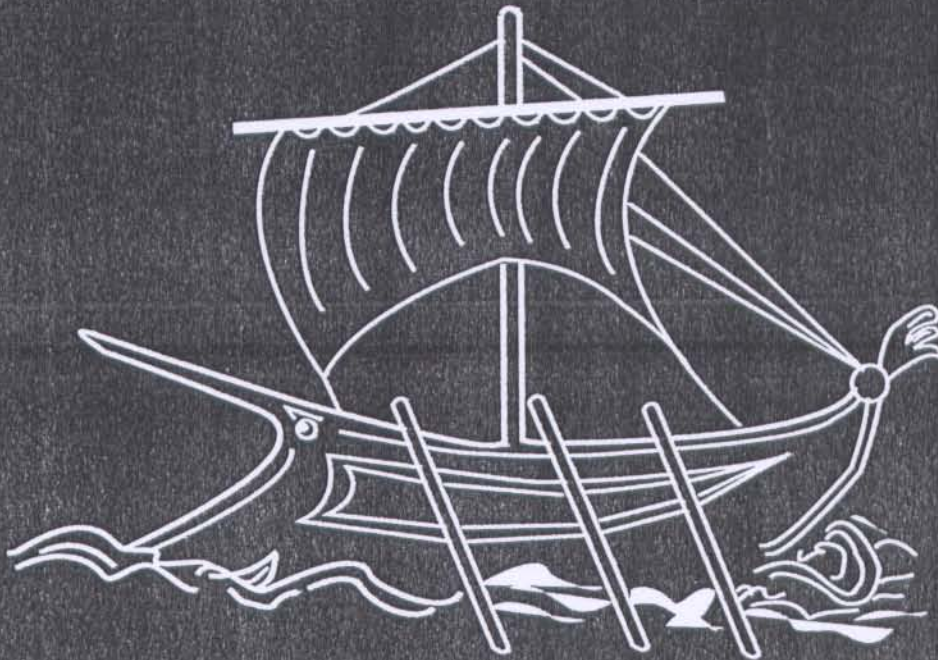


**Τ.Ε.Ι. ΠΕΙΡΑΙΑ**  
Τμήμα Αυτοματισμού

πρακτικά συνεδρίου

# "ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑ ΚΑΙ ΑΥΤΟΜΑΤΙΣΜΟΣ"



9 & 10 Μαΐου 1996

## Περίληψη

Το πρόγραμμα "Προσομοιωτής Δυναμικής Χημικών Διεργασιών" αναπτύχθηκε με στόχο να αποτελέσει ένα εκπαιδευτικό εργαλείο για τη μελέτη της δυναμικής των διεργασιών. Κύριο χαρακτηριστικό του είναι η χρησιμοποίηση τεχνικών προσομοίωσης και οπτικοποίησης σε πραγματικό χρόνο για την παρουσίαση στην οθόνη του υπολογιστή μιας αναπαράστασης της μελετούμενης διεργασίας που "υμπεριφέρεται" όπως η αντίστοιχη πραγματική. Η αναπαράσταση αυτή πραγματοποιείται με χρήση των γραφικών δυνατοτήτων του υπολογιστή και παρέχει μια εποπτική εικόνα για τη δυναμική της διεργασίας. Η χρήση του προγράμματος για άσκηση των φοιτητών στο τμήμα Χημικών Μηχανικών του Α.Π.Θ. έχει δείξει ότι μπορεί να αποτελέσει ένα χρήσιμο εκπαιδευτικό βοήθημα.

### 1. Εισαγωγή

Οι δυνατότητες πολυμέσων που ενσωματώνουν τα σημερινά υπολογιστικά συστήματα σε προσιτό κόστος μπορούν να βρουν πλήθος εφαρμογών σε πολλούς τομείς της εκπαίδευσης. Στην τεχνολογική εκπαίδευση ειδικότερα, κατάλληλο λογισμικό είναι δυνατόν να συνδυαστεί με τις παραδοσιακές μορφές εργαστηριακών ασκήσεων, αυξάνοντας την αποτελεσματικότητά της εκπαιδευτικής διαδικασίας.

