

TAMPEREEN AMMATTIKORKEAKOULU
Kemiantekniikan koulutusohjelma
Kemiantekniikka

Tutkintotyö

Mikko Nurminen

**BALAS-SIMULOINTIOHJELMISTO JA SEN SOVELTUVUUS
KEMIANTEKNIIKAN OPETUKSEEN TAMPEREEN
AMMATTIKORKEAKOULULLA**

Työn ohjaaja
Työn teettäjä
Tampere 2006

Lehtori Anne Ojala
Tampereen ammattikorkeakoulu, valvojana lehtori Anne Ojala

TAMPEREEN AMMATTIKORKEAKOULU

Kemiantekniikan koulutusohjelma

Kemiantekniikka

Mikko Nurminen Balas-simulointiohjelmisto ja sen soveltuvuus kemiantekniikan opetukseen Tampereen ammattikorkeakoululla

Tutkintotyö 55 sivua + 103 liitesivua

Työn ohjaaja Lehtori Anne Ojala

Työn teettäjä Tampereen ammattikorkeakoulu, valvojana lehtori Anne Ojala

Joulukuu 2005

Hakusanat prosessinmallinnus, ohjelmisto, opetus

TIIVISTELMÄ

Tässä tutkintotyössä luodaan ensin katsaus yleisesti käytettyihin prosessisimulointiohjelmiin, jonka jälkeen keskityttiin Balas-simulointiohjelmistoon ja sen käyttöön. Tarkoituksena oli kartoittaa Balasin soveltuvuus opetusohjelmistoksi Tampereen ammattikorkeakoululle. Tätä varten koululle asennettiin Balas-ohjelmisto. Tutkin sen käyttöä.

Saamieni kokemusten perusteella Balas on simulointiohjelmana muiden käytössä olevien tasolla, mutta ei tarjoa opetuksen kannalta mitään uutta oppilaitoksellamme jo käytössä olevan ChemCAD-ohjelmiston lisäksi. Balasin hankkimista ei pitäisi harkita Tampereen ammattikorkeakoululle, ellei sillä aiota korvata ChemCAD-ohjelmistoa.

TAMPERE POLYTECHNIC

Chemical Engineering

Chemical Engineering

Mikko Nurminen

Balas-process simulation programs usage in teaching at Tampere Polytechnic

Engineering Thesis

55 pages, 103 appendices

Thesis Supervisor

Anne Ojala

Commissioning Company

Tampere Polytechnic Supervisor: Anne Ojala

December 2005

Keywords

chemistry, process simulation

ABSTRACT

This Engineering Thesis begins with a look at the commonly used chemical process simulation software. After that Balas-simulation software and it's use are studied more thoroughly. Reason behind examining Balas was to find out if it would be suitable to be used at Tampere Polytechnic. For this purpose a Balas installation was made at Tampere Polytechnic and I studied the program.

As a simulation software Balas is comparable to other widely used simulation software, but it doesn't offer anything new from a teaching point of view when compared to ChemCAD-program already installed at the Tampere Polytechnic. Balas should not be purchased, unless it replaces ChemCAD in use.

ALKUSANAT

Suuret kiitokset kaikille tutkintotyössäni avustaneille opettajille Tampereen ammattikorkeakoululla ja tutkijoille Valtion teknisellä tutkimuslaitoksella. Erityinen kiitos kuuluu vaimolleni Nooralle, jonka kannustus ja tuki tekivät minulle mahdolliseksi saattaa tämä tutkintotyö päätökseen asti. Ja tutuille terveiset!

Tampereella, 3.4.2006

Mikko Nurminen

SISÄLLYS

TIIVISTELMÄ	
ABSCTRACT	
ALKUSANAT	
SISÄLLYS.....	5
1 JOHDANTO.....	6
2 KEMIANTEKNIKASSA KÄYTETTÄVIÄ SIMULOINTIOHJELMIA.....	7
2.1 Yleiskemiallisia simulointiohjelmistoja.....	8
2.1.1 ChemCAD.....	9
2.1.2 Pro/II.....	10
2.1.3 aspenONE.....	16
2.2 Puunjalostusteollisuuden simulointiohjelmat.....	18
2.2.1 FlowMac.....	18
2.2.2 Balas.....	19
2.2.3 Paperinvalmistuksen verkko-oppimisympäristöt KnowPap ja KnowPulp.....	19
2.3 Kemian alan insinöörejä kouluttavien ammattikorkeakoulujen käyttämiä simulointiohjelmiä.....	21
3 BALAS-SIMULOINTIJÄRJESTELMÄN RAKENNE.....	22
3.1 Flosheet-prosessikaavioiden suunnitteluohjelman rakenne.....	23
3.2 Balas-ohjelman rakenne.....	24
4 SIMULOITAVAN JÄRJESTELMÄN MALLINNUS.....	26
4.1 Balas-ohjelman käynnistys.....	26
4.2 Prosessikaavion piirtäminen ja muokkaaminen FloSheetillä.....	27
4.3 Virtaukset ja informaation kulku prosessikaaviossa.....	30
4.4 Laskenta-caset ja niiden määrittely.....	31
4.5 Hierarkkisen mallin rakentaminen.....	34
4.6 Projektit.....	36
4.7 Kemiallisen reaktion määrittely FloSheetissä.....	37
5. MALLINNETUN PROSESSIN SIMULAATIOAJO.....	41
6 BALASIN EXCEL-LINKKI.....	48
7 BALAS-OHJELMISTOON LIITTYEN KEHITTEILLÄ.....	51
8 BALAS-OHJELMISTON SOVELTUVUUS OPETUSOHJELMISTOKSI TAMPEREEN AMMATTIKORKEAKOULULLA	51
LÄHTEET.....	53
LIITTEET	54

1 JOHDANTO

Tampereen ammattikorkeakoulun opetusstrategiaan kuuluu valmistaa koulutettavat paitsi nykyajan vaatimukseen, myös tulevaisuuden haasteisiin. Tietotekniikan tuntemus on jo nykyään olennainen vaatimus jokaisen insinöörin työssä, ja todennäköisesti vaadittavat taidot vain lisääntyvät erityisesti kemian alalla, kun prosessien mallinnukseen käytettävät ohjelmistot kehittyvät. Tämän tutkintotyön tarkoituksena on ensin lyhyesti esitellä yleisesti käytössä olevat simulointiohjelmat ja sitten erityisesti keskittyä Valtion teknisen tutkimuslaitoksen Balas-ohjelmistoon, sen yleiseen esittelyyn ja arviointiin sen soveltuvuudesta opetuskäyttöön Tampereen ammattikorkeakoululla.

Tampereen ammattikorkeakoululla on jo käytössä Chemstations Inc.:n prosessinmallinnusohjelmisto ChemCAD, mutta sen rinnalle haluttiin hieman eri näkökulman prosessinmallinnukseen tuova ohjelmisto. Valtion teknisen tutkimuslaitoksen kehittämä Balas-prosessinmallinnusohjelmisto tuli esiin lehtori Esa Väliahon etsiessä sopivaa vaihtoehtoa.

Balas on akateemisesta tutkimustyökalusta kehittynyt mallinnusohjelmisto, jossa on laaja, erityisesti paperiteollisuuden laskentaan soveltuva kirjasto. Balasia on viety eteenpäin Suomessa tärkeän metsäteollisuuden tarvitsemien mallinnustyökalujen osalta, mutta se on riittävä myös sellaisen kemianteollisuuden tarpeisiin, jonka käyttämien prosessien mallinnukseen Balasin sisältämät laitemallinnukset pystyvät.

Tämän tutkintotyön tarkoituksena oli tarkastella kemianteollisuuden laajasti käyttämiä prosessimulaatio-ohjelmistoja sekä perehtyä erityisesti Valtion teknisen tutkimuslaitoksen Balas-simulointiohjelmistoon ja arvioida sen sopivuutta Tampereen ammattikorkeakoulun opetuskäyttöön. Tähän työhön on pyritty keräämään olemassa olevista lähteistä mahdollisimman kattavasti tärkeimmät tiedot Balas-ohjelmistosta ja kokemuksia ohjelmiston asennuksesta ja käytöstä, että Tampereen ammattikorkeakoulun olisi helpompi tehdä päätös ohjelmiston mahdollisesta hankinnasta. Balasin osalta tutkintotyö onkin luonteeltaan puoliksi ominaisuuksien esittelyä, puoliksi käyttöönottoa helpottavaa opasta.

Balas-ohjelmisto oli Tampereen ammatikorkeakoululla asennettuna kesäkuun-joulukuun 2005 välisenä aikana. Aikarajoitteen takia työhön jäi muutamia pienehköjä puutteita.

2 KEMIANTEKNIKASSA KÄYTETTÄVIÄ SIMULOINTIOHJELMIA

Yleisimpien kemianprosesseja mallintavien ohjelmistojen toiminnallisuudessa, käyttölogiikassa ja suunnittelussa on vain vähäisiä eroja. Simulointi jakautuu eri vaiheisiin, joista varsinainen simulointiohjelman käyttö on useimmiten vähiten aikaa ja vaivaa vaativa vaihe.

