

PRAKTICKÉ ZKUŠENOSTI SE SIMULACÍ SLOŽITÝCH CHEMICKÝCH KONTINUÁLNÍCH PROCESŮ

JAROSLAV POŽIVIL

Ústav počítačové a řídicí techniky, Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 166 28 Praha 6, e-mail: Jaroslav.Pozivil@vscht.cz

Došlo dne 26.IX.2000

Klíčová slova: simulace, chemické kontinuální procesy

Obsah

1. Úvod
2. Cíle simulačních výpočtů v chemickém průmyslu
3. Nástroje simulace chemických procesů
4. Některé problémy při realizaci simulačních výpočtů
 - 4.1. Analýza topologie procesu a sestavení výpočetního schématu
 - 4.2. Modely aparátů
 - 4.3. Databanka fyzikálně-chemických vlastností
 - 4.4. Vstupní data
 - 4.5. Přízpusobení modelu reálnému chování výroby
 - 4.6. Aktualizace simulačního modelu a jeho další využívání
 - 4.7. Další možnosti využívání simulačních programů
5. Závěr

1. Úvod

V chemickém průmyslu se setkáváme s výrobami s velkým množstvím vzájemně propojených aparátů a s významnými interakcemi hmoty, energie a hybnosti. V zařízení se zpracovávají složité směsi rozmanitých chemických látek často nestandardního chování v širokém rozmezí pracovních podmínek (teplot, tlaků, koncentrací apod.). Modely jednotlivých aparátů obvykle vyžadují řešení soustav nelineárních algebraických a diferenciálních rovnic, v některých případech (kolony) i velmi rozsáhlých. Přesto je modelování jednotlivých operací dobře propracováno a patří ke standardním metodám chemického inženýrství. Naproti tomu chování výrobní linky jako celku nelze předpovědět bez složitých výpočtů. Vzhledem ke složitosti systému se řadí simulace celé výrobní linky mezi obtížnější úlohy. U kontinuálních výrob ve stacionárním stavu bylo řešení těchto problémů významně usnadněno existencí univerzálních simulačních programů. Problematice je věnována rozsáhlá literatura, z nejdostupnějších prací lze uvést¹⁻³.

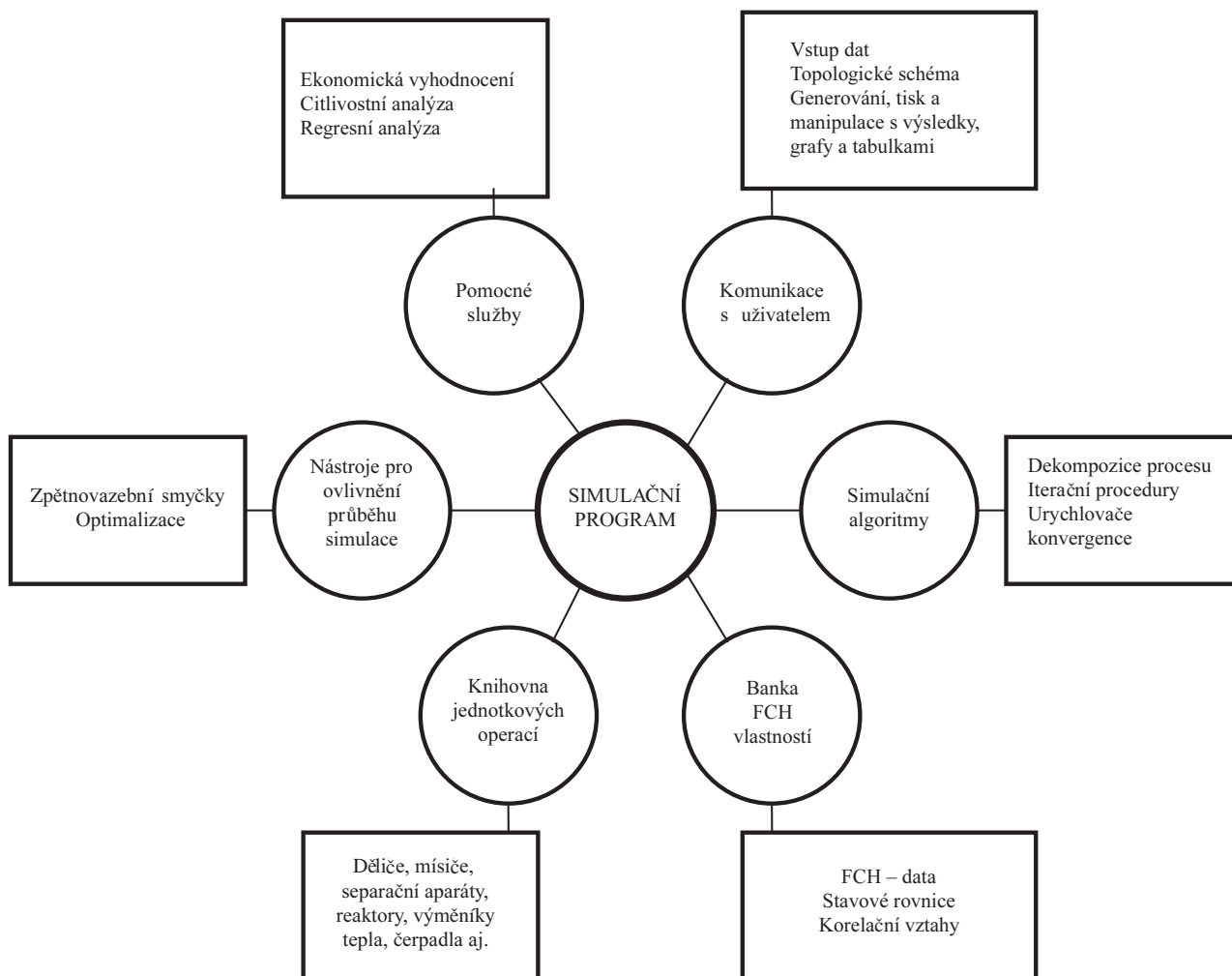
Relativní dokonalost a snadné ovládání v příjemném uživatelském prostředí vytváří idealizované představy o bezproblémovém používání univerzálních simulačních programů. Zkušenosti se simulačními programy však ukazují, že přes