Το πρόγραμμα "Προσομοιωτής Δυναμικής Χημικών Διεργασιών" αναπτύχθηκε με στόχο να αποτελέσει ένα εκπαιδευτικό εργαλείο για τη μελέτη των αρχών και της θεωρίας της δυναμικής συστημάτων από φοιτητές Χημικής Μηχανικής. Η κλασική μέθοδος διδασκαλίας του αντικειμένου στα πλαίσια ενός προγράμματος σπουδών Χημικής Μηχανικής χρησιμοποιεί σαν παραδείγματα μια σειρά τυπικών συστημάτων που αποτελούν απλουστευμένες και εξιδανικευμένες μορφές πραγματικών χημικών διεργασιών. Το πρόγραμμα επιτρέπει τη μελέτη των κυριότερων από αυτά τα συστήματα κατά τρόπο ανάλογο με μια εργαστηριακή άσκηση, εξομοιώνοντας την αντίστοιχη πειραματική διάταξη. Αυτό επιτυγχάνεται με εφαρμογή τεχνικών προσομοίωσης και οπτικοποίησης (visualization) σε πραγματικό χρόνο για την παρουσίαση στην οθόνη του υπολογιστή μιας αναπαράστασης της μελετούμενης διεργασίας που "συμπεριφέρεται" όπως η αντίστοιχη πραγματική. Η αναπαράσταση αυτή πραγματοποιείται με χρήση των γραφικών δυνατοτήτων του υπολογιστή και είναι σχεδιασμένη έτσι ώστε κάθε μία από τις μεταβλητές που περιγράφουν την κατάσταση της διεργασίας να έχει το οπτικό της αντίστοιχο. Με τον τρόπο αυτό γίνεται δυνατή η μελέτη της δυναμικής της διεργασίας κατά τρόπο "φυσικό", όπως θα συνέβαινε αν ο σπουδαστής-χρήστης παρακολουθούσε την πραγματική διεργασία. Τα πλεονεκτήματα μιας τέτοιας προσέγγισης είναι σημαντικά καθώς δίνει τη δυνατότητα να σχεδιαστούν και να μελετηθούν διατάξεις που θα ήταν δύσκολο, χρονοβόρο ή δαπανηρό να υλοποιηθούν με πραγματικά μέσα.

