



Doctoral Thesis

Some aspects of gas liquid reactor optimisation performance improvement in semi-batch stirred tank reactors by manipulating the inlet gas flow rate

Author(s):

Liebman, Dennis

Publication Date:

1975

Permanent Link:

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-000077112> →

Rights / License:

[In Copyright - Non-Commercial Use Permitted](#) →

This page was generated automatically upon download from the [ETH Zurich Research Collection](#). For more information please consult the [Terms of use](#).

**SOME ASPECTS
OF
GAS LIQUID REACTOR OPTIMISATION
– PERFORMANCE IMPROVEMENT IN SEMI-
BATCH STIRRED TANK REACTORS BY
MANIPULATING THE INLET GAS FLOW RATE**

ABHANDLUNG
zur Erlangung des Titels eines
Doktors der Technischen Wissenschaften
der
EIDGENOESSISCHEN TECHNISCHEN HOCHSCHULE
ZUERICH

vorgelegt von
DENNIS LIEBMAN
Dipl. Ing.-Chem. E.T.H. Zürich
geboren am 2. August, 1947
in Südafrika

angenommen auf Antrag von
Prof. Dr. D.W.T. Rippin – Referent
Prof. Dr. J.R. Bourne – Korreferent

aku-Fotodruck
Zürich
1975

ZUSAMMENFASSUNG

=====

Es wurde die in einem Rührkessel ablaufende gas-flüssig Reaktion



modelliert. Es wurde eine halbchargenweise Betriebsart angenommen, wobei das flüssige Edukt am Anfang vorgelegt, und das Gas als kontinuierlicher Strom eingeleitet wurden. Ziel der Untersuchung war es, den Einfluss des Gasdurchsatzes auf die Reaktorleistung bezüglich Ausbeute und Kosten zu bestimmen. Behandelt wurde der Fall eines einzigen irreversiblen Reaktionsschrittes, mit einer biomolekularen Kinetik zweiter Ordnung. Es wurde angenommen, dass beide Phasen ideal durchmischt, und sowohl Temperatur, wie auch Druck konstant sind. Vier mathematische Modelle von unterschiedlicher Komplexität wurden aufgestellt. Einflüsse, wie die Verdampfung des flüssigen Eduktes, und die Löslichkeit der gasförmigen Reaktanden wurden berücksichtigt. Der Gasdurchsatz wurde im Verhältnis 1:10 variiert, der maximale Durchsatz war durch die angenommene Reaktorkonstruktion gegeben. In der Simulationsrechnung wurden die Reaktionsgeschwindigkeits-Konstanten im Verhältnis 1:200 variiert. Es stellte sich heraus, dass während der Anfangsphase der Reaktion, der Gasdurchsatz der geschwindigkeitslimitierende Faktor war. Bei höheren Umsätzen wurde die chemische Reaktion geschwindigkeitslimitierend. Innerhalb des untersuchten Parameterbereiches unterschieden sich die Resultate der Modelle um nur wenige Prozente voneinander. Die zwei einfachsten Modelle, die eine, bzw. zwei Differential-Gleichungen enthielten, und den Widerstand für Stoffübergang vernachlässigten, wurden demzufolge als geeignet für die nachfolgenden Optimierungen betrachtet.

Das Extremum-Prinzip von Pontryagin, angewendet auf das Modell mit einer Differentialgleichung, mit dem Ziel, eine funktionelle Abhängigkeit vom Zustandsvektor am zeitlichen Endpunkt zu minimalisieren (oder maximalisieren), erlaubte das Ableiten von allgemein gültigen Resultaten bezüglich des optimalen Gasdurchsatzes am Reaktoreingang. Das Profil des optimalen Gasdurchsatzes wurde aufgestellt für den Fall des Gasdurchsatzes ohne Restriktionen, und für den Fall des auf einen maximalen Wert begrenzten Gasdurchsatzes. Es wurde bewiesen, dass für einen grossen Bereich von Zielfunktionen, inklusive die nachfolgenden Typen, der Gasdurchsatz proportional der Quadratwurzel der Konzentration des flüssigen Eduktes sein sollte. Für vier Zielfunktionen wurde die optimale Betriebsführung mit dem besten konstanten Gasdurchsatz verglichen:

- Minimalisierung des Gasverbrauches, um einen gegebenen Umsatz des flüssigen Eduktes zu erreichen. Bei Umsätzen, die sich 100% nähern (Gasdurchsatz ohne Restriktionen), nähert sich die maximale Gaseinsparung 100%.
- Minimalisierung der Produktionskosten pro Mol Produkt. Die maximale Ersparnis beträgt 1.46%. Sie wird erreicht, wenn die dimensionslose Reaktionszeit, $\theta \approx 13$, und $(1 + \alpha_1 \theta) / \alpha_2 \approx 3.3$ ist (α_1 ist ein dimensionsloser Parameter der Betriebskosten, und α_2 das Verhältnis der Kosten von gasförmigen, und flüssigen Edukten).
- Minimalisierung der Produktionskosten, um eine vorgeschriebene Produktmenge in einer vorgegebenen Produktionsperiode herzustellen. Die maximal realisierbare Kostenersparnis nimmt mit zunehmender Zeit zwischen den einzelnen Chargen zu. Wenn diese "Zwischenchargenzeit" im Verhältnis

zu der eigentlichen Reaktionszeit sehr gross wird, dann kann diese Einsparung bis zu 100% betragen. Eine Einsparung von ungefähr 4% wurde dann erreicht, wenn die Reaktionszeit gleich lang war, wie die "Zwischenchargenzeit".