Simuloinnin eri vaiheista olennaisin on sen määrittely, mitä simuloinnilla tavoitellaan ja mikä on ominaisuus, joka prosessissa meitä kiinnostaa. Yleisimmin tällainen ominaisuus on tuotevirtauksen maksimointi tunnetuilla lähtöainevirtauksilla tai halutun tuotevirtauksen vaatimien raaka-ainevirtausten selvittäminen. Tätä vaihetta seuraa ennen simulointiohjelmiston käyttöä tapahtuva tiedonkeruu, jossa tutustutaan mahdollisiin prosessin aikaisempiin sovellutuksiin ja prosessia koskeviin lähteisiin, jotta saataisiin selkeä kuva siitä, mitä ollaan simuloimassa. Tässä vaiheessa yleensä myös havaitaan, kuinka laajalti prosessia ja ympäristöä on mallinnettava, jotta simulaatiolla saataisiin vastaus juuri haluttuun kysymykseen. Ongelman pelkistäminen on olennaista, ettei hukattaisi energiaa epäolennaisten prosessin osien määrittelyyn ja simulointiin.

Varsinainen prosessin mallinnus simulointiohjelmalla aloitetaan laatimalla laitteita kuvaavista prosessisymboleista ja virtauksista prosessikaavio. Simulointi on pohjimmiltaan matematiikkaa. Laitteet ovat ikoneita matemaattisille malleille ja virtaukset informaatiota, jota muokataan matemaattisten mallien avulla. Kun määritellään arvot laitteiden ja virtausten ominaisuuksille, määritellään itse asiassa koko prosessin yli ulottuvan yhtälön tai yhtälösarjan muuttujia. Ominaisuuksien määrittelyn jälkeen voidaan mallinnetun prosessiympäristön toimintaa ja sen dynamiikkaa tutkia käynnistämällä simulaatio. Simulaatioissa prosessia tutkitaan muuttamalla laitteiden ja virtausten ominaisuuksia, jolloin muutosten vaikutus kokonaisprosessiin tulee ilmi, kunhan mallinnus on tehty onnistuneesti.

Simulaatiolla voidaan verrattain edullisesti ja helposti tehdä erilaisia konseptitason kokeiluja ja ajatusleikkejä. Yleisimmin simuloinnilla tutkittavat prosessiongelmat ovat jonkin laite- tai virtausparametrin optimointia, Pinch-analyysiä. Toinen yleinen lähtökohta simulaatiolle on selvittää, millainen vaikutus muutoksilla yksittäisissä prosessiparametreissa on kokonaisprosessiin tuotantolaitoksen tasolla.

Erot simulaatio-ohjelmistojen välille muodostuvat niiden käyttöliittymistä, simuloinnin eri vaiheiden toteuttamistyylistä ja näiden vaiheiden muuntelumahdollisuuksien laajuudesta sekä lisenssien hinnoista. Eroja ohjelmistoissa on myös siinä, kuinka laajalti on pyritty mallintamaan toimintoja. Puhtaissa simulaatio-ohjelmissa simulaatio menee enintään tuotantolaitos-tasolle ja keskittyy tuotantoprosessien mallinnukseen. Tällaisiin lukeutuu esimerkiksi Balas. Nykyään joihinkin simulointiin käytettäviin laajempiin ohjelmistoihin on pyritty luomaan koko tuotantoketjun yli ulottuvia optimointitapoja, joissa taloudelliset näkökohdat otetaan huomioon. Tällaisista ohjelmistoista mainittakoon esimerkkinä aspenOne.

Useimpien simulointiohjelmistojen rakenne on modulaarinen. Tämän lähestymistavan ansiosta kuhunkin ohjelmistoon voidaan lisätä toiminnallisuutta tarpeen mukaan niin, että ohjelman toiminta ei muutu kuin niiltä osin joihin uusi moduuli lisää käytettävissä olevia ominaisuuksia. Osaltaan modulaarisuus on jäänteinä niiltä ajoilta, jolloin jokaista nykyisten ohjelmistojen osana olevaa ohjelmaa kehitettiin erillisinä ohjelmina, useiden oppilaitosten ja yritysten toimesta. Nykyään ohjelmistojen kehittyessä on modulaarisesta rakenteesta etua, koska hintavasta simulointiohjelma voidaan lisensoida vain tarvittavat moduulit.

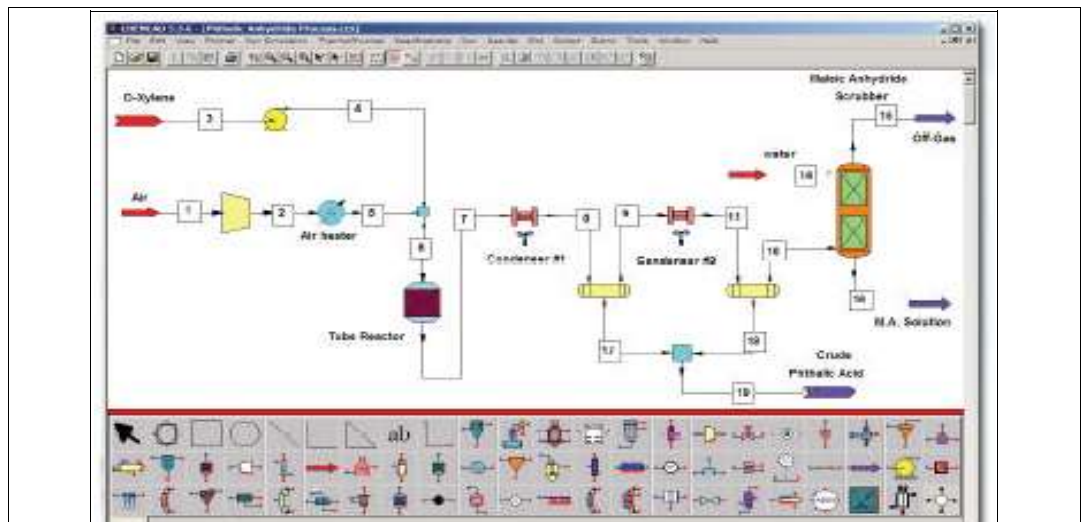
2.1 Yleiskemiallisia simulointiohjelmistoja

Seuraavissa ohjelmistojen esittelyissä on syytä huomioida, että vain ChemCAD- ja Balas-ohjelmistot olivat käytettävissä Tampereen ammattikorkeakoululla tätä tutkintotyötä kirjoitettaessa. Muita ohjelmistoja koskevat tiedot on kerätty

valmistajien kotisivuilta ja sähköpostien välityksellä. Sähköpostikyselyyni ohjelmistoista sain vastauksen vain Pro/II-ohjelmistosta. Esimerkiksi aspenOne-ohjelmistoa en voi esittää ohjelmiston kotisivun tietoja laajemmin.

2.1.1 ChemCAD

ChemCAD on yhdysvaltalaisen Chemstations Inc. -yrityksen vuodesta 1988 kehittämä prosessimallinnusohjelmisto. Ohjelmiston kehityksen pohjana ovat olleet öljyteollisuuden tarpeet. ChemCAD-ohjelmistosta oli 29.9.2005 saatavilla versio 5.5 (kuva 1). [3]



Kuva 1. ChemCAD 5.5 ohjelmistolla luotu prosessikaavio. Kuvan alaosassa näkyvät ChemCAD-ohjelmistossa käytettävissä olevat laitesymbolit. Kuva lähde: <http://www.chemstations.net/documents/ccsoln.pdf> (27.9.2005 14:38)

ChemCAD-ohjelmistoon on integroitu alun perin erillisinä ohjelmina olleet tasapainotila-mallinnus, dynaaminen prosessimallinnus, laitteiston mitoitus ja laitteiston hinta-arviointi. Chemstations mainostaa ohjelmistonsa perustana olevien teknologioiden, kuten termodynaamisen laskennan, yksikkölaitelaskennan ja laskennan suorittavien matemaattisten ratkaisijoiden, olevan tasokkaita. ChemCAD-ohjelmalla voidaan saada hinta-arvio mallinnetulle laitteistolle. Saatua arviota voidaan käyttää pohjana alettaessa selvittämään erilaisten laitteistoratkaisujen välille muodostuvia hintaeroja.