### 2. Αντικείμενο του λογισμικού

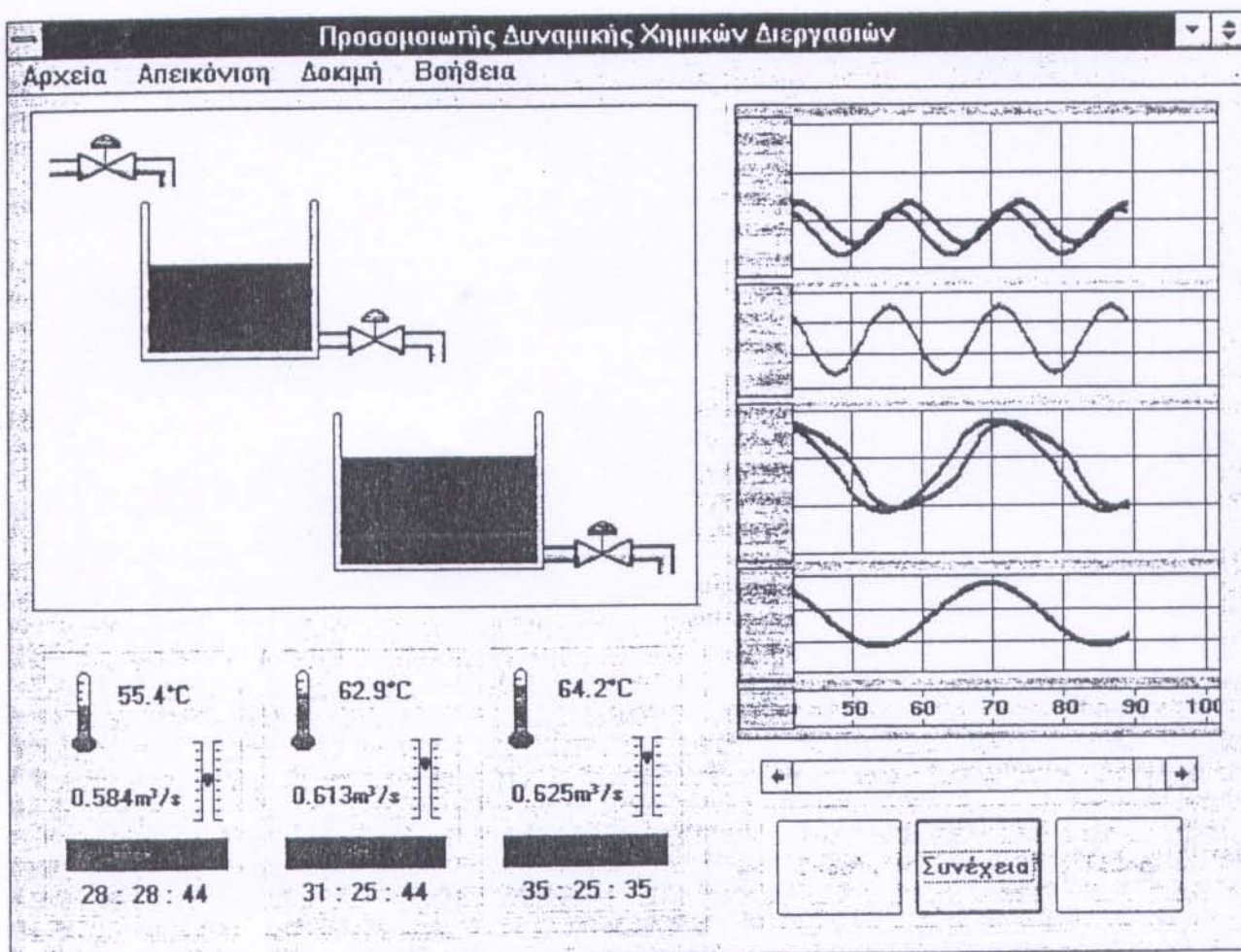
Το λογισμικό σχεδιάστηκε με κύριο στόχο τη μελέτη της δυναμικής συμπεριφοράς ιδανικών ομογενών χημικών αντιδραστήρων διαφόρων τύπων, με έμφαση στους αντιδραστήρες συνεχούς λειτουργίας και πλήρους ανάμιξης (Continuous Stirred Tank Reactors - CSTRs), διαλείπουσας λειτουργίας (Batch Reactors - BRs), και ημιδιαλείπουσας λειτουργίας (Semi-Batch Reactors - SBRs). Το πρόγραμμα παρέχει τη δυνατότητα μελέτης είτε μεμονωμένων αντιδραστήρων, είτε συστημάτων δύο εν σειρά αντιδραστήρων στην περίπτωση της συνεχούς λειτουργίας. Παρέχεται επίσης η δυνατότητα να καθοριστούν λεπτομερειακά τα λειτουργικά χαρακτηριστικά της μελετούμενης διεργασίας (π.χ. ισοθερμοκρασιακή ή μη ισοθερμοκρασιακή λειτουργία, φυσική εκροή ή σταθερή απόληψη κλπ.), έτσι ώστε να καλύπτονται όλες οι περιπτώσεις που παρουσιάζουν εκπαιδευτικό ενδιαφέρον. Με κατάλληλες επιλογές που διατίθενται στο χρήστη, το παραπάνω γενικό μοντέλο μπορεί να αναχθεί σε απλούστερο, επιτρέποντας με τον τρόπο αυτό τη μελέτη της δυναμικής και άλλων διεργασιών όπως συστημάτων θερμαινόμενων δοχείων (δεξαμενών) ή συστημάτων στάθμης υγρού.

