάθεσης νερού και γ) τεχνολογία *PSA* (*pressure swing absorption*), έχει διαπιστωθεί ειδικότερα στις συνθήκες επεξεργασίας της μεθανόλης πως η επιλεκτική οξειδωση του  $CO$  συγκεντρώνει τα περισσότερα πλεονεκτήματα λειτουργικής και οικονομικής απόδοσης [5].

## ΣΤΟΧΟΙ ΜΕΛΕΤΗΣ

Οι περισσότερες μελέτες της βιβλιογραφίας σχετίζονται με τη μελέτη πειραματικών διατάξεων απόδοσης ισχύος της τάξεως των  $10W_p$ - $75kW_p$  [6, 7], όπου τονίζεται σαφέστατα η ανάγκη ανάπτυξης λεπτομερών μοντέλων προσομοίωσης που θα περιγράψουν με ακρίβεια τη λειτουργία της ολοκληρωμένης διεργασίας. Σε μία από τις λίγες αυτές εργασίες, οι Stamps A. T. και Gatzke E.P. [8] ανέπτυξαν μαθηματικά μοντέλα για τα διάφορα υποσυστήματα επεξεργασίας της μεθανόλης, χωρίς όμως να δώσουν λεπτομέρειες για τα αποτελέσματα της δυναμικής λειτουργίας της ολοκληρωμένης μονάδας ή για τη σύνδεση των υποσυστημάτων της στα πλαίσια μιας ολοκληρωμένης λειτουργίας. Επιπρόσθετα, υπάρχει έλλειψη μελετών για τη βέλτιστη λειτουργία τέτοιων συνδεδεμένων υποσυστημάτων η οποία εν μέρει καλύπτεται από μελέτες υλοποίησης συστημάτων ελέγχου συμβατικής ρύθμισης [9-11], που από τη φύση τους ενδέχεται να συναντήσουν σοβαρά προβλήματα κατά την εμφάνιση διαταραχών στο σύστημα (π.χ. απενεργοποίηση καταλυτικής δράσης).

Συνεπώς η μαθηματική ανάλυση και η ανάπτυξη μίας μεθοδολογίας βέλτιστης λειτουργίας της ολοκληρωμένης μονάδας αξιοποίησης μεθανόλης προς παραγωγή υδρογόνου

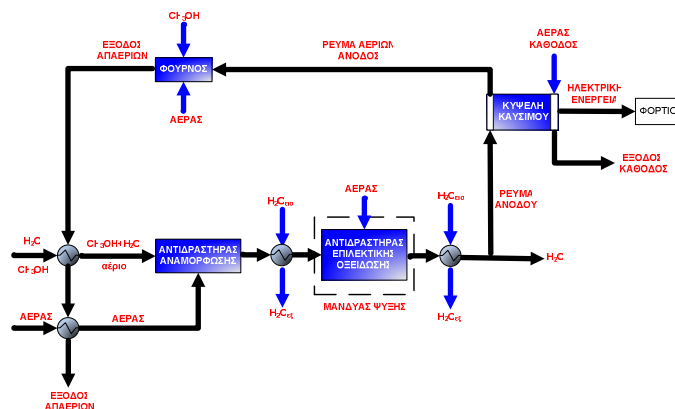
και ηλεκτρικής ισχύος αποτελεί ένα ανοιχτό πρόβλημα στη βιβλιογραφία. Στόχος της συγκεκριμένης μελέτης, αποτελεί η ανάπτυξη μίας συστηματικής μεθοδολογίας σχεδιασμού βέλτιστης λειτουργίας που θα λαμβάνει υπόψη α) το μη-γραμμικό μοντέλο προσομοίωσης της ολοκληρωμένης διεργασίας, β) την καταγραφή των μεταβλητών χειρισμού και ελέγχου και γ) τη μελέτη της επίδρασης έμμεσα παρατηρήσιμων και απρόβλεπτων πιθανών διαταραχών στο σύστημα. Τα τρία αυτά βήματα, θα αναδείξουν το βέλτιστο λειτουργικό διάγραμμα ροής που θα μπορεί εντέλει να υλοποιείται με συμβατικά ή προηγμένα μέσα ρύθμισης.

