

ΕΝΣΩΜΑΤΩΣΗ ΝΕΩΝ ΣΥΣΚΕΥΩΝ ΣΕ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΤΕΣ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ

Κ.Α. Αντωνιάδης, Δ.Κ. Δανδίκας, Α.Α. Μουζά

Εργαστήριο Τεχνολογίας Χημικών Εγκαταστάσεων, Τμήμα Χημικών Μηχανικών, ΑΠΘ
e-mail: mouza@cheng.auth.gr

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Οι σύγχρονοι προσομοιωτές διεργασιών δίνουν τη δυνατότητα εμπλουτισμού της “βιβλιοθήκης” τους με νέα μοντέλα συσκευών. Στην παρούσα εργασία παρουσιάζεται η μέθοδος ενσωμάτωσης δυο νέων μοντέλων συσκευών διεργασιών στον προσομοιωτή *Aspen Plus*[®]. Σχολάζονται επίσης τα πλεονεκτήματα-μειονεκτήματα της χρήσης του λογισμικού *Aspen Custom Modeler* που χρησιμοποιείται για την ενσωμάτωση.

ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Ο προσομοιωτής διεργασιών είναι ένα χρήσιμο εργαλείο για τη μελέτη της λειτουργίας είτε μιας μεμονωμένης συσκευής, είτε μιας ολόκληρης βιομηχανικής μονάδας και βοηθά στην αξιολόγηση εναλλακτικών προτάσεων σχεδιασμού, χωρίς να είναι απαραίτητη η κατασκευή πιλοτικών μονάδων. Η χρήση εμπορικών πακέτων προσομοίωσης διεργασιών είναι ήδη πολύ διαδεδομένη και είναι προσιτή ακόμη και σε χρήστες με περιορισμένες γνώσεις προγραμματισμού. Οι εμπορικοί προσομοιωτές διεργασιών παρέχουν πολλές δυνατότητες και συνήθως προσφέρουν εκτεταμένες “βιβλιοθήκες” που περιλαμβάνουν όλες σχεδόν τις συμβατικές συσκευές διεργασιών^[1]. Είναι όμως λογικό οι συσκευές για τις οποίες δεν υπάρχουν γενικευμένες σχέσεις σχεδιασμού (π.χ. εναλλάκτες πλακών, στήλες φυσαλίδων) ή βρίσκονται σε πειραματικό στάδιο, να μην περιλαμβάνονται στους εμπορικούς προσομοιωτές. Στα πλαίσια των ερευνητικών δραστηριοτήτων στο Εργαστήριο μελετώνται πειραματικά και υπολογιστικά συσκευές διεργασιών, όπως εναλλάκτες πλακών και στήλες φυσαλίδων, προκειμένου να διατυπωθούν νέα μοντέλα και σχεδιαστικές σχέσεις^[2,3,4]. Προκύπτει λοιπόν η ανάγκη να αξιολογηθεί η απόδοση των συσκευών αυτών σε συνδυασμό με συμβατικές συσκευές στα πλαίσια ενός ολοκληρωμένου διαγράμματος ροής. Στην εργασία αυτή παρουσιάζεται η διαδικασία ενσωμάτωσης νέων μοντέλων συσκευών διεργασιών σε εμπορικό προσομοιωτή.

ΕΝΣΩΜΑΤΩΣΗ ΝΕΩΝ ΜΟΝΤΕΛΩΝ ΣΕ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΤΗ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ

Στην παρούσα εργασία χρησιμοποιείται ο προσομοιωτής διεργασιών *Aspen Plus*^{® [1]}, του οποίου οι δυνατότητες μπορούν να επεκταθούν ώστε να συμπεριλάβει νέα μοντέλα συσκευών διεργασιών και διατίθεται από το ΑΠΘ για την εκπαίδευση των φοιτητών. Στον προσομοιωτή αυτόν κάθε συσκευή περιγράφεται από ένα σύστημα εξισώσεων, οι οποίες επιλύονται διαδοχι-

κά, και οι μεταβλητές εξόδου μιας συσκευής αποτελούν μεταβλητές εισόδου της επόμενης κατά τη διαδοχική επίλυση των μοντέλων των διαφόρων συσκευών. Οι φυσικές ιδιότητες των διαφόρων ενώσεων και μιγμάτων που συμμετέχουν σε μια διεργασία μπορούν είτε να υπολογισθούν με τη βοήθεια μιας εκτεταμένης “βιβλιοθήκης” ενώσεων και αλγορίθμων υπολογισμού ιδιοτήτων, είτε να εισαχθούν από το χρήστη. Στις δυνατότητες του συγκεκριμένου λογισμικού περιλαμβάνονται επίσης η επίλυση βρόγχων ανακύκλωσης, η μελέτη της απόκρισης των μεταβλητών εξόδου του συστήματος στις μεταβολές των μεταβλητών εισόδου (*ανάλυση ευαισθησίας*), καθώς και ο υπολογισμός των τιμών των μεταβλητών εισόδου που μεγιστοποιούν/ελαχιστοποιούν μια αντικειμενική συνάρτηση κέρδους/κόστους (*βελτιστοποίηση*).