Τα χαρακτηριστικά της υπό εξέταση διεργασίας (γεωμετρίας, ύπαρξη ή μη αλληλεπίδρασης μεταξύ των δοχείων/αντιδραστήρων) καθώς και οι τιμές όλων των παραμέτρων του συστήματος μπορούν να καθοριστούν από το χρήστη του προγράμματος με τρόπο απλό και παραστατικό. Το ίδιο ισχύει και για τις μεταβλητές εισόδου (παροχές, θερμοκρασίες και συστάσεις ρευμάτων εισόδου) για τις οποίες καθορίζεται ο τρόπος που αυτές θα μεταβάλλονται

συναρτήσει του χρόνου. Οι συναρτήσεις εισόδου μπορεί να είναι απλής μορφής (βηματικές, παλμικές, γραμμικές ή ημιτονοειδείς) ή και σύνθετης μορφής αποτελούμενης από οποιονδήποτε συνδυασμό των παραπάνω απλών μορφών. Στην περίπτωση που είναι επιθυμητή η προσέγγιση σε ρεαλιστικότερες καταστάσεις, είναι δυνατή η προσθήκη θορύβου οποιουδήποτε επιπέδου στις συναρτήσεις εισόδου. Σαν αρχική κατάσταση του συστήματος μπορεί να επιλεγεί είτε μια τυχούσα κατάσταση η οποία καθορίζεται από το σύνολο των αρχικών τιμών των μεταβλητών κατάστασης, είτε μια μόνιμη κατάσταση, η οποία υπολογίζεται από το πρόγραμμα αφού εισαχθούν οι αρχικές τιμές των μεταβλητών εισόδου.

### 3. Μορφή αλληλεπίδρασης χρήστη-προγράμματος

Η προσομοίωση εξελίσσεται σε πραγματικό χρόνο. Κατά τη διάρκεια της εκτέλεσης της προσομοίωσης η οθόνη του υπολογιστή είναι χωρισμένη σε τέσσερα τμήματα. Στο μεγαλύτερο από αυτά απεικονίζεται η μελετούμενη διεργασία. Οι συσκευές που την αποτελούν (αντιδραστήρες, δοχεία κλπ.) είναι σχεδιασμένες σε τομή, έτσι ώστε να διακρίνεται η στάθμη του υγρού σε αυτές, και υπό ενιαία κλίμακα, βάσει των διαστάσεων που έχουν καθοριστεί για την κάθε μία. Ένα άλλο τμήμα της οθόνης καταλαμβάνεται από τις αναπαραστάσεις μετρητικών οργάνων (θερμόμετρα, ροόμετρα, δείκτες σύστασης) που παρέχουν οπτική ένδειξη για τις διακυμάνσεις των αντίστοιχων μεταβλητών κατάστασης (θερμοκρασίες, παροχές και συγκεντρώσεις των ρευμάτων). Οι τιμές των μεταβλητών παρουσιάζονται και αριθμητικά. Επίσης εκτός από τη διεργασία, στη οθόνη αναπαριστάται και ένα καταγραφικό όργανο στο οποίο εμφανίζεται η εξέλιξη των μεταβλητών με την πάροδο του χρόνου.



Σχήμα 1: Αποτύπωση οθόνης κατά την εκτέλεση της προσομοίωσης

Μετά το τέλος της προσομοίωσης το πρόγραμμα παρέχει τη δυνατότητα ταυτόχρονης παρουσίασης διαγραμμάτων αποκρίσεων για διάφορες περιπτώσεις εκτέλεσης του προγράμματος που έχουν αποθηκευτεί σε αρχεία, δίνοντας έτσι τη

δυνατότητα συγκρίσεων και εξαγωγής συμπερασμάτων για εναλλακτικά σενάρια. Τα διαγράμματα αυτά είναι δυνατό να εκτυπωθούν, κάτι χρήσιμο αν η άσκηση με το πρόγραμμα ακολουθηθεί από θεωρητική επεξεργασία των αποτελεσμάτων.