## ΘΕΩΡΙΑ ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΥ ΚΑΙ ΡΥΘΜΙΣΙΜΟΤΗΤΑΣ

Η θεωρία που προτείνεται προς μελέτη στο αντικείμενο της αντιστάθμισης διαταραχών αναφέρεται υπό τον τίτλο σχεδιασμός και ρυθμισιμότητα και περιγράφεται με λεπτομέρεια από τους Seferlis P. και Georgiadis M. [12]. Τα βασικά βήματα εφαρμογής της είναι τα εξής:

### 1) ΟΡΙΣΜΟΣ ΕΝΑΛΛΑΚΤΙΚΩΝ ΔΙΑΓΡΑΜΜΑΤΩΝ ΡΟΗΣ

Με στόχο την μελέτη και την επιλογή της βέλτιστης λειτουργίας του ολοκληρωμένου συστήματος αξιοποίησης μεθανόλης, αναπτύσσονται τουλάχιστον δύο διαγράμματα ροής που διαφέρουν ως προς καίρια σχεδιαστικά σημεία λειτουργίας. Το πρώτο εναλλακτικό διάγραμμα ροής παρουσιάζεται στο σχήμα 1 υπό τον τίτλο *ΕΔΡ1* το οποίο και εν συνεχεία αναλύεται συνοπτικά.

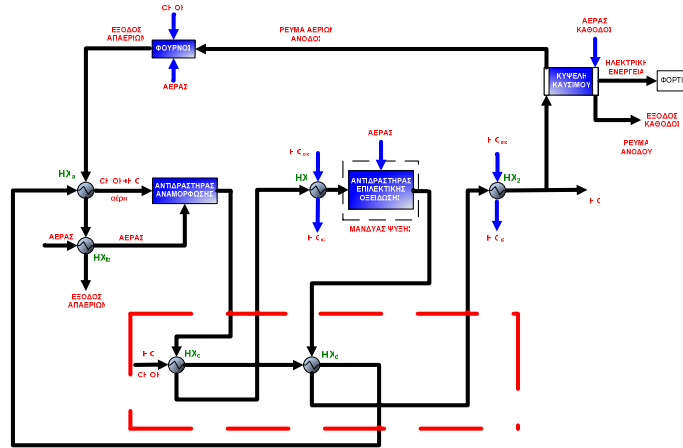


**Σχήμα 1:** Εναλλακτικό Διάγραμμα Ροής- ΕΔΡ1

Μεθανόλη και νερό αφού προθερμανθούν και εξατμιστούν με τη χρήση του θερμού ρεύματος εξόδου του φούρνου (του οποίου η είσοδος αποτελείται από την έξοδο της κυψέλης καυσίμου καθώς και την προσθήκη μεθανόλης), εισέρχονται στον αντιδραστήρα αναμόρφωσης. Εκεί εισάγεται αέρας που έχει επίσης προθερμανθεί με τη χρήση του ίδιου ρεύματος εξόδου του φούρνου. Μέσω μίας σειράς αντιδράσεων, παράγεται ένα μίγμα αερίου πλούσιο σε υδρογόνο (~50-60%) το οποίο αφού ψυχθεί κατά ~100°C σε εναλλάκτη θερμότητας, εισέρχεται στον αντιδραστήρα επιλεκτικής οξειδωσης. Σ' αυτόν, λαμβάνει χώρα η μείωση του ποσοστού του CO στο επίπεδο των <50ppm με χρήση αέρα, ενώ η χρήση ψυκτικού στο μανδύα ψύξης διατηρεί τη θερμοκρασία λειτουργίας σε επιθυμητά και αποδεκτά επίπεδα. Η θερμή έξοδος του αντιδραστήρα επιλεκτικής οξειδωσης ψύχεται κατά ~150°C με