jejich univerzálnost a uživatelský komfort by měl být uživatel i po potřebném zaškolení maximálně obezřetný. Při řešení reálných průmyslových úkolů se vyskytují problémy, např. s výběrem modelů aparátů, s popisem fyzikálně-chemických vlastností, se získáváním provozních a konstrukčních dat apod., které způsobují, že výsledky modelu neodpovídají skutečnému chování výrobního zařízení. O některých z těchto problémů se diskutuje v této práci.

2. Cíle simulačních výpočtů v chemickém průmyslu

Povrchnímu pozorovateli by se mohlo zdát, že simulační výpočty slouží na jedné straně pracovníkům vědy a výzkumu k vytváření publikací a získávání příslušných bodů a na druhé straně pracovníkům průmyslu, kterým osvětlený šéf umožnil práci se simulačním programem, k příjemnému vyplnění nemnohých volných chvil testováním různých možností systému. Ve skutečnosti by však simulační výpočty měly sloužit jednomu hlavnímu cíli, a to úspoře finančních nákladů, resp. vytváření zisku. Toho lze dosáhnout různými způsoby, z nichž lze uvést:

1. Získání důkladných znalostí o chování celého systému, zejména o interakcích mezi jednotlivými jednotkami výrobní linky, které jsou v chemii spojeny recykly nejrůznější úrovně, sdílením tepla apod.
2. Určení funkce výrobní linky při změně vstupních proudů (zejména odezva na změny jakosti surovin, koncentrace zpracovávaných látek apod.).
3. Určení chování linky při změně některého aparátu (poměrně častá výměna aparátů vynucená v chemickém průmyslu zejména korozí bývá spojena se změnou rozměrů, popř. typu aparátů, někdy i změnami propojení a rozmístění).
4. Zjišťování účinku změn provozních podmínek na režim výroby (jde zejména o zjištění citlivosti některé veličiny, např. stupně přeměny v reaktoru na změny teploty, tlaku apod.).
5. Vyhledávání úzkoprofilových článků výrobní linky, simulace návrhů na jejich odstranění a následující intenzifikace výroby.
6. Úpravy technologického režimu vedoucí ke snížení energetické náročnosti výroby, která bývá v chemickém průmyslu vysoká.
7. Úpravy technologického režimu vedoucí ke snížení zatížení životního prostředí, které patří v chemickém průmyslu mezi základní problémy.
8. Zlepšení řízení technologického procesu, resp. v první fázi získání podkladů pro návrh automatizovaného systému řízení.
9. Školení obsluhy, zejména získání citu pro účinnost jednotlivých zásahů do provozního režimu a možné zdroje potíží pro velký rozsah provozních podmínek (schopnosti i dobře vyškolené obsluhy řešit havarijní problémy při dlouhotrvajícím bezporuchovém provozu prudce klesají, k nápravě může sloužit právě simulace).