Η επέκταση των δυνατοτήτων του προσομοιωτή μπορεί να γίνει ^[1]:

- με υπορουτίνες γραμμένες σε Fortran, οι οποίες ενσωματώνονται στον προσομοιωτή ώστε να εκτελούν συγκεκριμένες εργασίες (π.χ. υπολογισμός φυσικών ιδιοτήτων, κοστολόγηση συσκευών κλπ),
- με δυναμική σύνδεση του προσομοιωτή με λογιστικά φύλλα του Microsoft Excel® ώστε τα αποτελέσματα από κάποιο σημείο της προσομοίωσης να μεταφέρονται στο λογιστικό φύλλο, να τροποποιούνται και να επανεισάγονται σε κάποιο άλλο σημείο για να συνεχιστεί η επίλυση του προβλήματος,
- με τη χρήση του πρόσθετου λογισμικού Aspen Custom Modeler (ACM) [5] για τη δημιουργία μοντέλων που μπορούν να προστεθούν στην υπάρχουσα “βιβλιοθήκη” συσκευών διεργασιών του Aspen Plus® και
- με την ενσωμάτωση μοντέλων που έχουν σχεδιαστεί σύμφωνα με το πρωτόκολλο CAPE-OPEN ^[6] σε ανεξάρτητο από τον προσομοιωτή λογισμικό.

Από τους προαναφερθέντες τρόπους, αυτός που χρησιμοποιείται στην παρούσα εργασία είναι το ACM το οποίο συμπεριλαμβάνεται στο Aspen Plus® Engineering Suite. Θεωρείται ένα εύχρηστο εργαλείο δημιουργίας, τροποποίησης και επαναχρησιμοποίησης μοντέλων διαφόρων συσκευών και απευθύνεται σε χρήστες με βασικές γνώσεις προγραμματισμού. Το ACM χρησιμοποιεί αντικειμενοστραφή γλώσσα προγραμματισμού, επεξεργαστές για εικονίδια και την MS Visual Basic για τη δημιουργία σεναρίων για τον προσομοιωτή. Με αυτόν τον τρόπο, μπορεί να δημιουργηθεί ένα στοιχείο (*module*) για το Aspen Plus®, στο οποίο εισάγονται οι κατάλληλες σχεδιαστικές εξισώσεις, καθορίζονται οι μεταβλητές εισόδου και εξόδου και συνδέεται δυναμικά με τον υπόλοιπο διαθέσιμο εξοπλισμό ^[5]. Ένα σημαντικό χαρακτηριστικό του ACM είναι ότι παρέχει άμεση πρόσβαση στη βάση δεδομένων των ιδιοτήτων του Aspen Plus® και με αυτόν τον τρόπο οι φυσικές και χημικές ιδιότητες των συστατικών που συμμετέχουν στην προσομοίωση μπορούν να υπολογιστούν με κάποια από τις πολυάριθμες μεθόδους υπολογισμού ιδιοτήτων που προσφέρονται από τον προσομοιωτή ^[5].

ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΑ ΕΙΣΑΓΩΓΗΣ ΝΕΑΣ ΣΥΣΚΕΥΗΣ

Για να εισαχθεί μία νέα συσκευή στον προσομοιωτή διεργασιών Aspen Plus® με χρήση του ACM πρέπει πρώτα να μοντελοποιηθεί με τη γλώσσα προγραμματισμού του ACM ακολουθώντας τα εξής βήματα:

- Διατυπώνονται οι σχεδιαστικές εξισώσεις και ορίζονται οι μεταβλητές έτσι ώστε οι βαθμοί ελευθερίας του συστήματος να είναι μηδέν.
- Δημιουργείται ένα αρχείο Aspen Properties, το οποίο περιέχει τα συστατικά που αναμένεται να συμμετέχουν στη διεργασία και τη μέθοδο υπολογισμού των φυσικών ιδιοτήτων τους, και δηλώνεται στο ACM.
- Δηλώνονται οι μεταβλητές του μοντέλου και αντιστοιχίζονται στα φυσικά μεγέθη που α-

ντιπροσωπεύουν (π.χ. πίεση, θερμοκρασία) και καθορίζεται η κατάσταση τους (εξαρτημένες ή ανεξάρτητες).