ChemCAD-ohjelmistoon on integroitu seuraavat kuusi ohjelmaa. [4]

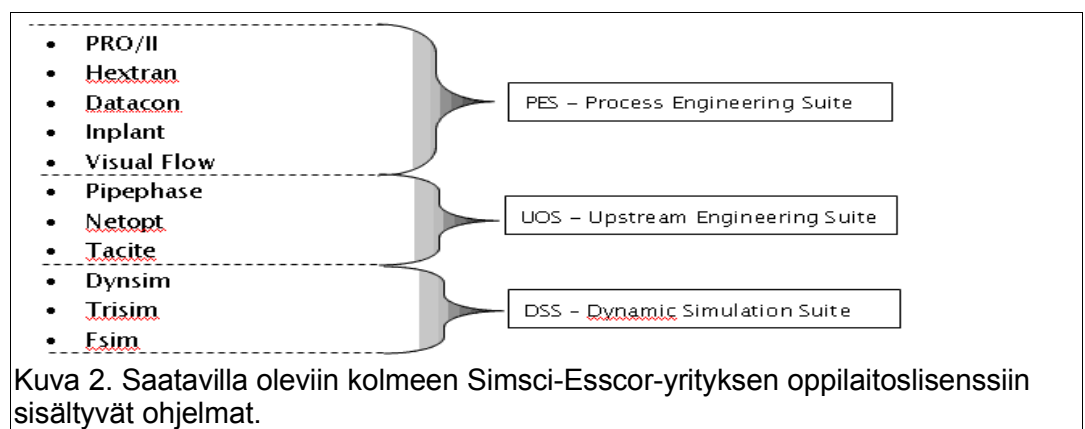
1. CC-STEADY STATE -prosessisimulointiohjelmaan kuuluvat ainetietokannat, termodynaaminen laskenta ja yksikkölaitteiden laskenta.
2. CC-DYNAMICS on dynaamisen tilan prosessisimulointiohjelma prosessimallien dynaamisen muutoksen tarkasteluun. CC-DYNAMICS sisältää yhdistettynä kaksi ohjelmaa, CC-ReACSin ja CC-DCOLUMNin.
3. CC-BATCH-erätislaussimulointiohjelma.
4. CC-THERM on lämmönvaihdinten suunnittelu- ja mitoitusohjelma, joka sisältää laskennan seuraaville lämmönvaihdintyypeille: putkilämmönvaihtimet, levylämmönvaihtimet, ilmajäähdytteiset lämmönvaihtimet ja kaksoisputkilämmönvaihtimet.
5. CC-SAFETY NET on putkilinjojen ja varoventtiilien suunnittelu- ja simulointiohjelma, joka sisältyy nykyään CC-STEADY STATE-ohjelmaan.
6. CC-FLASH on fyysisten ominaisuuksien ja faasitasapainon laskentaohjelma, joka suorittaa aineiden ja seosten fysikaalisten ominaisuuksien ja faasitasapainojen laskennan.

Moduulien ominaisuuksien erittelyt ovat saatavilla pdf-tiedostona ChemCADin sivuilta, verkko-osoitteesta <http://www.chemstations.net/documents/ccsuite.pdf>. Chemstation-yrityksen sivuilla on myös manuaalit ChemCAD-ohjelmistolle ja sen muodostaville ohjelmille osoitteessa <http://www.chemstations.net/documents/manuals.htm> Osoitteessa <http://www.chemstations.net/documents/CCSSandCCBmanual54.pdf> on ChemCAD 5.4-ohjelmiston manuaali.

2.1.2 Pro/II

Tässä osassa esitetyt tiedot perustuvat paitsi Pro/II-ohjelmiston kotisivuihin, myös sähköposteihin ja esiteteksteihin, joita sain SimSci-Esscorissa työskentelevältä David P. Whittakerilta (katso liite 1). Invensys-yhtymään kuuluvassa SimSci-Esscor -yhtiössä kehitettyjä prosessisimulointiohjelmistoja käytetään suunnitteluun kemian teollisuuden aloista öljyteollisuudessa, peruskemian teollisuudessa, erikoiskemikaalien valmistuksessa ja lääketeollisuudessa. SimSci-Esscor tarjoaa ohjelmistojaan kolmena lisenssipakettina oppilaitoksille (kuva 2). Ensimmäinen,

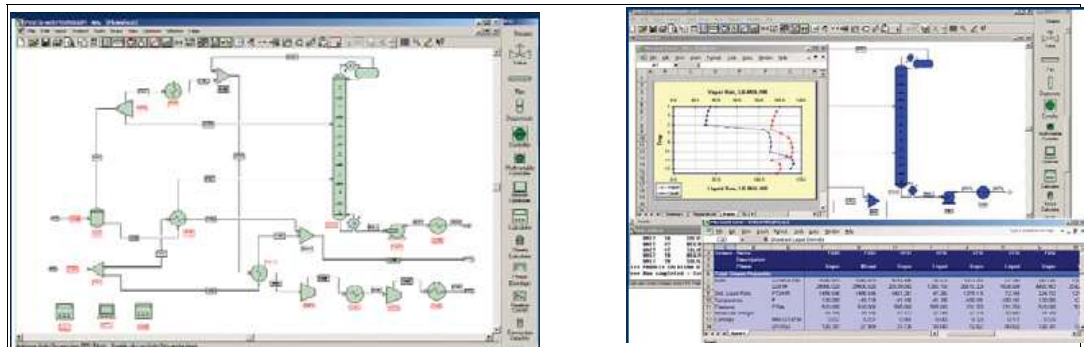
Process Engineering Suite (PES), sisältää oppilaitoksemme tarvitsemat prosessisimulaatiotyökalut. Toinen lisenssipaketti, Upstream Engineering Suite (UOS), tarjoaa välineitä öljy- ja kaasukenttien hyödyntämisen optimointiin ja jossain määrin käytettävien putkistojen mitoittamiseen. Kolmas lisenssipaketti, Dynamic Simulation (DSS), sisältää dynaamisen simulaation ohjelman. Lisenssien osina olevat ohjelmat on esitelty kuvassa 2. Kuvan jälkeen seuraavana on esitetty eri lisenssien sisältämien ohjelmien tarkemmat kuvaukset. Ohjelman nimen jälkeen on sulkuihin merkitty, mihin lisenssipakettiin ohjelma kuuluu.



Process Engineering Suite (PES)-lisenssin sisältämät ohjelmistot

PRO/II (PES)

Pro/II on prosessimallinnusohjelmisto aine- ja energiataseiden laskentaan. Pro/II-ohjelmistosta oli 29.9.2005 saatavilla versio 7.0. Pro/II käyttää prosessikaavioiden laatimiseen SimSci-Esscor -yhtiön kehittämää Provision-ohjelmaa. Provision on pyritty integroimaan vahvasti Windows-käyttöjärjestelmään. PRO/II:n käyttöliittymä muistuttaa Balasiin nykyisin kehitettävän Visio-ohjelmaan perustuvaa prosessikaavioiden laatimisessa käytettävää käyttöliittymää. Pro/II:n käyttöliittymä on esitetty kuvassa 3. [8]



Kuva 3. Vasemmalla kuvattuna Pro/II-ohjelmistolla luotu prosessikaavio tislaukskolonnista. Oikean puoleisessa kuvassa nähdään prosessikaavion simulaatioajon tulosten esitys. Kuvien lähde <http://www.simsci-esscor.com/NR/rdonlyres/7525887F-A96F-4ACF-808E-9C59A07FFE0E/0/PROIIComprehensive.pdf> (29.9.2005 19:12)

Pro/II rakentuu perusohjelmistosta sekä sitä laajentavista ohjelmamoduuleista ja liittymämoduuleista, joiden avulla Pro/II:en käsittelemiä tietoja voidaan käyttää muissa ohjelmissa. Useat ohjelmamoduuleista on SimSci-Esscor lisensoinut muilta yrityksiltä, jotka ovat varsinaisesti kehittäneet ne. Lisensoimalla on Pro/II:een lisätty seuraavat ohjelmamoduulit.

- RATEFRAC-moduuli on monipohjaisten höyry-nestekolonnien laskentaan. Se laskee imeytymisen, haihtumisen sekä atsetrooppisen tislauksen ja uuttotislauksen kulun. RATEFRAC-moduuli on Koch-Glitsch-yritykseltä lisensoitu osa Pro/II-ohjelmistoa, johon Pro/II-käyttäjillä on automaattinen lisenssi.
- Batch-moduuli soveltuu panosreaktoreiden ja tislaukskolonnien suunnitteluun ja analysointiin. Moduuliin sisältyvät sekoitettu panosreaktori ja panostislaukskolonni voidaan joko simuloida sellaisenaan tai osana Pro/II-prosessikaaviota. Laitteiden toiminta on kuvattu toimintaohjeiden sarjana, mikä tarjoaa joustavuutta malleihin. Batch-moduuli on täysin integroitu Pro/II:een, Provisionia ei välttämättä tarvita, mutta sitä voidaan käyttää.
- Electrolyte-moduulia käytetään elektrolyyttisten reaktioiden mallintamiseen. Moduuli käyttää OLI Systems Inc. -yrityksessä luotuja elektrolyyttien termodynamiikkaa koskevia algoritmeja. Moduulissa voidaan luoda omia elektrolyysimalleja ja tietokantoja omista elektrolyyteistä.
- Polymer-moduuli laajentaa tasapainotilan suunnittelun ja analysoinnin polymeroinnin alalle. Sen avulla on mahdollista tutkia prosessia monomeerin puhdistuksesta ja polymerointireaktioista lopputuotteen erotteluun ja

viimeistelyyn. Moduuli antaa mahdollisuuden kuvailla mikä tahansa polymeeri sarjana keskimääräisiä molekyyliainoja, mikä antaa mahdollisuuden simuloida polymeerien sekoittumista ja erottumista.