Obr. 1. Struktura simulačního programu

Ke splnění stanovených cílů je třeba, aby výsledky simulačních výpočtů byly verifikovány a kriticky posouzeny z hlediska přesnosti a použitelnosti, a aby z nich byly vyvozeny praktické závěry.

3. Nástroje simulace chemických procesů

Simulace chemických procesů vyžaduje znalosti simulovaného procesu (technologie), chemického inženýrství (modely aparátů), fyzikální chemie (metody termodynamického popisu chemických systémů) a výpočetní problematiky (numerické metody, nalezení pořadí výpočtů u systémů s recykly, zrychlování konvergence a optimalizace). Proto byla k usnadnění výpočtů vyvinuta řada univerzálních simulačních programů, které osvobozují uživatele od rutinní práce (ať už pracovních ručních výpočtů nebo sestavování programů) a umožňují se soustředit na tvůrčí činnost. Z původních implementací na sálových počítačích spojených s dávkovým zpracováním se vyvinuly moderní interaktivní programy implementované na osobních počítačích a opatřené současnými standardními prvky grafického uživatelského rozhraní (okna, menu, inteligent-

ní formuláře apod.). Z neznámějších jmenujme např. PRO/II, ChemCAD, HYSYS nebo ASPEN PLUS. Jejich struktura, filozofie použití i možnosti jsou velmi podobné a liší se spíše z hlediska komunikace s uživatelem.

Jednotlivé simulační programy mají několik společných základních částí¹, mezi které mj. patří:

- komunikace s uživatelem (vstup dat, prezentace výsledků),
- algoritmy pro řízení simulačního výpočtu – ve většině případů se používá sekvenčně-modulární metoda,
- knihovna jednotkových modulů,
- knihovna fyzikálně-chemických vlastností a databáze fyzikálně-chemických dat,
- nástroje pro ovlivnění simulačního výpočtu uživatelem – zpětnovazební smyčky, citlivostní analýza, optimalizační procedury,
- pomocné služby – grafické prostředky, zpracování experimentálních dat regresními metodami, odhad konstant fyzikálně-chemických vztahů, ekonomické vyhodnocení, aj.

Základní struktura obecného simulačního programu je přehledně znázorněna na obr. 1.

4. Některé problémy při realizaci simulačních výpočtů

V této kapitole vycházíme ze svých dlouholetých zkušeností se simulací průmyslových procesů. Již v letech 1973–76 jsme se účastnili první takové akce v tehdejší Československu – simulace výroby kyseliny sírové ve Spolaně Neratovice pomocí simulačního programu Pacerovského typu na dřevných štítcích^{4,5}. V simulačních výpočtech jsme dále pokračovali (např.⁶) až po zatím poslední simulaci zařízení na čištění surového generatorového plynu⁷.

Před zahájením simulací je nutným prvním krokem stanovení dobře definovaných, realistických a účelných cílů. Od nich se odvíjí nároky na přesnost a základní předpoklady modelů, výběr proměnných a postup simulace. Konečný cíl výpočtů by měl být ekonomický (snížení nákladů, minimalizace počtu experimentů), i když se pracuje převážně s fyzikálními parametry. Od začátku je třeba sledovat, zda vynaložené prostředky jsou adekvátní cílům simulace. Proto se po celou dobu testuje, zda nelze použít jednodušších modelů (lineárních), zda nelze použít jednodušších (modelových) směsí látek, zda nelze zjednodušit výpočetní schéma atd.