στόχο την απομάκρυνση της μεγαλύτερης ποσότητας του νερού, το οποίο δεν επιτρέπεται να εισέλθει στην άνοδο της κυψέλης καυσίμου (προκαλούνται φαινόμενα πλημμύρισης και δυσχέρειας στην παραγωγή ενέργειας). Στην κάθοδο της κυψέλης καυσίμου εισέρχεται αέρας, ο οποίος αντιδρά με το υδρογόνο της ανόδου και παράγεται νερό και φυσικά ενέργεια. Το νερό απομακρύνεται από την κάθοδο και όπως προαναφέρθηκε, η έξοδος της ανόδου που περιέχει υδρογόνο και μεθανόλη που δεν αντέδρασαν καθώς και μίγμα  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CO}$  και  $\text{N}_2$  εισέρχεται προς καύση στο φούρνο της μονάδας. Η ροή της μεθανόλης που εισάγεται επιπλέον στο φούρνο, εξαρτάται από τις θερμικές ανάγκες προθέρμανσης και εξάτμισης της εισόδου (μεγάλες ροές τροφοδοσίας απαιτούν αντίστοιχα μεγάλα ποσά θερμότητας και αντίστοιχα υψηλότερα ποσά μεθανόλης).

Ανάλογα, το δεύτερο προτεινόμενο διάγραμμα ροής παρουσιάζεται στο σχήμα 2 υπό τον τίτλο *EAP2*.



**Σχήμα 2:** Εναλλακτικό Διάγραμμα Ροής 2- EAP2

Μεθανόλη και νερό προθερμαίνονται αρχικά με το ρεύμα εξόδου του αντιδραστήρα αναμόρφωσης στον εναλλάκτη θερμότητας  $HX_c$ . Το ρεύμα εξόδου του αντιδραστήρα δεν αποδίδει πάντα όλη τη θερμότητα του, αλλά μόνο ένα ποσοστό της (0-100%) στο υγρό μίγμα της τροφοδοσίας. Έπειτα, στο δεύτερο στάδιο εναλλαγής θερμότητας που λαμβάνει χώρα στον εναλλάκτη  $HX_d$ , το ρεύμα τροφοδοσίας της μεθανόλης και του νερού θερμαίνεται περαιτέρω με χρήση του θερμού ρεύματος εξόδου (ποσοστό 0-100%) του αντιδραστήρα επιλεκτικής οξειδωσης. Στο τελικό στάδιο θέρμανσης, το ρεύμα μεθανόλης και νερού θερμαίνεται πλήρως μέχρι την επιθυμητή θερμοκρασία, με χρήση της θερμής εξόδου του φούρνου στον εναλλάκτη  $HX_a$ . Ταυτόχρονα, προθερμαίνεται και η τροφοδοσία του αέρα με χρήση του ίδιου ρεύματος των απαερίων στον εναλλάκτη  $HX_b$ . Τα υπόλοιπα στάδια λειτουργίας των άλλων υποσυστημάτων είναι ακριβώς όμοια με αυτά του *EAP1*.

Όπως παρατηρείται, η ειδοποιός διαφορά των δύο διαγραμμάτων ροής έγκειται στον τρόπο θέρμανσης της τροφοδοσίας, όπου στη μεν περίπτωση του *EAP1* η εναλλαγή θερμότητας πραγματοποιείται μόνο με χρήση των απαερίων του φούρνου, ενώ στη δεύτερη του *EAP2*, αξιοποιούνται και ρεύματα της διεργασίας.

## 2) ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ

Το μαθηματικό μοντέλο προσομοίωσης περιλαμβάνει το σύνολο των μαθηματικών εξισώσεων που περιγράφουν με λεπτομέρεια τη λειτουργία των επιμέρους υποσυστημάτων και η αναλυτική περιγραφή τους μπορεί να αναζητηθεί στην αναφορά [13]. Ενδεικτικά αναφέρεται πως η ανάπτυξη του μοντέλου βασίστηκε στα δυναμικά και μη χαρακτηριστικά λειτουργίας των επί μέρους υποσυστημάτων.

## 3) ΟΡΙΣΜΟΣ ΜΕΤΑΒΛΗΤΩΝ ΧΕΙΡΙΣΜΟΥ ΚΑΙ ΕΛΕΓΧΟΥ

Ο πίνακας 1, περιλαμβάνει τη συσχέτιση των μεταβλητών χειρισμού και ελέγχου για τα δύο εναλλακτικά διαγράμματα ροής που περιεγράφησαν παραπάνω.