- Profimatics-moduulit eli KBC-yrityksessä kehitettävät Profimatics-reaktorimoduulit (REFSIM, HTRSIM, FCCSIM) on integroitu Pro/II:een yksikköprosesseina.
- AMSIM-moduuli on Pro/II:een integroitu Schlumberger-yrityksen AMSIM-ohjelma, joka simuloi H₂S- ja CO₂-kaasujen ja merkaptaanien poistoa maakaasu- ja nestekaasuvirtauksista käyttämällä poistoon kemikaaleja (amiineja) ja fysikaalisia liuottimia.

Tarkemmat tiedot PRO/II:n moduuleista on saatavilla verkko-sivulta

<http://www.simsci-esscor.com/us/eng/products/productlist/proII/Application+Modules.htm>.

Pro/II:een on saatavilla myös kolme laajentavaa moduulia, joiden avulla Pro/II kommunikoi muiden ohjelmien kanssa. Nämä muut ohjelmat on kuitenkin hankittava erikseen. Seuraavien ohjelmien käyttöön on saatavilla Pro/II laajennusmoduulit:

1. HTFS. PRO/II-HTFS linkki automatisoi virtausten tietojen haun Pro/II:en tietokannasta ja luo HTFS-syöttötiedoston tietojen pohjalta.
2. HTRI®. PRO/II-HTRI linkki sallii HTRI-yhtiössä kehitettävän XIST-vaippaputkilämmönvaihtimien suunnitteluohjelman suoraan Pro/II:en kanssa.
3. Linnhoff March. Massa- ja energiataseita voidaan siirtää SuperTarget-ohjelmiston Column-moduuliin, jossa voidaan arvioida erotteluprosessin kokonaisenergiatehokkuus.

Hextran (PES)

Hextran on lämmönvaihtimien ja lämmönsiirron tasapainotilasimulaattori, joka soveltuu lämmönvaihdinverkostojen analysointiin ja suunnitteluun. Hextraniin voi myös hankkia lisäosina HTRI-yrityksen (Heat Transfer Research, Inc.) ja AspenTech-yrityksen HTFS-lämmönvaihdinsuunnitteluohjelmat integroituina.

Datacon (PES)

Datacon on SimSci-Esscor -yhtiön ohjelma, joka myös käyttää Provisionia graafisena käyttöliittymänä. Dataconin avulla on mahdollista muuttaa reaaliaikaiset tekniset tiedot prosessista liiketaloudellisesti arvokkaaksi tiedoksi. Datacon sovittaa virtausten mittatiedot niin, että prosessilaitteet pysyvät aine- ja energiatasapainossa. Datacon oli 29.9.2005 versiossa 3.2.

Visual Flow (PES)

Visual Flow on hydraulikansuunnitteluohjelma, jolla voidaan suunnitella ja mallintaa turvallisuusjärjestelmiä ja varoventtiilien sijoittamista putkistoihin. Visual Flow pystyy käsittelemään erilaisia aineita kuljettavia putkitusjärjestelmiä, mukaan lukien höyryä kuljettavat järjestelmät. Putkistojen suunnittelu ja muokkaus tehdään isometrisessä näkymässä.

Inplant (PES)

Inplant on tehtaiden monifaasisia virtauksia sisältävien putkijärjestelmien simulointiohjelma, jolla putkijärjestelmät voidaan suunnitella, mitoittaa ja analysoida.

Upstream Engineering Suite (UOS)-lisensointiin sisältyvät ohjelmat

Pipephase (UOS)

Pipephase on monifaasi-nestevirtauksen simulointiohjelma, jota käytetään lähinnä öljy- ja kaasuverkostojen suunnitteluun öljy- ja kaasukentillä.

Netopt (UOS)

Netopt on Pipephasen lisämoduuli, jolla voidaan optimoida koko öljykentän tuotanto. Optimoinnin työkaluna käytetään putkilinjojen mitoitusta, painetutkimusta ja kaasun nosteen optimointia.

TACITE (UOS)

Pipephasen Tacite-lisämoduulilla voidaan suorittaa kolmivaiheinen dynaaminen analyysi putkilinjoista. Analyysiin kuuluvat putkilinjojen puhdistus läpiviedyllä

kappaleella ("pigging"), maaperän aiheuttama vajoama ("slugging") ja muut hetkelliset monifaasivirtaus-ilmiöt.

Dynamic Simulation Suite (DSS)-lisenssi

Dynsim (DS)

Dynsim on dynaaminen prosessisimulaatio-ohjelma. Dynsimillä voidaan arvioida muutosten vaikutusta prosessiin suunnitteluvaiheessa tai muutostöiden yhteydessä. Ohjelmalla simuloitessa voidaan käytettyihin prosessikaavioihin lisätä prosessia ohjaavaa automaattikkaa. Dynsimillä voidaan myös suorittaa konseptitason suunnittelua, tehtaan prosessiautomaatiikan suunnittelua, turvallisuuden HAZOP-tutkimuksia (Hazard and Operability, riski ja käytettävyys), DSC-tarkistuksia (Distributed System Control, hajautettu järjestelmänohjaus), käyttöhenkilökunnan koulutusta ja tehtaan tehokkuuden parantamiseen suuntaavia tutkimuksia.

Lisenssien kustannukset

Jokin kolmesta lisenssistä (PES, UOS tai DSS) 12 kuukaudeksi:

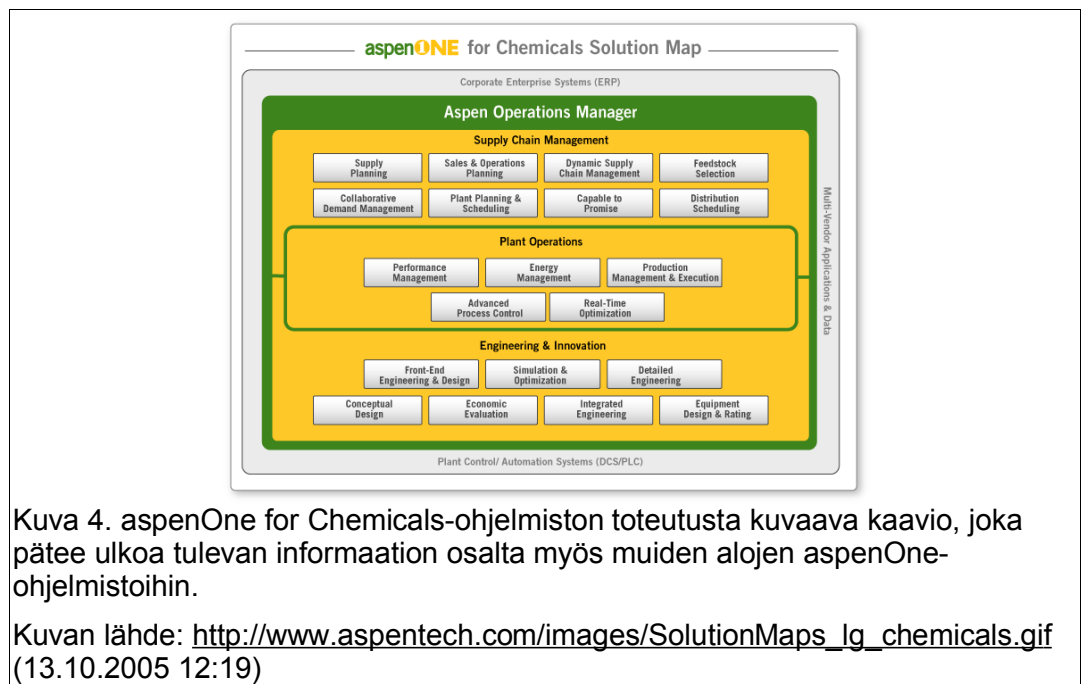
Yhden käyttäjän yhden PC:n lisenssi	200 US\$
20 yksittäisen PC:n lisenssiä	1,000 US\$
20 käyttäjän verkkolisenssi	1,000 US\$
Toimituskulut	25 US\$ per lähetys

Maksutapana on ennakkomaksu lisenssijakson alussa. Ennakkomaksua ei palauteta. Lisenssiin sisältyvät ohjelmistot, lisenssinvalvoja (yksittäisissä paikallisissa tietokoneissa Dongle, verkkolisenssissä sähköinen turvallisuuskoodi), verkkomateriaali (manuaalit, mallit, referenssit), 1 painettu manuaali jokaista yksittäistä PC-lisenssiä kohti tai 4 painettua manuaalia jokaista 20-käyttäjän verkkolisenssiä kohden. Lisäksi verkkolisenssin haltijalla on mahdollisuus osallistua puoleen hintaa Simsci-Esscorin järjestämiin kaksipäiväisiin koulutusjaksoihin.

Lisäksi Simsci-Esscor tarjoaa vuosittain 500 US-dollarin palkinnon parhaalle julkaistulle tutkimukselle, jossa esitellään simuloinnin käyttöä prosessiteollisuudessa.