4.1. Analýza topologie procesu a sestavení výpočetního schématu

Při sestavování výpočetního schématu podle technologických výkresů je třeba si klást otázky typu: která potrubí se skutečně používají, která slouží jen k najíždění/odstavování linky či k havarijním účelům (nouzové přečerpávání). Dále, které části výroby jsou relevantní cílům úlohy, zda je nutné zahrnout i chladicí hospodářství, vodní okruhy apod. Maximální úsilí je třeba věnovat snaze o zjednodušení topologického schématu. Na druhé straně je třeba se ptát, zda jsme nezapomněli na nehmotné proudy, např. energetické (prostup tepla z kondenzátoru jedné rektifikační kolony do vařáku druhé v zařízení na dělení vzduchu⁴), konanou práci či vstup elektrické energie do dmyhadla při výrobě kyseliny sírové^{4,5}.

Nemělo by se začínat s plnou formulací úlohy, na začátku by se uživatel měl vyhnout zbytečným recyklům.

4.2. Modely aparátů

Protože simulační program má pro některé jednotkové operace k dispozici několik modelů, musí být uživatel schopen posoudit vhodnost použití jednotlivých modelů pro danou úlohu. Začátečník obvykle volí modely co nejpřesnější a tudíž nejsložitější, zatímco zejména v prvních fázích simulace by se měli upřednostňovat modely jednodušší (bilanční). Komplexnější uzly se simulují odděleně a postupně se zařazují do simulačního programu. Odstraňování problémů s modely obvykle ztěžuje nedostatečný popis modelů a výpočetních rovnic v uživatelských manuálech.

Důležitou otázkou pro řešitele je, jak lze počet aparátů redukovat. Např. filtr širšího plynu lze zahrnout jako tlakovou ztrátu do následujícího aparátu, nebo při stacionární simulaci není třeba uvažovat zásobníky². Někdy lze více operací sloučit a použít zjednodušený model, např. místo reaktorového

uzlu model s pevně zadanou konverzí, místo separačního uzlu model s pevně daným rozdělením.

A naopak, nesmí se zapomenout na modely v technologickém schématu speciálně nevyznačené jako je větvení a spojování potrubí – modely mísičů a děličů.

4.3. Databanka fyzikálně-chemických vlastností

Důležitou součástí simulačního výpočtu je modelování fyzikálně-chemického chování zpracovávaných látek, zejména stavového chování a popisu fázových rovnováh. Není třeba, aby uživatel sestavoval modely fyzikálně-chemických vlastností, ale musí být schopen posoudit a vybrat vhodný model z knihovny podle rozsahu teplot, tlaků a koncentrací, podle typu látek (elektrolyty, polární a disociované sloučeniny, neideální směsi atd.). V nápovědě bývá doporučení jak pro typ látek, tak pro rozsah stavových podmínek. Modelování fyzikálně-chemických vlastností může způsobovat při simulacích více problémů než modelování aparátů. Proto doporučujeme v případě pochybností konzultovat fyzikálního chemika. Podobně jako u jednotkových operací považujeme i u termodynamických modelů popis v uživatelských manuálech za nedostatečný.

Při praktickém řešení je výhodné nejprve ověřit fyzikálně-chemický model na jedné jednotkové operaci. Směsí složek podobných vlastností můžeme chápat jako jednu pseudosložku (např. ropné frakce). Simulační programy mají obvykle aparát pro definování jejich vlastností.

Např. plynárenství se považuje za oblast, kde lze s výhodou univerzální simulační programy používat, protože organické látky nedělají při výpočtech takové potíže jako silně polární a silně disociované sloučeniny. Přesto jsme při simulaci procesu na čištění generatorového plynu měli značné problémy (nemísitelné směsi, třífázové směsi apod.), které vedly ke špatné konvergenci některých modelů. Byly zřejmě způsobeny numerickými vlastnostmi použité stavové rovnice v extrémních stavových podmínkách. Proto je třeba mít dostatek informací o použitých modelech fyzikálně-chemických vlastností a mít možnost volit/zaměnit použitý model.

4.4. Vstupní data

Při modelování průmyslového zařízení bývá nepřijemným problémem získání dostatečného počtu údajů o aparátech a proudech. Obecně mohou být zdrojem potřebných dat měření v provozu, technologický reglement, technická (zejména výkresová) dokumentace a odborná literatura (encyklopedie, internet). V ideální situaci jsou známy parametry vstupních proudů a parametry aparátů a počítají se parametry výstupních proudů (základní simulační úloha – open simulation). Realita je však více či méně od tohoto ideálního stavu vzdálena.