**Πίνακας 1:** Ομαδοποίηση μεταβλητών χειρισμού-ελέγχου

<b>Μεταβλητή Ελέγχου</b>	<b>Μεταβλητή Χειρισμού</b>
<i>Θερμοκρασία τροφοδοσίας του αντιδραστήρα αναμόρφωσης</i>	<i>Ροή μεθανόλης στον φούρνο</i>
<i>Θερμοκρασία εξόδου του αντιδραστήρα αναμόρφωσης</i>	<i>Αναλογία <math>H_2O/CH_3OH</math></i>
<i>Συγκέντρωση CO στην έξοδο του αντιδραστήρα επιλεκτικής οξείδωσης</i>	<i>Θερμοκρασία λειτουργίας του αντ. επιλεκτικής οξείδωσης</i>
<i>Αποδιδόμενη ισχύς της κυψέλης καυσίμου</i>	<i>Ροή μεθανόλης στην τροφοδοσία</i>
<i>Θερμοκρασία εξόδου θερμού ρεύματος του εναλλάκτη <math>HX_1/HX_2</math></i>	<i>Ροή ψυκτικού στον εναλλάκτη <math>HX_1/HX_2</math></i>
<i>Θερμοκρασία λειτουργίας της κυψέλης καυσίμου</i>	<i>Ροή ψυκτικού στο μανδύα ψύξης της κυψέλης καυσίμου</i>
<i>Θερμοκρασία εξόδου θερμού ρεύματος εναλλακτών <math>HX_d/HX_e/HX_c</math></i>	<i>Ρεύματα εξόδου των αντιδραστήρων</i>

## 4) ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΑΝΤΙΚΕΙΜΕΝΙΚΗΣ ΣΥΝΑΡΤΗΣΗΣ ΕΛΕΓΧΟΥ

Το επόμενο βήμα υλοποίησης της θεωρίας σχεδιασμού & ρυθμισιμότητας αποτελεί η ανάπτυξη της αντικειμενικής συνάρτησης που θα λαμβάνει υπόψη τα στατικά χαρακτηριστικά του συστήματος. Η συνάρτηση αυτή προτείνεται να είναι δευτέρου βαθμού και να περιλαμβάνει τις αποκλίσεις των μεταβλητών ελέγχου από τις επιθυμητές τιμές πολλαπλασιαζόμενες με ένα συγκεκριμένο συντελεστή βάρους. Επίσης, στην ίδια συνάρτηση δύναται να ληφθούν με τον ίδιο τρόπο υπόψη οι αποκλίσεις των μεταβλητών χειρισμού από τις τιμές αναφοράς τους σε μόνιμη κατάσταση, ώστε να αξιολογηθεί το εύρος αλλαγών τους κατά

την αντιμετώπιση των διαταραχών. Τονίζεται, πως οι συντελεστές βάρους καθορίζουν τη βαρύτητα των μεταβλητών χειρισμού και ελέγχου στον υπολογισμό της αντικειμενικής συνάρτησης και η συγκεκριμένη μεθοδολογία μπορεί να θεωρηθεί πως ισοδυναμεί με την περίπτωση αλγορίθμων πολυμεταβλητών συστημάτων [12].

$$\text{Min}_{y,u} f = (y - y_{sp})^T W_y (y - y_{sp}) + (u - u_{ss})^T W_u (u - u_{ss})$$

s.t.

$$h(x, y, \varepsilon) = 0$$

$$g(x, y, \varepsilon) \leq 0 \quad (1)$$

$$y^l \leq y \leq y^h$$

$$u^l \leq u \leq u^h$$

$$x^l \leq x \leq x^h$$

όπου ως  $f$  δηλώνεται η αντικειμενική συνάρτηση ελέγχου,  $y$  οι μεταβλητές ελέγχου,  $u$  οι μεταβλητές χειρισμού,  $W_y$ ,  $W_u$  οι αντίστοιχοι συντελεστές βάρους,  $h$  το σύνολο των μαθηματικών εξισώσεων της διεργασίας,  $g$  το σύνολο των περιορισμών του συστήματος,  $x, u, y$  οι μεταβλητές του συστήματος (κατάσταση, χειρισμού και ελέγχου),  $l, h$  οι ελάχιστες και μέγιστες τιμές των αντίστοιχων μεταβλητών και  $\varepsilon$  οι διαταραχές του συστήματος.