- Εισάγονται οι σχεδιαστικές εξισώσεις χρησιμοποιώντας τη "γλώσσα" του *ACM*. Αντίθετα με τις συμβατικές γλώσσες προγραμματισμού το *ACM* δεν έχει περιορισμούς ούτε ως προς τη μορφή ούτε ως προς τη σειρά επίλυσης των εξισώσεων.
- Ορίζονται τα ρεύματα εισόδου και εξόδου και αντιστοιχίζονται σε πύλες (*port*) εισόδου-εξόδου, οι οποίες είναι "υπομοντέλα" που χρησιμοποιούνται για τη σύνδεση της νέας συσκευής και τη δυναμική ανταλλαγή πληροφοριών με άλλες συσκευές του προσομοιωτή. Οι μεταβλητές που αντιστοιχούν στην πύλη εξόδου υπολογίζονται κατά την επίλυση του μοντέλου.
- Γίνεται μεταγλώττιση (*compilation*) αρχικά με το μεταγλωττιστή του *ACM* και στη συνέχεια με εκείνον της *C++* και δημιουργείται το αρχείο *dll* που θα εμφανίζεται στη "βιβλιοθήκη" του *Aspen Plus*[®].
- Τέλος εισάγεται το νέο μοντέλο στη "βιβλιοθήκη" του *Aspen Plus*[®].

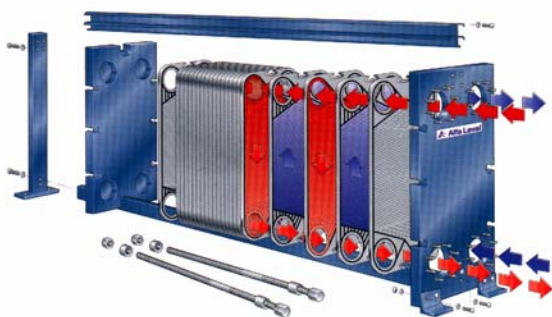
Από το σημείο αυτό ο χειρισμός της συσκευής είναι ίδιος με οποιαδήποτε υπάρχουσα συσκευή του προσομοιωτή.

ΕΦΑΡΜΟΓΗ ΤΗΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΑΣ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗΣ

Η διαδικασία που περιγράφηκε παραπάνω ακολουθήθηκε για την ενσωμάτωση δύο συσκευών διεργασιών που μελετήθηκαν στο Εργαστήριο^[2,3,4]: ενός εναλλάκτη πλακών (*plate heat exchanger*) και μιας στήλης φυσαλίδων (*bubble column*).

Α. Εναλλάκτης πλακών

Πρόκειται για τύπο εναλλάκτη θερμότητας που αποτελείται από πλάκες των οποίων η επιφάνεια είναι διαμορφωμένη με πτυχώσεις (Σχήμα 1) και παρουσιάζει σημαντικά πλεονεκτήματα έναντι των συμβατικών εναλλακτών, όπως μεγάλο συντελεστή μεταφοράς θερμότητας, μικρό όγκο σε σχέση με την επιφάνεια, ευκολία στον καθαρισμό κλπ. Για τον υπολογισμό του ολικού συντελεστή μεταφοράς θερμότητας και της πτώσης πίεσης των δύο ρευμάτων (θερμό, ψυχρό) χρησιμοποιήθηκαν σχεδιαστικές σχέσεις που παρουσιάζονται αναλυτικά σε σχετική διπλωματική εργασία^[6]. Ο εναλλάκτης ενσωματώθηκε σε διάγραμμα ροής του *Aspen Plus*[®] και χρησιμοποιήθηκε επιτυχώς για την ψύξη του ρεύματος εισόδου μιας αποστακτικής στήλης.



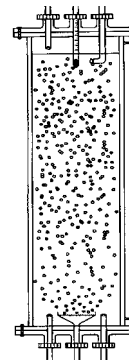
Σχήμα 1. Εναλλάκτης πλακών (από Alfa Laval)



Λεπτομέρειες του εναλλάκτη πλακών

Β. Στήλη φυσαλίδων

Στο μοντέλο συμπεριλήφθηκαν συσχετισμοί που αφορούν στήλες με πορώδη κατανομή της αέριας φάσης (Σχήμα 2), καθώς και γενικευμένοι συσχετισμοί υπολογισμού του κλάσματος κενού και της μέσης διαμέτρου φυσαλίδων που επηρεάζουν την ολική διεπιφάνεια αερίου-υγρού και αφορούν στην ομογενή περιοχή ροής^[2], η οποία θεωρείται ως η πλέον επιθυμητή για τη λειτουργία τέτοιων συσκευών. Περισσότερες πληροφορίες για την ενσωμάτωση της συσκευής παρουσιάζονται σε σχετική διπλωματική εργασία^[7].