2.1.3 aspenONE

Kemianteollisuudessa laajalti käytetyn AspenTech-yrityksen prosessimallinnusohjelmiston aspenOne-ohjelmiston rakenne on modulaarinen, kuten aikaisemmin esiteltyjen ohjelmistojen. AspenOne-ohjelmistossa on eri kemianteollisuuden aloille omat ohjelmistonsa ja palvelunsa sisältävä kokonaisratkaisu. AspenOne:ssa on pyritty tarjoamaan koko tuotantoketjun yli toimivia ratkaisuja, ohjelmistot eivät siis ole puhtaasti teollisuuden tuotantoprosessien simulaatiota. ”Aspen Operations Manager”-nimellä kulkeva ohjelmisto on pohja kaikkien alojen aspenOne-osaohjelmistoille, ja se pyrkii toimimaan keinona yhdistää tehdastason reaaliaikainen, muuttuva käyttötieto liiketoimintatason tietoihin hintojen ja kannattavuuden muutoksista. Eri alojen omat osaohjelmistot on taas jaettu jokaiselle osa-alueelle tyypillisten vaatimusten mukaisesti pienempiin osa-alueisiin. [1]



Kuvassa 4 on kuvattuna aspenOne:in tapa jakaa tuotantoketjun toiminnan osaluokat eri ohjelmien vastuulle. Kuvassa on varsinaista tuotantolaitoksen toimintaa käsittelevät ohjelmat sijoitettu keskelle ja mitä ulommas kuvan keskeltä edetään, sen kauemmas edetään toteutuksesta suunnitteluun. Kuvassa uloimpana vaalean harmaalla tekstillä on merkitty yrityksen taloudelliset tietojärjestelmät (ERP), muiden toimittajien ohjelmistot ja tiedot sekä itse tuotantolaitoksen ohjaus- ja automaatiojärjestelmät. Nämä ovat aspenOne-ohjelmiston ulkopuolella, mutta voivat toimia sen kanssa yhteistyössä. Supply Chain Management -osiossa keskitytään koko tuotantoketjun tehokkuuden laaja-alaiseen parantamiseen. Plant Operations -osiossa ovat tuotantolaitostason toiminnot, suorituskyvynhallinta, energianhallinta, tuotannonhallinta ja toteutus, kehittynyt prosessinhallinta ja tosiaikainen prosessin optimointi. Engineering & Innovation -osiossa on työkaluja suunnittelua, mitoitusta ja innovointia varten. Niillä ovat mahdollisia esimerkiksi konseptisuunnittelu, prosessien taloudellinen arviointi, laitteiden suunnittelu ja mitoitus, yksityiskohtainen suunnittelu, simulointi sekä optimointi.

Eri kemian teollisuuden aloista aspenOne sisältää omat ohjelmansa seuraaville aloille:

- aspenOne for Oil & Gas sisältää öljyn- ja kaasunjalostusteollisuuden tarvitsemia ohjelmia.
- aspenOne for Petroleum on öljyn hankinnan, jalostuksen ja kuljetuksen erikoisohjelmisto.
- aspenOne for Chemicals (kuva 3) sisältää peruskemian teollisuuden työkaluja, joilla voidaan arvioida mm. reaktioiden ja laitteistojen toimivuutta toimintaolosuhteissa, tai tarkastella koko tuotantoketjun toimintaa hankinnasta prosessoinnin kautta myyntiin asti. Sillä voidaan myös luoda tuotantolaitoksia, jotka ovat turvallisia, kuluttavat energiaa ja raaka-aineita mahdollisimman vähän ja ovat taloudellisesti kannattavia. AspenTechin oman arvion mukaan taloudellisesti saavutettavat hyödyt ovat seuraavat: parempi resurssien käyttö lisää voittoa 3 % - 5 %, kulujen pieneminen 1 % - 10 % käyttö-, jakelu- ja raaka-ainekuljetusten vähetessä, varastoja voidaan pienentää 10 % - 30 %, kun varastoissa tietyllä hetkellä olevien raaka-aineiden, välituotteiden ja lopputuotteiden määrä vähenee.

FlowMac-ohjelmaan on saatavilla 15 erilaista kirjastoa, jotka sisältävät noin 500 laitetta TMP-laitosten, kierrätyskuitulaitosten, paperikoneiden, kiertovesien käsittelyn ja kokonaisten paperitehtaiden simulointiin. PaperMac on valinnainen kirjasto, jolla FlowMac arvioi monikerroksisen paperin ja kartongin ominaisuuksia: tiheyttä, kirkkautta, opasiteettia ja taipuisuutta. Myös valmistuksen parametrit ja kustannukset voidaan karkeasti arvioida. Valinnaista MillMac-kirjastoa käytetään Flowmacin osana, kun tarvitsee simuloida kokonaisen tehtaan toimintaa. MillMacillä voidaan arvioida tehtaan ylös- ja alasajoja, vesikiertojen epätasapainoja, tehtaan tehokkuutta ja tuoreen veden kulutusta.

2.2.2 Balas

Balas on Valtion teknisellä tutkimuslaitoksella kehitettävä metsäteollisuuden simulointiohjelma. Balas-ohjelmistoa on esitelty laajemmin myöhemmin tässä työssä kappaleesta 3 alkaen.

2.2.3 Paperinvalmistuksen verkko-oppimisympäristöt KnowPap ja KnowPulp

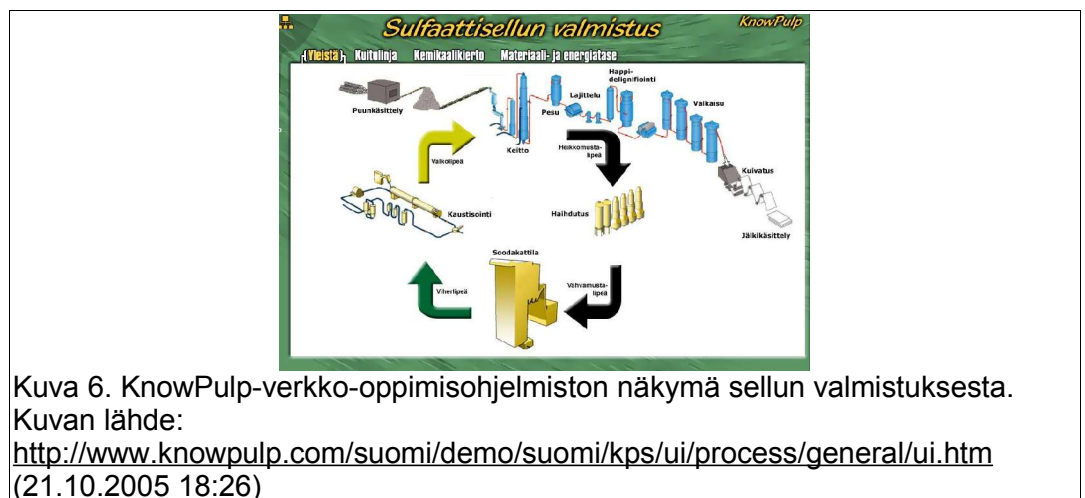
Suomessa toteutettiin vuosina 1997-2000 Valtion teknisen tutkimuslaitoksen Tuotteet ja tuotanto -yksikön alaisena KnowPap-projekti, jonka tehtävänä oli luoda metsäklusterin tarvitsema koulutusohjelmisto. Projektissa valtion laitokset ja yritykset tekivät yhteistyötä. Sen rahoittivat Tekes ja osallistuvat yritykset. [7]

KnowPap-projektissa pyrittiin samassa verkkopohjaisessa koulutusympäristössä esittämään paperinvalmistuksessa tarvittava prosessitieto ja automaatiota koskeva tieto. KnowPap-oppimisympäristö toteutettiin verkkopohjaisena Intranet-palveluna, jotta se olisi helposti ylläpidettävissä ja olisi myös käytettävissä itseopiskeluun. Vuosina 2001-2003 toteutettiin KnowPap-projektin pohjalta sellunvalmistusta ja sellutehtaiden prosessinohjausta käsittelevän KnowPulp-verkko-oppimisympäristön luonut projekti.

KnowPap- ja KnowPulp-projektien tuloksena syntyneet verkko-oppimisympäristöt ovat saatavilla internetissä. Niiden käyttöön tarvitaan vain suhteellisen uusi

verkkoselain. Oppimisympäristöt ovat saatavilla suomen ja englannin kielillä. Oppimisympäristöjen käyttö on lisenssipohjaista. Oppimisympäristöä käyttävät yritykset ja oppilaitokset maksavat lisenssimaksun jokaisesta rekisteröidystä käyttäjästä. Tampereen ammattikorkeakoulu käyttää oppimisympäristöjä, joten TAMK:in opettajat ja oppilaat voivat päästä oppimisympäristöjen suljettuihin osuuksiin tilaamalla lisenssin sivulta <http://www.knowpulp.com/suomi/knowpulp.htm#>. 24.10.2005 hinnaksi lisensseille molempien oppimisympäristöjen suomenkielisiin versioihin tulisi 75 € käyttäjältä. Jos hankitaan lisenssit sekä suomen että englannin kielisiin versioihin molemmista oppimisympäristöistä, tulee hinnaksi 111 € käyttäjältä.

KnowPulp-oppimisympäristössä voi käyttäjä perehtyä sellunvalmistukseen ja sellutehtaiden automatiikkaan (kuva 5). KnowPulp löytyy suomenkielisenä versiona verkko-osoitteest: <http://www.knowpulp.com/suomi/ KnowPulp> ja englanninkielisenä versiona osoitteesta <http://www.knowpulp.com/english/>.