Οι στατικοί στόχοι ελέγχου ( $y_{sp}$ ) θα πρέπει να ικανοποιούνται συνεχώς στα πλαίσια του προβλήματος επίλυσης παρά την επίδραση των διαταραχών  $\varepsilon$ . Καθώς, θα μεταβάλλονται οι μεταβλητές χειρισμού  $u$ , η αντικειμενική συνάρτηση  $f$  θα τροποποιείται και εν τέλει θα καταλήγει στην ελάχιστη τιμή της που θα υποδηλώνει την εύρεση μίας αποδεκτής λύσης για το εκάστοτε σενάριο λειτουργίας.

##### 5) ΕΠΙΛΥΣΗ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΟΣ ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΥ ΒΕΛΤΙΣΤΗΣ ΛΕΙΤΟΥΡΓΙΑΣ

Αρχικά το πρόβλημα επιλύεται για διάφορα σετ τιμών  $\varepsilon$  (διαταραχές). Για τον σκοπό αυτό, ένας μεγάλος αριθμός σημείων διαφορετικών μεγεθών και κατευθύνσεων απαιτείται ώστε να καλυφθεί όλο το πιθανό διάστημα επίδρασης των διαταραχών. Η λύση για οποιοδήποτε σενάριο διαταραχών προκύπτει από το παραμετρικό σετ *Karush-Kuhn-Tucker* βέλτιστων συνθηκών (πρώτης τάξης). Το σετ αυτό, προσανξάνεται με τις σχέσεις που καθορίζουν τις μεταβολές των παραμέτρων και διαταραχών,  $\Delta\varepsilon$ , ως εξής [12]:

$$F(x, y, u, d, \varepsilon, \zeta) = \begin{bmatrix} \nabla f + \lambda^T \nabla h + \mu^T \nabla g_A \\ h \\ g_A \\ \Delta\varepsilon - \theta\zeta \end{bmatrix} = 0 \quad (2)$$

Η πρώτη γραμμή του ανωτέρω πίνακα αναπαριστά το βαθμωτό διάνυσμα της

συνάρτησης *Lagrange*, με αναφορά στις μεταβλητές  $x$ ,  $y$ ,  $u$  και  $\varepsilon$ . Τα διανύσματα  $\lambda$  και  $\mu$  δηλώνουν τους πολλαπλασιαστές *Lagrange* που σχετίζονται με τις εξισώσεις  $h$  και ανισώσεις  $g_A$ , αντίστοιχα. Η απόκλιση  $\Delta\varepsilon$  δηλώνει τις σχετικές αλλαγές των διαταραχών ή των παραμέτρων υπό αβεβαιότητα από τις τιμές αναφοράς τους  $\varepsilon_{ref}$ . Η τροχιά της βέλτιστης λύσης για τις αλλαγές των  $\varepsilon$  κατά μήκος προκαθορισμένων διευθύνσεων  $\theta$  στον πολυδιάστατο χώρο του εύρους των διαταραχών προκύπτει από την χρήση μία συνεχούς μεθόδου πρόβλεψης-διόρθωσης και παρουσιάζεται με λεπτομέρεια στις αναφορές [12, 13]. Η παράμετρος  $\zeta$  αντιστοιχεί σε ανεξάρτητη παράμετρο συνέχειας.

## 6) ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΚΡΙΤΗΡΙΩΝ ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗΣ ΛΕΙΤΟΥΡΓΙΑΣ

Στις παραπάνω παραγράφους ορίστηκε ο βασικός τρόπος επίλυσης του προβλήματος αντιστάθμισης διαταραχών και διατήρησης των μεταβλητών ελέγχου στα σημεία αναφοράς τους. Ως προς την αξιολόγηση των αποτελεσμάτων οφείλει να προστεθεί το λεγόμενο κριτήριο στατικής ρυθμισιμότητας το οποίο θα αποτελέσει το μέτρο σύγκρισης για την τελική επιλογή του ευέλικτου διαγράμματος ροής. Το κριτήριο αυτό λαμβάνει τη μορφή της σχέσης (3), ενώ παράλληλα προτείνεται προς χρήση και η συνάρτηση  $C_\Omega$  που αποτελεί μέτρο σύγκρισης της οικονομικής λειτουργίας (π.χ. μειωμένη χρήση βοηθητικών παροχών και τροφοδοσίας) του κάθε εναλλακτικού διαγράμματος ροής μέσω της σχέσης (4).