Σχήμα 2. Στήλη φυσαλίδων

ΣΧΟΛΙΑΣΜΟΣ

Οι προσομοιωτές διεργασιών αποτελούν ένα σημαντικό εργαλείο στην προσπάθεια για τη μείωση τόσο του κόστους όσο και του χρόνου που απαιτείται για τον σχεδιασμό και τη βελτιστοποίηση χημικών εγκαταστάσεων^[8]. Εντούτοις, οι “βιβλιοθήκες” συσκευών που προσφέρονται περιορίζονται συνήθως στις συμβατικές συσκευές και πρέπει να ενισχυθούν με την προσθήκη νέων συσκευών, η απόδοση των οποίων χρειάζεται να μελετηθεί σε συνδυασμό με τις συμβατικές.

Το ACM είναι μια γλώσσα προγραμματισμού που προορίζεται για χρήστες με περιορισμένες γνώσεις προγραμματισμού. Οι εξισώσεις της νέας συσκευής μπορούν να γραφούν με οποιαδήποτε μορφή και με σειρά ανεξάρτητη από τη σειρά επίλυσής τους καθώς όλες οι εξισώσεις λύνονται ταυτόχρονα. Επιπλέον παρέχει τη δυνατότητα μεταβολής της κατάστασης των μεταβλητών του μοντέλου από εξαρτημένες σε ανεξάρτητες και αντίστροφα, αρκεί οι βαθμοί ελευθερίας του συστήματος να είναι μηδέν, ενώ μπορούν ακόμη να τροποποιηθούν μέσα από τον προσομοιωτή τα όρια και οι τιμές των διαφόρων μεταβλητών. Ωστόσο, το ACM έχει κάποιους περιορισμούς, οι οποίοι δεν επιτρέπουν στο χρήστη να εκμεταλλευτεί πλήρως τις δυνατότητες του Aspen Plus[®], με κυριότερο το γεγονός ότι δεν μπορούν να χρησιμοποιηθούν οι μεταβλητές της νέας συσκευής για να γίνει ανάλυση ευαισθησίας μιας διεργασίας. Αυτό το γεγονός αντισταθμίζεται εν μέρει, από το ότι η νέα συσκευή μπορεί να συμμετέχει σε ανάλυση ευαισθησίας μιας διεργασίας, αν οι μεταβλητές της δεν χρησιμοποιούνται ως σχεδιαστικές. Στα μειονεκτήματα του ACM περιλαμβάνεται το γεγονός ότι τα συστατικά και οι παράμετροι του μοντέλου τροποποιούνται μόνο μέσα από το ACM. Οι χρήστες με εμπειρία στον προγραμματισμό μπορούν να δημιουργήσουν μοντέλα νέων συσκευών, τα οποία θα συμφωνούν με το πρωτόκολλο CAPE-OPEN, με στόχο τη δυνατότητα χρήσης τους από διάφορους προσομοιωτές. Έγκειται, λοιπόν, στο σχεδιαστή μηχανικό να αντισταθμίσει την απλότητα του ACM με τους περιορισμούς που επιβάλλει και στη συνέχεια να αποφασίσει για τη χρησιμοποίησή του.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] Aspen Plus 11.1 Manual, AspenTech. (2001).
- [2] Mouza, A.A., Dalakoglou, G.K., Paras, S.V., *Chem. Eng. Sci.* **60** (5), 1465-1475 (2005).
- [3] Kanaris, A.G., Mouza, A.A., Paras, S.V. *1st Int. Conf. "From scientific computing to computational engineering"* Athens, Greece (2004).
- [4] Mouza, A.A., Kazakis, N.A., Paras, S.V. *1st Int. Conf. "From scientific computing to computational engineering"* Athens, Greece (2004).
- [5] Aspen Custom ModelerTM Manual 11.1, AspenTech. (2001).
- [6] Αντωνιάδης, Κ.Δ. *Διπλωματική εργασία*, Τμήμα Χημικών Μηχανικών ΑΠΘ (2004).
- [7] Δανδίκας, Δ.Κ. *Διπλωματική εργασία*, Τμήμα Χημικών Μηχανικών ΑΠΘ (2005).
- [8] Pantzali, M.N., Mouza, A.A., Paras, S.V. *Chem. Eng. Technol.* **28** (2), 187-192 (2005).