#### 4. Εκτέλεση της προσομοίωσης

Για την προσομοίωση της δυναμικής της μελετούμενης διεργασίας, το λογισμικό επιλύει το μαθηματικό μοντέλο που περιγράφει τη συμπεριφορά της. Το σύστημα εξισώσεων που προκύπτει προέρχεται κυρίως από τα ισοζύγια μάζας και ενέργειας του συστήματος και αποτελείται από σύνολο κανονικών διαφορικών και αλγεβρικών εξισώσεων. Η επίλυση του συστήματος πραγματοποιείται με εφαρμογή της αριθμητικής μεθόδου Runge-Kutta 4ης τάξης. Η ακρίβεια των αποτελεσμάτων είναι ιδιαίτερα ικανοποιητική, αν και λόγω της φύσης της εφαρμογής έχει δευτερεύουσα σημασία. Η επίλυση του συστήματος που έχει ως ανεξάρτητη μεταβλητή το χρόνο γίνεται σε πραγματικό χρόνο. Η τιμή που χρησιμοποιείται για το βήμα της ολοκλήρωσης είναι της τάξης των 0.05 sec, αλλά η ανανέωση της αναπαράστασης της διεργασίας και η φύλαξη των τιμών των μεταβλητών σε αρχείο συμβαίνει κάθε 0.25 sec.

Εξισώσεις:

$$\frac{dh}{dt} = \frac{1}{dV/dh} (F_{in} - \alpha h^{\beta})$$

$$\frac{dC_j}{dt} = \frac{F_{in}}{V} (C_{j,in} - C_j) - k_0 \exp\left(\frac{-E}{RT}\right) \sum_{j=1}^M (C_{j,in})^{n_j}$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{1}{V} \left[ F_{in}(T_{in} - T) - \frac{h_i A_i (T - T_m) + k_0 \exp(-E/RT) \sum_{j=1}^M (C_{j,in})^{n_j} \Delta H_r V}{\rho C_p} \right]$$

$$\frac{dT_m}{dt} = \frac{1}{\rho_m C_{p,m} V_m} [h_i A_i (T - T_m) - h_o A_o (T_m - T_c)]$$

$$\frac{dT_c}{dt} = \frac{1}{V_c} \left[ F_c (T_{c,in} - T_c) + \frac{h_o A_o (T_m - T_c)}{\rho_c C_{p,c}} \right]$$

Μεταβλητές κατάστασης:

h	Στάθμη υγρού στον αντιδραστήρα (m)
T	Θερμοκρασία του υγρού στον αντιδραστήρα (K)
C <sub>j</sub>	Συγκέντρωση συστατικού j στον αντιδραστήρα (mol/m <sup>3</sup> )
T <sub>m</sub>	Θερμοκρασία τοιχώματος αντιδραστήρα (K)
T <sub>c</sub>	Θερμοκρασία υγρού στο μανδύα (K)

Μεταβλητές εισόδου:

F <sub>in</sub>	Παροχή στην είσοδο του αντιδραστήρα (m <sup>3</sup> /s)
T <sub>in</sub>	Θερμοκρασία υγρού στην είσοδο του αντιδραστήρα (K)
C <sub>i,in</sub>	Συγκέντρωση συστατικού j στην είσοδο του αντιδραστήρα (mol/m <sup>3</sup> )
F <sub>c</sub>	Παροχή υγρού στο μανδύα (m <sup>3</sup> /s)
T <sub>c,in</sub>	Θερμοκρασία υγρού στην είσοδο του μανδύα (K)

Πίνακας 1: Σύνοψη του μαθηματικού μοντέλου της διεργασίας στη γενικής της μορφή.

Παράμετροι:	
$\Delta H_r$	Ενθαλπία αντίδρασης (J/mol)
$\alpha, \beta$	Υδροδυναμικές παράμετροι εκροής (αδιάστατες)
$k_0$	Προεκθετικός παράγοντας ταχύτητας της αντίδρασης
$E$	Ενέργεια ενεργοποίησης της αντίδρασης (J)
$R$	Παγκόσμια σταθερά των αερίων (8.3143 J/K·mol)
$M$	Αριθμός χημικών συστατικών
$n_j$	Μερική τάξη αντίδρασης ως προς το j συστατικό
$\rho, \rho_m, \rho_c$	Πυκνότητα υγρού στον αντιδραστήρα, μεταλλικού τοιχώματος και υγρού στον μανδύα, αντίστοιχα (Kg/m <sup>3</sup> )
$V, V_m, V_c$	Όγκος υγρού στον αντιδραστήρα, μεταλλικού τοιχώματος και υγρού στον μανδύα, αντίστοιχα (m <sup>3</sup> )
$C_D, C_{D,m}, C_{D,c}$	Ειδική θερμότητα υγρού στον αντιδραστήρα, μεταλλικού τοιχώματος και υγρού στον μανδύα, αντίστοιχα (J/Kg·K)
$h_i, h_o$	Εσωτερικός και εξωτερικός συντ. μεταφοράς θερμότητας (W/m <sup>2</sup> ·K)
$A_j, A_o$	Εσωτερική και εξωτερική επιφάνεια εναλλαγής θερμότητας (m <sup>2</sup> )