$$\Omega = \int_{\zeta_{opt}}^{\zeta_{opt}} w(\zeta) \cdot \left[ \sum_{i=1}^n \left( \frac{y_i(\zeta) - y_{sp,i}}{y_{sp}} \right)^2 + \sum_{j=1}^m \left( \frac{u_j(\zeta) - u_{ss,j}}{u_{ss,j}} \right)^2 \right] d\zeta \quad (3)$$

$$C_\Omega = w(\zeta) \cdot \sum_{i=1}^n \left( \frac{u_i(\zeta)}{u_{max,i}} \right) \quad (4)$$

όπου ως  $y_i$  δηλώνονται οι μεταβλητές ελέγχου,  $y_{sp,i}$  οι τιμές αναφοράς τους (στόχοι),  $u_i$  οι μεταβλητές χειρισμού της υπό μελέτη μονάδας (πίνακας 1),  $u_{ss,i}$  οι μεταβλητές χειρισμού σε μόνιμη κατάσταση,  $u_{max,i}$  οι μεταβλητές χειρισμού στη μέγιστη επιτρεπτή τιμή τους,  $\zeta$  η ανεξάρτητη παράμετρος συνέχειας και  $w(\zeta)$  τα αντίστοιχα βάρη των μεταβλητών  $u_i$ .

## **ΣΕΝΑΡΙΑ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΜΕΝΗΣ ΛΕΙΤΟΥΡΓΙΑΣ**

Όπως παρουσιάστηκε κατά την ανάλυση της προηγούμενης ενότητας, η υλοποίηση της θεωρίας του σχεδιασμού & ρυθμισιμότητας απαιτήσε ορισμένα βήματα για την πλήρη εφαρμογή της. Στόχο της μελέτης αποτελεί η αξιολόγηση της λειτουργίας των εναλλακτικών διαγραμμάτων ροής ως προς την επίδραση κατ'επιλογή, αλλά συγχρόνως ρεαλιστικών σεναρίων διαταραχών. Τα σενάρια επίδρασης διαταραχών ορίζονται ως εξής:

### **Σενάριο 1**

Έως 15% αύξηση της καταλυτικής δράσης (ενεργότητα) για την ενδόθερμη αναμόρφωση και ανάλογη μείωση για τη εξώθερμη μερική οξειδωση στον αντιδραστήρα αναμόρφωσης.

### **Σενάριο 2**

Έως 15% αύξηση της καταλυτικής δράσης για την εξώθερμη μερική οξειδωση και ανάλογη μείωση της αντίστοιχης για την ενδόθερμη αναμόρφωση στον αντιδραστήρα αναμόρφωσης.

### Σενάριο 3

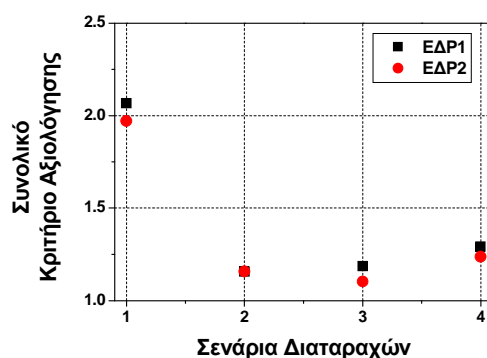
Έως 15% μείωση της καταλυτικής δράσης για την αντίδραση οξείδωσης του CO στον αντιδραστήρα επιλεκτικής οξείδωσης.