KnowPap-verkko-oppimisympäristössä voi käyttäjä tutustua paperinvalmistukseen ja paperitehtaiden automatiikkaan (kuva 6). KnowPap löytyy suomenkielisenä versiona verkko-osoitteesta: <http://www.knowpap.com/suomi/> KnowPap ja englanninkielisenä versiona osoitteesta <http://www.knowpap.com/english/>.

2.3 Kemian alan insinöörejä kouluttavien ammattikorkeakoulujen käyttämiä simulointiohjelmia

Jotta voisin arvioida Balasin soveltuvuutta insinöörikoulutukseen, kartoitin muiden ammattikorkeakoulujen kokemuksia sen käytöstä. Ilmeni, ettei Balas ole käytössä ainakaan kemianinsinöörien koulutuksessa missään ammattikorkeakoulussa, vaan että Balas on käytössä oppilaitoksista teknisillä korkeakouluilla.

Sähköpostikysely osoitti ChemCAD:in olevan eniten käytössä kemianinsinöörien opetuksessa. ChemCADiin hieman tutustuneena en näe mitään teknistä tai taloudellista syytä sen näin merkittävään osuuteen opetuksessa. Mahdollisesti mainonnalla on ollut osuutta asiaan. Esitän seuraavaksi sähköpostikyselyideni perusteella saamani vastaukset ammattikorkeakoulujen käyttämistä simulointiohjelmista.

Tampereen ammattikorkeakoulu (TAMK)

Tampereen ammattikorkeakoululla on kemianinsinöörien koulutuksessa käytössä vain ChemCAD-simulointiohjelmisto.

Satakunnan ammattikorkeakoulu (SAMK)

Satakunnan ammattikorkeakoulussa on kemiantekniikan opetuksessa käytössä ChemCAD, jota käytetään lähinnä tehdassuunnittelun opintojaksoissa. Lisäksi prosessien dynaamiseen simulointiin käytetään Matlab/Simulink-pakettia. Kokemukset kyseisistä ohjelmista ovat hyviä. Ne lienevät jatkossakin merkittävässä käytössä. [11]

Keski-Pohjanmaan ammattikorkeakoulu

Keski-Pohjanmaan ammattikorkeakoulussa käytettiin aikaisemmin Unicorn-simulointiohjelmistoa. Sitten siirryttiin käyttämään Chemcad- ja Hysim-ohjelmistoja. Nykyisin tärkeimpänä ohjelmana on AspenTech-yrityksen Hysys 2004 -ohjelmisto. Käytössä ovat myös Aspen Batch Plus sekä HX-net ja B-JAC. Opiskelijoiden kanssa myös tehdään jonkin verran malleja yksinkertaisista prosesseista Excel-taulukkolaskentaohjelmalla. Matlab-ohjelmiston Simulink-

toolkit on käytössä automaatiotekniikan opetuksessa, kun tutkitaan automaation mahdollisuuksia kemianprosessien ohjaukseen. Keski-Pohjanmaan ammattikorkeakoululla, kuten myös Tampereen ammattikorkeakoululla on ohjelmistojen käyttöä opetuksessa rajoittanut ajan puute, jonka takia opettajat eivät ole voineet perehtyä kaikkien ohjelmistojen ominaisuuksiin riittävästi. [12]

3 BALAS-SIMULOINTIJÄRJESTELMÄN RAKENNE

Balas-simulaatio-ohjelmaa on kehitetty 20 vuoden ajan Valtion teknisellä tutkimuslaitoksella. Prosessien simuloiminen Balas-ohjelmistolla vaatii kahden erillisen, mutta yhteistyössä toimivan ohjelman käyttöä. Ensimmäisellä ohjelmalla luodaan prosessilaitteet ja virtaukset esittävä prosessikaavio, jonka jälkeen Balasilla voidaan tutkia ja simuloida luodun prosessikaavion esittämän laitteiston toimintaa. Lisää Balasin ominaisuuksien esittelyä löytyy liitteistä 2 (Introduction to Balas Software) ja 3 (Balas Process Simulation Software). [9]

Ensimmäisenä simulaatiojärjestelmän osana on toinen kahdesta vaihtoehtoisesta ohjelmasta, joilla suoritetaan prosessin laite- ja virtaustason suunnittelu ja määrittely eli prosessikaavion laatiminen. Tällä hetkellä on tarjolla kaksi ohjelmaa prosessikaavion laatimiseen: nykyisin pääasiallisesti käytettävä FloSheet-ohjelma ja Valtion teknisellä tutkimuslaitoksella kehitteillä oleva Microsoftin Visiolla toteutettu prosessikaavion suunnittelu ympäristö. Visio-versio Balasista on pilottikäyttöasteella, mutta sitä suositellaan jo nyt Balasia käyttöön otettaessa. Visio-ympäristö tulee korvaamaan FloSheet-ohjelman, koska sen kehitystyö ja käyttötuki ovat loppumassa sitä kehittäneen yrityksen vähenevän kiinnostuksen myötä. Tämä tutkintotyö kuitenkin käsittelee vain FloSheet-ohjelman käyttöä Balasin kanssa.

Prosessikaavion suunnitteluohjelman lisäksi simuloinnin toinen osa on varsinainen simulaatio-ohjelmisto, Valtion teknisellä tutkimuslaitoksella kehitettävä Balas. Balas sisältää seuraavat osat.:

- Balas-käyttöliittymä toimii liittymänä käyttäjän ja simulaattorikirjaston välillä.

- Simulaattori suorittaa varsinaiset laskelmat ja simulaatiot.
- Tietokanta sisältää kaiken tiedon, jonka simulaattori laskelmissaan tarvitsee. Tietokanta yhdistää Balas-käyttöliittymän ja simulaattorin.

3.1 Flosheet-prosessikaavioiden suunnitteluohjelman rakenne

FloSheet on englantilaisen Coastform Systems Ltd-yrityksen kehittämä prosessikaavion suunnitteluohjelma. FloSheet tarjoaa Balasin käytössä tarvittavat työkalut prosessikaavion suunnitteluun; yksikköprosessien sijoittamiseen, siirtämiseen ja poistamiseen sekä virtausten piirtämiseen ja liittämiseen. Se ei kuitenkaan käsittele virtausten tai yksikköprosessien ominaisuuksia tai toimintaa, vaan näistä toiminnoista vastaa Balas. [5]

Flosheetin käyttöliittymä



FloSheetin painikkeet on esitetty kuvassa 8. Liitteessä 4 on esitetty painikkeiden toimintojen tarkemmat kuvaukset.

Flosheetin valikot

Flosheet-ohjelman tärkeimmät toiminnot on kerätty ja jäsennelty valikoihin. Valikot ovat File-valikko, jossa on työkalut tiedostojen käsittelyyn, Edit-valikko, jossa on prosessikaavion muokkaukseen liittyviä toimintoja, View-valikko, jossa on FloSheetin näkymän muokkaamiseen liittyviä toimintoja, Select-valikko, jossa on prosessisymbolien valintaan liittyviä toimintoja, Format-valikko, jossa on toimintoja ohjelman eri ominaisuuksien muokkaukseen ja Help-valikko, josta

löytyvät apudiedostot. Flosheet-ohjelman valikoiden sisältö on esitetty tarkemmin liitteessä 5.

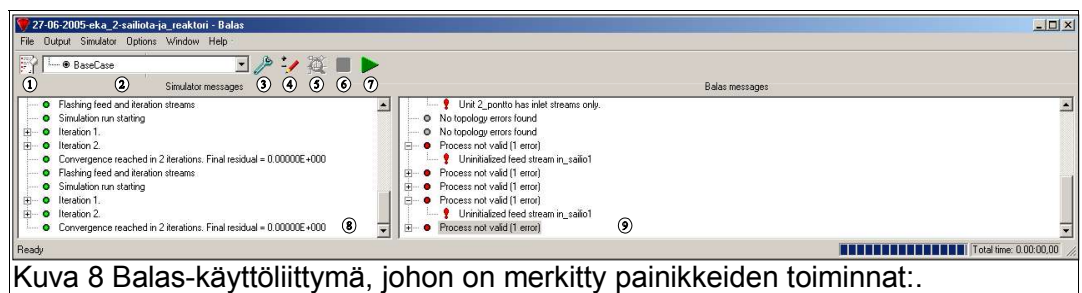
FloSheet-ohjelman tunnetut virheet

FloSheet tallentaa kaikki virtaus- ja tekstityylit, jotka ovat muistissa kun FloSheet-prosessikaavio tallennetaan. Kun avataan jokin tallennettu prosessikaavio, avautuu samalla avattavan prosessikaavion mukaan tallennetut tyylit, jotka korvaavat mahdolliset avaamisen hetkellä käytössä olleet tyylit. Kun kaavioiden hierarkiassa korkeimmalla tasolla oleva prosessikaavio suljetaan, eivät kuitenkaan siihen liittyvät alemman hierarkiatason kaaviot sulkeudu. 'Undo delete' -toiminto yksikkösymboleille ei yhdistä uudelleen katkaistuja virtauksia, vaan käyttäjän pitää itse tehdä se.