To se nám potvrdilo např. v našem posledně řešeném případě simulace procesu na čištění generatorového plynu. Nepodařilo se např. zjistit počty teoretických pater v kolonách, proto jsme účinnost patra odhadli. Rovněž se nepodařilo zjistit údaje o vnitřních proudech systému, jejichž znalost jednak usnadňuje ladění modelu po částech, jednak umožňuje nastavit parametry modelů jednotlivých aparátů (např. právě počty teoretických pater). Vstupní a výstupní proudy ze systému jsou obvykle známy, přesto se v našem případě vyskytly určité

potiže, protože u méně významných proudů, jako byl v uvedeném případě benzin, je známa jen hodnota roční produkce a přepočít na hodinový průtok může být zatížen značnou chybou danou přesností údaje o fondu pracovní doby. Dalším problémem je používání průměrných údajů, zatímco skutečné hodnoty během roku významně kolísají. Uvedený provoz je instalován pod širým nebem a pracuje za nízkých teplot až $-60\text{ }^{\circ}\text{C}$, takže vliv klimatických podmínek na teploty je při nedokonalé izolaci evidentní. Obsah sulfanu, stejně jako spalné teplo plynu rovněž značně kolísají podle okamžité kvality, resp. simatosti těženého uhlí. Standardní problémy jsou s přesností provozních měření, popř. jejich rozsahem (např. analýza uhlovodíků v surovém plynu se provádí jen do C_4 , takže zbytek byl dopočten z produkce benzínu, resp. složky s obsahem pod 0,1 % jsme zanedbali). Chyba měření nemusí být způsobena měřicími přístroji, ale např. tím, že v relativně krátkých potrubích velkého průměru není plyn smíchaný za obchvatem výměníku dostatečně promíchán. Opakujícím se problémem při řešení simulačních úloh je vývoj technologie v čase, který není adekvátně podchycen v dostupné dokumentaci. Zejména výkresová dokumentace aparátů bývá historická, nehledě na korozi, zanášení aparátů apod.

4.5. Přizpůsobení modelu reálnému chování výroby

Při sestavování simulačního modelu přijímáme zjednodušující předpoklady (už kvůli tomu, aby model nebyl příliš složitý), resp. neznáme dostatečně některé mechanismy modelovaných dějů. Používané empirické korelace (např. pro výpočet součinitelů přestupu tepla) jsou zatíženy chybou. Z těchto a dalších důvodů výsledky výpočtů zcela neodpovídají skutečnému chování aparátů ve výrobě. Model obvykle neumožňuje zásah do programového kódu, ale jeho chování můžeme ovlivňovat nastavováním hodnot různých parametrů. Pro dosažení lepší shody je vhodnější používat nastavitelné parametry modelů odpovídající mechanismu modelovaného děje než umělé korekční koeficienty (nebo jak se říká Cimrmanovy konstanty). Např. při simulaci trubkového výměníku tepla nebudeme podle výsledků měření korigovat výstupní teplotu, ale upravíme faktor znečištění $1/\alpha_z$ v součiniteli prostupu tepla

$$\frac{1}{k} = \frac{d_2}{\alpha_1 d_1} + \frac{d_2}{2\lambda} \ln \frac{d_2}{d_1} + \frac{1}{\alpha_2} + \frac{1}{\alpha_z}$$

tak, abychom dosáhli shody v hodnotě výstupní teploty. Podobně při simulaci adiabatické vrstvy vanadového katalyzátoru na oxidaci SO_2 nebudeme podle změřené konverze oxidu siřičitého opravovat složení výstupního plynu, ale korigujeme frekvenční faktor v rychlostní konstantě opravným koeficientem Z

$$k = Z A e^{\frac{-E}{RT}}$$

tak, aby vypočtený stupeň přeměny na výstupu z vrstvy katalyzátoru, resp. adiabatický přírůstek teploty byl ve shodě se skutečností. Podobně u rektifikační kolony měníme počet teoretických pater nebo i refluxní poměr, který může zajistit

přijatelnou shodu výsledků s realitou, byť se bude lišit od původně zadané hodnoty.