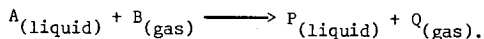
- Maximalisierung des Gewinnes mit der vorhandenen Anlagenkapazität unter der Annahme, dass die gesamte Produktionsmenge verkauft werden kann. Für die in dieser Studie benützten Parameterwerte, war eine Gewinnzunahme von 5% erreichbar.

Für das Modell mit zwei gewöhnlichen Differentialgleichungen, konnte keine allgemeine Lösung gefunden werden. Für die Minimalisierung der Produktionskosten pro Mol Produkt bei vorgegebenen Reaktionszeiten, wurde der Regelvektor durch ein iteratives Verfahren optimiert (Control Vector Iteration). Mit diesem Modell ist der Vorteil der optimalen Strategie, verglichen mit derjenigen des besten konstanten Gasdurchsatzes, etwas grösser, als mit dem vorhergehenden Modell. Die Resultate wurden auch mit denjenigen einer suboptimalen Strategie für die Minimalisierung der Produktionskosten verglichen.

Hier wurde eine parameterisierte Form des Gasdurchsatzes als Funktion der Zeit optimiert. Die Resultate dieser Optimierung waren nicht sehr verschieden von denen der Regelvektor-Iterationsmethode.

ABSTRACT

A stirred tank reactor has been modelled for a gas-liquid chemical reaction of the type :



A semi-batch operation was considered in which all the liquid reactant is charged initially, but the gas is continuously bubbled through the reactor. The objective of the investigation was to determine the effect of the inlet gas flow rate on the reactor performance in terms of yield and cost. The case has been treated for a single-step and irreversible reaction displaying second-order, bimolecular reaction kinetics. Perfect mixing has been assumed in both phases. The operating conditions were those of constant temperature and pressure. Four models of varying detail were derived. Effects such as the evaporation of the liquid reactant and the solubility of the gaseous species were included. The system behaviour was investigated for a 10-fold range of the inlet gas flow rate, with the maximum value being the maximum allowed for by the reactor design. Reaction rate constants were varied by a factor of 200 in the simulations. It was generally found that in the early stages of the reaction the rate limiting factor was the inlet gas flow rate. At high conversions the chemical reaction rate became limiting. Performance predictions for all the models agreed to within a few percent over the parameter range studied. The two simplest models, containing respectively one and two ordinary first order differential equations, and in both of which mass transfer resistance was neglected, were thus considered suitable for use in the subsequent optimisation studies.

Applying Pontryagin's extremum principle to the 1-differential equation model, with the objective of minimising (or maximising) a functional dependence of the state at final time, enabled general results regarding the optimal inlet gas flow rate profile to be obtained. The form of the optimal gas flow rate policy was established for unconstrained gas flow and for the case of a maximum permitted gas

flow. It was proved that for a wide class of objective functions, including all those discussed below, the optimal gas flow rate should be proportional to the square root of the concentration of the liquid reactant. The optimal operating policy was compared with the best constant gas flow rate policy for four objective functions with the following results:

- minimisation of the gas consumption to obtain a specified conversion of liquid reactant. For unconstrained flow rate the saving approaches 100% as the conversion requirement increases to 100%.
- minimisation of the production costs per mole of product. The maximum saving is about 1.46%, which is obtained for a dimensionless reaction time, $\theta \sim 13$ and $(1 + \alpha_1 \cdot \theta) / \alpha_2 \sim 3.3$. (α_1 is a dimensionless operating cost parameter and α_2 is the ratio of the gaseous to liquid reactant costs).
- minimisation of the production costs to satisfy a specified production rate. The maximum possible saving increases as the time required to change over between batches increases. For extremely large changeover times with respect to the batch reaction time, the saving would approach 100%. A saving of approximately 4% is achieved when the best batch time is equal to this intermediate time.
- maximisation of the profit with the available equipment capacity, assuming all the product can be sold at a specified price. An increase of 5% was obtainable for the parameters used in this study.

In using a model consisting of two differential equations, no general results could be obtained. A control vector iteration procedure was used to minimise the gas consumption to obtain a specified conversion of liquid reactant, and to minimise the production costs per mole of product in a specified reaction time. With this model, the advantage of the optimal policy over the best constant policy was somewhat greater than for the simple model. The results were also compared with a suboptimal policy for the second objective function, where a parameterised form of the control as a function of time was optimised. The results of this optimisation were not far different from those obtained by the control vector iteration method.