3.2 Balas-ohjelman rakenne

Balas-simulointiohjelma antaa käyttäjälle mahdollisuuden tarkastella ja muokata virtausten ja yksikköprosessien tietoja, määrittellä erilaisia simulaatorakennelmia kuten simulaatiotapauksia (Case) ja tulostussarjoja sekä kontrolloida simulaation toteutusparametrejä ja simulaation edistymistä.

Balasin käyttöliittymä



Kuva 8 Balas-käyttöliittymä, johon on merkitty painikkeiden toiminnot.

Kuvassa 8 esitetyn käyttöliittymän painikkeitten toiminnot on selitetty seuraavaksi.

1. Painike tyhjentää "Simulator messages" ja "Balas messages"-ikkunat viesteistä.
2. Alasvetovalikossa näkyy avoin laskenta-case ja josta voidaan valita käyttöön haluttu laskenta-case.

3. Alustustyökalu tuo esiin ruudun, jossa määritellään raaka-ainevirtaukset, iterointivirtaukset ja virtausluokat.
4. Painikkeen toiminnasta ei ole mahdollista antaa kuvausta johtuen ohjelmiston lyhyehköstä käyttöajasta oppilaitoksella.
5. Tämä painike on topologian tarkastukseen käytettävä painike. Jos prosessikaavio on uusi tai vanhaan on tehty muutoksia, on tätä painiketta käyttämällä tarkastettava kaavion topologia ennen kuin voidaan käyttää Balasia.
6. Tällä painikkeella voidaan pysäyttää käynnissä olevan simulaation ajaminen.
7. Tällä painikkeella käynnistetään aktiivisen laskenta-casen simulointi.

Käyttöliittymä (kuva 8) ei tallenna itsessään tietoa, vaan se lukee kaiken näytettävän tiedon tietokannasta. Käyttöliittymä myös tallentaa kaiken käyttäjän muokkaaman tiedon samaan tietokantaan.

Tietokanta

Tietokanta sisältää tiedon, joka liittyy simulaatiomalliin, kuten yksikköprosesseihin ja virtauksiin nimineen ja tunnuslukuineen, suunnittelutoimintoihin, laskentatapahtumiin sekä ratkaisijoiden asetuksiin. Kaikesta tästä tietokanta luo suuren määrän tietoa: se muun muassa valitsee iteroitavat virtaukset ja selvittää niiden laskentajärjestyksen sekä selvittää virtausten referenssiriippuvuudet ja luo uusia virtausten luokkia.

Kaiken tämän lisäksi tietokanta sisältää rajapinnat, jotka ovat tarpeen kun Balasin eri osat kommunikoivat keskenään. Tietokannassa on myös DCOM (Microsoftin Distributed Common Object Model)-rajapinta, jota käytetään esimerkiksi MS Excelin ja Balasin välisessä kommunikaatiossa.

Simulaattori

Simulaattori sisältää prosessin yksikkölaskentamoduulit, fysikaalisten ominaisuuksien arviointimenetelmät ja lukuisia matemaattisia menetelmiä. Sen tehtävä on hoitaa prosessin varsinainen laskenta. Simulaattori etsii tarvittavan tiedon prosessille tietokannasta, kuten käytettävät laskentamoduulit, yksikköprosessien yhteydet ja virtausten komponenttien fysikaaliset ominaisuudet.

Prosessilaskelmien aikana simulaattori lähettää tietoa tietokantaan ja Balasin käyttöliittymään ruudulle.

Balasin valikot

Balasisa on kuusi päävalikkoa: File menu, Output menu, Simulator menu, Options menu, Window menu ja Help. Liitteessä 6 on selitetty näiden valikkojen rakenteet ja sisältö.

4 SIMULOITAVAN JÄRJESTELMÄN MALLINNUS

Kun simulaation ensimmäinen vaihe eli simuloitavien pulmien tunnistaminen ja alustava tutkiminen on suoritettu, on seuraava vaihe käsiteltävän pulman määrittely simulaattorin käsittämällä tavalla. Tässä kappaleessa käsitellään Balasin ja Flosheetin käyttöä simuloitavan ongelman käsittelyyn.

4.1 Balas-ohjelman käynnistys

Seuraavassa ohjeessa oletetaan Balasin ja Flosheetin olevan asennettuina käyttäjän koneella. Balasin oletusasennus lisää Windowsin Käynnistä-valikkoon kohdan Käynnistä > Ohjelmat > Balas ”x.x” > FloSheet, josta FloSheet voidaan käynnistää. ”x.x” korvataan käytettävän Balasin versionumerolla. Tällä hetkellä Balasista on käytettävissä versio 3.0.

Kun käynnistetään Flosheet-ohjelma Käynnistä-valikosta edellä kuvatulla tavalla, avautuu Flosheetin Welcome-ikkuna. Tässä ikkunassa käyttäjä voi luoda uuden prosessikaavion käyttämällä valmista pohjaa tai avata jonkin jo luodun prosessikaavion. Lisäksi Welcome-ikkunassa on mahdollisuus estää tämän ikkunan näyttäminen seuraavalla kerralla, kun Balas käynnistetään. Kaikki ikkunan toiminnot löytyvät Flosheetistä, joten se ei ole pakollinen. Welcome-ikkunassa tehdyt valinnat hyväksytään OK-painikkeella tai voidaan sulkea Balas Cancel-painikkeella. Kun painetaan OK-painiketta, ilmestyy ruudulle sekä FloSheet-ikkuna

että Balas-käyttöliittymä-ikkuna ja prosessitaulukon luominen ja käsittely voidaan aloittaa. [2]

4.2 Prosessikaavion piirtäminen ja muokkaaminen FloSheetillä

Prosessikaavion piirtäminen suoritetaan sijoittamalla prosessikaavioon prosessilaitteiden symboleita ja yhdistämällä nämä laitesymbolit putkilinjoja kuvaavilla viivoilla. Tässä tutkintotyössä Balas-ympäristön prosessilaitetta kuvaavaa symbolia kutsutaan laitteeksi, laitesymboliksi tai yksikkösymboliksi ja putkilinjaa kuvaavaa viivaa virtaukseksi.

Prosessilaitteen symbolin lisääminen prosessikaavioon

Laitesymboli voidaan lisätä Balasissa prosessikaavioon kahdella tapaa. Ensimmäinen tapa on käyttää symbolityökalua. Toinen keino laitesymbolin lisäämiseen on käyttää omaa ikkunakseen aukeavaa symbolikirjasto-ikkunaa. *Symbolityökalu*-ikoni on Balasin FloSheet-työkalurivissä. Kun tätä ikonia painetaan, voidaan viereisestä vetovalikosta valita symbolikirjasto, johon haluttua laitetta kuvaava symboli sisältyy. Seuraavasta vetovalikosta voidaan valita haluttu ikoni. Tämän jälkeen symboli siirretään prosessikaavioon napsauttamalla haluttuun kohtaan.

Symbolikirjasto-ikkuna voidaan avata painamalla sen ikonia FloSheet-työkalurivissä. Ikonia painettaessa avautuu ruudulle ikkuna, jonka otsikkona on "Symbols". Tässä ikkunassa on esitetty kaikki saatavilla olevat symbolikirjastot selattavassa muodossa. Painamalla halutun symbolin sisältävän symbolikirjaston edessä olevaa "+"-merkkiä, kyseinen kirjasto avautuu. Tämän jälkeen voidaan haluttu symboli valita kaksoisnapautuksella. Symboli voidaan siirtää prosessikaavioon napsauttamalla haluttuun kohtaan FloSheetin prosessikaaviossa.

Laitesymbolit liitetään toisiinsa virtauksilla ja virtaukset kytkeytyvät laitteiden liitosportteihin, eli laitteen sisään- ja ulostuloihin. Jokaiselle laitteelle on merkitty vain kyseiselle *laitteelle tyypilliset liitäntäportit* ja porttien sijainti ja tarkoitus riippuu siis laitteesta. Portit näkyvät ympyröinä laitteiden reunoilla virtauksia

piirrettäessä tai ne voidaan asettaa olemaan esillä koko ajan napsauttamalla FloSheetin työkalupalkin ”Snap points”-painike pohjaan. Portin toiminnasta saadaan lisätietoja viemällä hiiri sen päälle ja odottamalla hetki. Portin päälle avautuu tietoikkuna, joka kertoo, millainen portti on kyseessä (yleensä virtauksen sisään- tai ulostulo, ylivuoto tai korvaava virtaus).

Virtauksien piirtäminen prosessikaavioon

Virtaukset piirretään FloSheetillä käyttämällä joko AutoConnect-työkalua tai Viiva-työkalua. Kun on lisätty halutut virtaukset, tarkastetaan prosessikaavion topologia eli se, että kaikki virtaukset ovat yhdistetty vähintään yhteen laitteeseen.