4.6. Aktualizace simulačního modelu a jeho další využívání

Vzhledem k nákladům vynaloženým na vytvoření simulačního modelu je žádoucí, aby byl i po splnění stanovených cílů dále využíván. K tomu je třeba zajistit, aby dostatečně přesně zobrazoval skutečný stav výroby. Vzhledem k neustálým změnám v chemických výrobních (dílní rekonstrukce, výměny aparátů, provozní vlivy jako je změna aktivity katalyzátorů, zanášení výměníků, koroze apod.) je proto nutné, aby byl model průběžně aktualizován a jeho aktuální stav dokumentován. Z organizačního hlediska je vhodné, aby pro údržbu a správu modelu byl určen jeden zodpovědný pracovník. Archivace standardní referenční verze a aktualizovaných verzí včetně dokumentace vyžaduje určitý řád, který nezdědka přispívá k úspěšnosti dalšího využívání modelu.

4.7. Další možnosti využívání simulačních programů

Simulační programy poskytují významné možnosti i v dalších oblastech chemie. Jedná se mj. o tyto oblasti:

Reálné chování tekutin – pomocí modelů proudů nebo např. některých modelů výměníků lze sledovat, jak se mění stavové vlastnosti dané směsi v závislosti na jejím stavu a složení a podle výběru stavové rovnice.

Termochemie – prakticky celou ji lze studovat pomocí modelu adiabatického stechiometrického reaktoru.

Fázové rovnováhy – modely rovnovážných destilací a některých výměníků jsou vhodné pro sledování dvofázových (kapalina–pára) nebo třífázových (kapalina–kapalina–pára) rovnováh reálných směsí tekutin v závislosti na vlastnostech vstupních proudů a parametrech modelu jednotkové operace. Pro systémy s více kapalnými fázemi je možno použít model rovnovážného reaktoru založený na minimalizaci celkové Gibbsovy energie systému.

Chemické rovnováhy – pro modelování chemických rovnováh v homogenních a vícefázových soustavách i je možno rovněž použít model rovnovážného reaktoru. Je možno nastavovat množství vybraných sloučenin ve výstupních proudech, inertní sloučeniny, teplotní rozsah pro celkovou rovnováhu systému nebo pro jednotlivé reakce a sledovat jejich vliv na složení a další vlastnosti výstupních proudů.

5. Závěr

Simulační programy se neustále zdokonalují. Běžně využívají uživatelské rozhraní MS Windows, zahrnují stacionární a dynamickou simulaci v jednom celku, rozšiřují se knihovny modelů (např. o aparáty na zpracování tuhé fáze) atd. Budoucnost mají komplexní systémy umožňující vývoj nového procesu, jeho návrh (projekci), simulaci, ekonomické zhodnocení a řízení procesu. I přes neustálé zdokonalování simulačních programů však zůstávají některé problémy s jejich využíváním stejné a je třeba jim věnovat pozornost, aby výsledky výpočtů byly hodnověrné a celá simulace byla ekonomicky efektivní. Snad k tomu přispěje i tato práce.

LITERATURA

1. Poživil J., Vaněk T., Bernauer B.: *Procesní systémové inženýrství*. VŠCHT, Praha 1998.
2. Hlaváček V., Václavěk V., Kubíček M.: *Bilanční a simulační výpočty složitých procesů chemické technologie*. Academia, Praha 1979.
3. Smith R.: *Chemical Process Design*. McGraw-Hill, New York 1995.
4. Čermák F., Michálek J., Poživil J.: Chem. Prum. 30/55, 451 (1980).
5. Čermák F., Michálek J., Poživil J.: *Racionalizace chemických výrob.* SNTL, Praha 1989.
6. Pazdera K., Poživil J.: *Simulation of Oxygen Plant with the Help of the Program ASPEN Plus, Proc. 31st Int. Conf. MOSIS '97, 28.–30.4.1997, Hradec nad Moravicí*, str. 153.
7. Poživil J.: Ropa Uhlie Plyn Petrochem. 42, 42 (2000).

J. Poživil (*Department of Informatics and Control Engineering, Institute of Chemical Technology, Prague*): **Practical Experience with Simulation of Complex Chemical Continuous Processes**

The paper deals with simulations of steady-state continuous chemical processes. Currently, user-friendly universal simulation programs are available, which free the user from routine programming work and allow him/her to concentrate effort on creative work. Despite their seemingly easy use, maximum caution is to be maintained when dealing with industrial problems. Some problems associated with realization of simulation calculations including instruction for their solutions are described. The aim of this paper is to contribute to enhanced reliability of simulation calculations and to increase economic efficiency of simulations.