Μέτρο σύγκρισης της δυνατότητας του κάθε διαγράμματος ροής ως προς την αντιστάθμιση των διαταραχών αποτελεί η συνάρτηση  $\Omega$  της σχέσης (3) που υποδηλώνει τη σχετική απόκλιση (μεταβολή) των μεταβλητών χειρισμού από τις τιμές της μόνιμης τους κατάστασης, καθώς και η συνάρτηση  $C_\Omega$  της σχέσης (4) που υποδηλώνει το σχετικό οικονομικό κόστος των αντίστοιχων μεταβολών. Στον πίνακα 2, παρουσιάζονται συγκεντρωτικά οι τιμές των δύο κριτηρίων αξιολόγησης για τα τρία σενάρια επίδρασης διαταραχών που αναλύθηκαν.

**Πίνακας 2:** Τιμές κριτηρίων αξιολόγησης για τα υπό μελέτη σενάρια επίδρασης διαταραχών

$\Omega$	Σενάριο 1	Σενάριο 2	Σενάριο 3
<i>EAP1</i> ( $\Omega$ )	0.718	0.045	0.107
<i>EAP2</i> ( $\Omega$ )	0.665	0.085	0.027
<i>EAP1</i> ( $C_\Omega$ )	1.352	1.111	1.079
<i>EAP2</i> ( $C_\Omega$ )	1.306	1.071	1.076

Όπως γίνεται αντιληπτό, το *EAP2* εμφανίζει για όλα τα σενάρια επίδρασης διαταραχών μία άκρως οικονομική λειτουργία που αποτυπώνεται στην τιμή του δείκτη  $C_\Omega$  που υποδηλώνει με την σειρά του τη χαμηλή χρήση κύριων και βοηθητικών παροχών για την αντιστάθμιση των διαταραχών. Η αυξημένη τιμή του δείκτη  $\Omega$  στο σενάριο 2 για το *EAP2* οφείλεται κυρίως στις μεταβολές της μεθανόλης στο φούρνο που είναι υψηλότερες λόγω της αντίστοιχα υψηλότερης μεταβολής των θερμικών αναγκών της τροφοδοσίας που καλείται να καλύψει στο αντίστοιχο σενάριο διαταραχής [13]. Μάλιστα ως επιπλέον κριτήριο για την επιλογή του βέλτιστου διαγράμματος λειτουργίας, παρουσιάζεται το σχήμα 3 που περιλαμβάνει στον κάθετο άξονα την αθροιστική τιμή των κριτηρίων αξιολόγησης  $\Omega$  και  $C_\Omega$  για τα δύο διαγράμματα ροής.



**Σχήμα 3:** Συνολική τιμή κριτηρίου αξιολόγησης κατά τη μελέτη της επίδρασης των διαταραχών



Το βασικό συμπέρασμα που καταγράφεται από τη συνολική ανάλυση της επίδρασης των διαταραχών αποτελεί η επιλογή ως κύριου διαγράμματος ροής για την αξιοποίηση μεθανόλης για την παραγωγή υδρογόνου και εν τέλει ηλεκτρικής ενέργειας το *EAP2*, καθώς συνδυάζει επιτυχώς τη βέλτιστη αντιστάθμιση των διαταραχών με την άριστη οικονομική λειτουργία του ολοκληρωμένου συστήματος παρόλη την επίδραση κατ'επιλογή διαταραχών.

## ΕΠΙΛΟΓΟΣ

Στην παρούσα εργασία μελετήθηκε η επιλογή της βέλτιστης λειτουργίας ενός ολοκληρωμένου συστήματος αξιοποίησης μεθανόλης χρησιμοποιώντας δύο εναλλακτικά διαγράμματα ροής. Οι διαταραχές που μελετήθηκαν αφορούσαν τη μεταβολή της ενεργότητας των καταλυτικών δράσεων των δύο αντιδραστήρων είτε αυξητικά είτε μειωτικά ως προς την πορεία των επιμέρους χημικών αντιδράσεων. Μέσω της αξιολόγησης της λειτουργίας (στατική ανάλυση) των δύο διαγραμμάτων ροής υπό την επίδραση της κάθε μίας διαταραχής, προέκυψαν σημαντικά συμπεράσματα που ανέδειξαν την δυνατότητα του κάθε διαγράμματος να διατηρήσει τα βασικά χαρακτηριστικά της διεργασίας (στόχοι ελέγχου) σε συνδυασμό με την οικονομική του λειτουργία. Μέσω του βελτιωμένου στατικού κριτηρίου (σχετική απόκλιση μεταβλητών χειρισμού και απόκλιση από τα επιτρεπτά /μέγιστα όρια λειτουργίας), προέκυψε πως το *EAP2* εμφάνισε υψηλότερες δυνατότητες αντιστάθμισης διαταραχών, καθώς κατάφερε να συνδυάσει τις χαμηλές μεταβολές των μεταβλητών χειρισμού από τη μόνιμη κατάσταση με τη χαμηλή κατανάλωση βοηθητικών παροχών του συστήματος (υψηλότερη οικονομική απόδοση με μειωμένα συνολικά λειτουργικά κόστη).

## ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ

Θερμές ευχαριστίες εκφράζονται προς τις Δράσεις Εθνικής Εμβέλειας “Συνεργασία” στα πλαίσια της χρηματοδότησης ΕΣΠΑ 2007-2013 για το ερευνητικό πρόγραμμα Σχεδιασμός και Ανάπτυξη Υβριδικού Συστήματος Παροχής Ισχύος για Κίνηση Οχημάτων.

## ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] Ipsakis D., Voutetakis S., Seferlis P., Stergiopoulos F., and Elmasides C., *International Journal of Hydrogen Energy*, Volume 34 (16), 2009, pp. 7081-7095
- [2] Ipsakis D., Voutetakis S., Seferlis P., Stergiopoulos F., Papadopoulou S. and Elmasides C., *Energy*, Volume 33, 2008, pp. 1537-1550
- [3] Ouzounidou M., Ipsakis D., Voutetakis S., Papadopoulou S., Seferlis, P., Volume 34 (10), 2009, pp. 1733-1743
- [4] Lindström B. Petterson L.J., *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 26, 2001, pp. 923-933.
- [5] Amphlett J. C., Creber K. A. M., Davis J. M., Mann R. F., Peppley B. A. and Stokes D. M., *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 19, 1994, pp. 131-137
- [6] Son, I.H., Shin, W.C., Lee, Y.K., Lee, S.C., Ahn, J.G., Han, S.I., Kweon, H.G., Kim, J.Y., Kim, M.C., Park, J.Y., 35-We polymer electrolyte membrane fuel cell system for notebook computer using a compact fuel processor, *Journal of Power Sources*, Volume 185 (1), 2008, pp. 171-178
- [7] Liu, N., Yuan, Z., Wang, C., Pan, L., Wang, S., Li, S., Li, D., Wang, S., Bench-scale methanol autothermal reformer for distributed hydrogen production, *Chemical Engineering Journal*, Volume 139 (1), 2008, pp. 56-62
- [8] Stamps, A.T., Gatzke, E.P., Dynamic modeling of a methanol reformer—PEMFC stack system for analysis and design, *Journal of Power Sources*, Volume 161 (1), 2006, pp. 356-370
- [9] El-Sharkh, M.Y., Rahman, A., Alam, M.S., Byrne, P.C., Sakla, A.A., Thomas, T., A dynamic model for a stand-alone PEM fuel cell power plant for residential applications, *Journal of Power Sources*, Volume 138 (1-2), 2004, pp. 199-204

- [10] Wu, W., Pai, C.C., Control of a heat-integrated proton exchange membrane fuel cell system with methanol reforming, *Journal of Power Sources*, Volume 194 (2), 2009, pp. 920-930
- [11] Lin, S. T., Chen, Y.H., Yu, C.C., Liu, Y.C., Lee, C.H., Dynamic modeling and control structure design of an experimental fuel processor, *International Journal of Hydrogen Energy*, Volume 31 (3), 2006, pp. 413-426
- [12] Seferlis, P., Georgiadis, M.C., The integration of process design and control-Summary and future directions, *The Integration of Process Design and Control*-P.Seferlis and M.C. Georgiadis (Editors), Elsevier B.V., 2004
- [13] Ιψάκης, Δ., Σχεδιασμός και βέλτιστη λειτουργία ενεργειακών συστημάτων με αξιοποίηση ανανεώσιμων και εναλλακτικών πηγών, Διδακτορική Διατριβή, υποβληθείσα στο τμήμα Χημικών Μηχανικών του Α.Π.Θ., 2011