Πίνακας 1 (συνέχεια)

### 5. Υλοποίηση του λογισμικού

Το πρόγραμμα εκτελείται σε υπολογιστή IBM PC ή συμβατό κάτω από περιβάλλον Windows 3.1 ή μεταγενέστερο. Για την ανάπτυξη του χρησιμοποιήθηκε η γλώσσα προγραμματισμού Microsoft Visual Basic 3 η οποία παρέχει έναν ικανοποιητικό συμβιβασμό μεταξύ ταχύτητας ανάπτυξης, εκμετάλλευσης των δυνατοτήτων του περιβάλλοντος των Windows και υπολογιστικής ισχύος.

### 6. Προτάσεις για περαιτέρω εξέλιξη του λογισμικού

Οι κυριότερες κατευθύνσεις προς τις οποίες θα ήταν δυνατό να προχωρήσει η εξέλιξη του προγράμματος, είναι οι ακόλουθες: Προσθήκη νέων διεργασιών. Μελέτη δυναμικής βρόγχων ρύθμισης με ενσωμάτωση στο μοντέλο των εξισώσεων που περιγράφουν στο πεδίο του χρόνου τη συμπεριφορά μετρητικών διατάξεων, ρυθμιστών, στοιχείων τελικής ρύθμισης (π.χ. ρυθμιστικών βανών), πιθανών μεταλλακτών κλπ. Μεταγραφή του προγράμματος σε άλλη γλώσσα π.χ. C++ για Windows αν αυτό κριθεί αναγκαίο κάτω από τις αυξημένες απαιτήσεις. Προσθήκη διαδικασιών ελέγχου της κατανόησης από τον ασκούμενο π.χ. εύρεση τιμών αγνώστων παραμέτρων από τη γνώση των αποκρίσεων, μελέτη προβλημάτων ευστάθειας σε βρόγχους ρύθμισης, μελέτη προβλημάτων αριστοποίησης κλπ.

### 7. Κατακλείδα

Η προσπάθεια ανάπτυξης του προγράμματος ξεκίνησε με την προσδοκία ότι το τελικό αποτέλεσμα θα ήταν κάτι το χρήσιμο και άμεσα αξιοποιήσιμο. Η χρήση του προγράμματος για άσκηση των φοιτητών στα πλαίσια του μαθήματος "Εργαστήριο Χημικής Μηχανικής II" του τμήματος Χημικών Μηχανικών του Α.Π.Θ. έχει δικαιώσει αυτές τις προσδοκίες καθώς έχει δείξει ότι μπορεί να αποτελέσει ένα χρήσιμο εκπαιδευτικό βοήθημα καθώς (α) επιτρέπει την προσομοίωση πειραματικών διατάξεων που θα ήταν δύσκολο να υλοποιηθούν με πραγματικά μέσα και (β) δίνει μια παραστατική εικόνα της δυναμικής των μελετούμενων διεργασιών η οποία είναι κατάλληλη για εκπαιδευτικούς σκοπούς. Η ανταπόκριση των φοιτητών υπήρξε ιδιαίτερα ενθαρρυντική καθώς χαρακτηρίστηκε από ενδιαφέρον για κάτι που είναι αρκετά καινοτομικό για τα δεδομένα της σημερινής εκπαιδευτικής διαδικασίας.

- [1] Luyben, W. L., (1990), "Process Modeling, Simulation, and Control for Chemical Engineers", 2nd Ed., McGraw-Hill, New York
- [2] Pressman, R. S., (1992), "Software Engineering - A Practitioner's Approach", 3rd ed., McGraw-Hill, New York
- [3] Raman, R., (1985), "Chemical Process Computations", Elsevier Applied Science Publishers, London