Helpoin tapa piirtää virtaus FloSheetissä on käyttää FloSheet-työkalurivin *AutoConnect*-työkalua. AutoConnect-työkalun kuvaketta napsauttaessa hiiren osoitin muuttuu nuoleksi, jonka päällä on putken kuva. Laitteiden liitäntäportit tulevat näkyviin AutoConnect-työkalun kuvaketta napsauttaessa. Haluttaessa liitäntäportit saadaan aina näkyviin napsauttamalla ”*Snap points*”-kuvaketta FloSheet-työkalurivissä. Valmistelujen jälkeen voidaan piirtää halutut virtaukset prosessikaavioon. Virtausten yhdistyminen laitteisiin pitää varmistaa Balas-työkalurivin ”*Check process topology*”-painiketta napsauttamalla. Mahdolliset virheet topologiassa tulevat näkyviin ”Balas messages”-ikkunaan. Virheen edessä olevaa rastia napsauttamalla saadaan näkyviin tarkemmat tiedot virheestä.

Perusteellisempi tapa piirtää virtauksia FloSheet-prosessikaavioon on käyttää virtausten piirtämiseen FloSheetin *Viiva*-työkalua. Tämä työkalu otetaan käyttöön napsauttamalla FloSheet-valikon *Viiva*-ikonin. Kun on painettu tätä ikonia, tulevat prosessilaitteiden symboleihin näkyviin niiden liitosportit, joiden avulla voidaan laitteet yhdistää viivoilla, eli voidaan antaa prosessilaitteille tulo- ja lähtövirtaukset.

Yleisimmin putkilinja yhdistää kaksi prosessilaitetta, poikkeuksena raaka-aine- ja tuotevirtaukset, raaka-ainevirtauksien piirtäminen aloitetaan tyhjästä pisteestä prosessikaaviossa ja tuotevirtaukset taas päätetään tyhjään pisteeseen. FloSheetillä virtauksia piirrettäessä on merkitystä sillä, mihin suuntaan piirtäminen tapahtuu, virtauksen piirtovaiheet määräävät virtauksen suunnan. Virtauksen katsotaan

lähtevän pois päin piirtämisen alkupisteestä. Raaka-ainevirtaukset on siis aloitettava tyhjästä kohdasta prosessikaaviossa ja vasta sitten liitettävä laitteiden portteihin.

Virtauksen piirtäminen *aloitetaan* napsauttamalla prosessikaaviota kerran. Jos ei napauteta laitteen liitosporttia, kuten raaka-ainevirtauksia piirrettäessä, voi FloSheet antaa varoituksen. Tämä varoitus voidaan jättää huomiotta, jos se ei ole aiheellinen. (Varoituksen näyttämisen voidaan estää kokonaan FloSheet > Format > Preferences > Lines and Snapping -välilehdellä ottamalla rasti pois kohdasta "Line Snap Warnings".) Ensimmäisen napsautuksen jälkeen voidaan hiirtä liikuttamalla muodostaa halutun suuntainen ja mittainen putkilinja. Hiiren vasemman näppäimen napsautus *lopettaa* putkilinjan ensimmäisen osan piirtämisen ja muodostaa putkilinjaan mutkakohdan, jossa linjan suuntaa voidaan vaihtaa. Hiirtä liikuttamalla voidaan katkeamatonta putkilinjaa vetää haluttu määrä. Putkilinjan piirtäminen voidaan lopettaa joko jonkin laitesymbolin liitosporttia kerran napsauttamalla, tai jos ollaan piirtämässä tuotevirtausta, napsauttamalla kaksi kertaa samaan ruudukkopisteeseen prosessikaaviossa. Piirtäminen voidaan myös lopettaa "Ctrl"+"Enter"-näppäinyhdistelmällä tai putkilinjaa piirrettäessä hiiren oikeaa näppäintä napsauttamalla aukeavasta ikkunasta ja valitsemalla "Finish".

Virtausten mittasuhteita ja päätepistettä voidaan muuttaa napsauttamalla ensin FloSheet-työkalurivissä olevaa Viiva-ikonia ja sitten valitun virtauksen alku- tai loppupistettä. Valitun linjan väri muuttuu ja kynä-ikoni muuttuu oikealle nojaavaksi. Jos ei ole osuttu virtauksen alku- tai päätepisteeseen, alkaa FloSheet piirtää uutta putkilinjaa. Tästä tilasta päästään pois painamalla "Esc"-näppäintä kahdesti.

Jos halutaan *poistaa virtauksia*, valitaan ne ensin Valinta-työkalulla. Kun virtaus on valittu, se voidaan poistaa painamalla "Delete"-näppäintä tai napsauttamalla linjan päätä hiiren oikealla näppäimellä ja valitsemalla avautuvasta valikosta "Delete last point". Molemmat poistotavat poistavat linjaa aina seuraavaan mutkapisteeseen asti ja linjan poistamista voidaan jatkaa, kunnes linja on koko matkaltaan poistettu.

Virtauksen kääntöpistettä ("linjan mutkaa") voidaan siirtää painamalla FloSheet-valikon Valinta-ikonia. Valintanuolella valitaan haluttu linja ja linjassa siirrytään haluttua mutkakohtaa kuvaavan mustan pisteen päälle. Painetaan hiiren vasen näppäin pohjaan, jolloin mutkakohta voidaan siirtää haluttuun paikkaan. Kun linja on saatu kulkemaan haluttua reittiä, hiiren vasen näppäin vapautetaan.

Virtaussuuntaa osoittavan nuolen lisääminen linjaan tapahtuu napsauttamalla FloSheet-valikon *Virtaussuunta*-ikonia. Tämän jälkeen haluttua virtausta napsautetaan kerran hiiren vasemmalla näppäimellä ja siihen ilmestyy kyseinen virtauksen virtaussuunnan automaattisesti ilmoittava nuoli.

Prosessikaavion laitesymboleiden ja virtausten muokkaaminen

Laitesymboleita ja linjoja voidaan valita siirrettäviksi, poistettavaksi, pyöritettäväksi tai käännettäväksi napsauttamalla ensin FloSheet-valikon Valinta-ikonia. Tämän jälkeen voidaan joko valita yksittäisiä objekteja napsauttamalla haluttua objektia kerran, tai kerralla useampia objekteja pitämällä "Ctrl"-näppäin pohjassa samalla, kun valitaan halutut objektit. Suorakaiteen muotoisella alueella olevat objektit voidaan valita myös painamalla hiiren vasen näppäin pohjaan halutut laitteet ja virtaukset sisälleen rajaavan alueen kulmapisteessä ja siirtämällä hiirtä, jolloin tulee näkyviin suorakulmainen valinta-alue alkupisteestä hiiren osoittimeen asti. Tämän suorakulmion sisään jäävät objektit valitaan kaikki käsiteltäväksi. Objektien poisto tapahtuu "Delete"-näppäimellä, objektien pyörittämis- ja kääntämistoimintoja varten on FloSheet-valikossa omat ikonit.

4.3 Virtaukset ja informaation kulku prosessikaaviossa

FloSheetissä virtaukset ovat tietovirtoja, jotka sisältävät sellaisia tietoja kuin aineiden virtausmäärät, faasikoostumukset, lämpötilat ja aineiden ominaisuudet. Laitteet muokkaavat niihin saapuvaa virtausinformaatiota. Virtaukset kulkevat yleisimmin niin sanotusti alavirtaan prosessikaaviossa eli virtauksiin liitettyjen virtausnuolten osoittamaan suuntaan. Simuloinnissa tämä tarkoittaa sitä, että laskenta suoritetaan tuossa järjestyksessä

Kuitenkin joissain tapauksissa on tarpeen saada *tietoa siirrettyä myös ylävirtaan*. Tätä varten on Balasissa *MixDivider*-laitteita, joiden avulla voidaan laskea taaksepäin. Balasissa laitteet ovat joko 'pyytäviä laitteita' tai 'tarjoavia laitteita'. Vain *MixDiv*-laitteet (laitesymbolilistassa laitteilla nimessään usein etuliite MD) kuljettavat tietoa ylävirtaan. Nämä laitteet säätävät vain virtausta. MD-etuliite nimeämiskonventiosta eroavat *Manifold*- ja *Mix*-laitteet ovat myös *MixDiv*-laitteita. [10]

Stream divider, virtauksenjakaja, siirtää myös tietoa ylävirtaan. *Stream divider* voidaan kytkeä toiseen *Stream divider*-laitteeseen vain päälinjalla.

Virtauksen tietojen näytön muokkaus

Virtauksista saadaan haluttaessa tietoja näkyviin FloSheetin prosessikaaviossa. Oletusarvoisesti nämä tiedot näytetään virtauksen alapuolella ja tietoina näytetään virtauksen lämpötila, paine ja kokonaisvirtaus. Näytettäviä tietoja ja kyseisten tietojen esitysmuotoja voidaan muokata. Muokkaus voidaan suorittaa virtauksen asetussivustalla. Kun virtauksen ikkuna on avattu kaksoisnapsauttamalla virtausta, voidaan *Output style*-pudotusvalikosta valita jokin valmiiksi muotoilluista malleista tai luoda uusi tietojen näyttötyyli pudotusvalikosta *Output style > New Data display style*. Lisätietoja saa Balasin aputiedostosta, *BALAS Help > Advanced features > Output style* tai ottamalla mallin *Output style*-esimerkkityyleistä.

Yleisimpien virtauksen tietojen esitystyypeissä käytettävien muuttujien muotoilu:

$\$($ muuttuja,faasi)

$\#$ (komponentti, faasinumero)

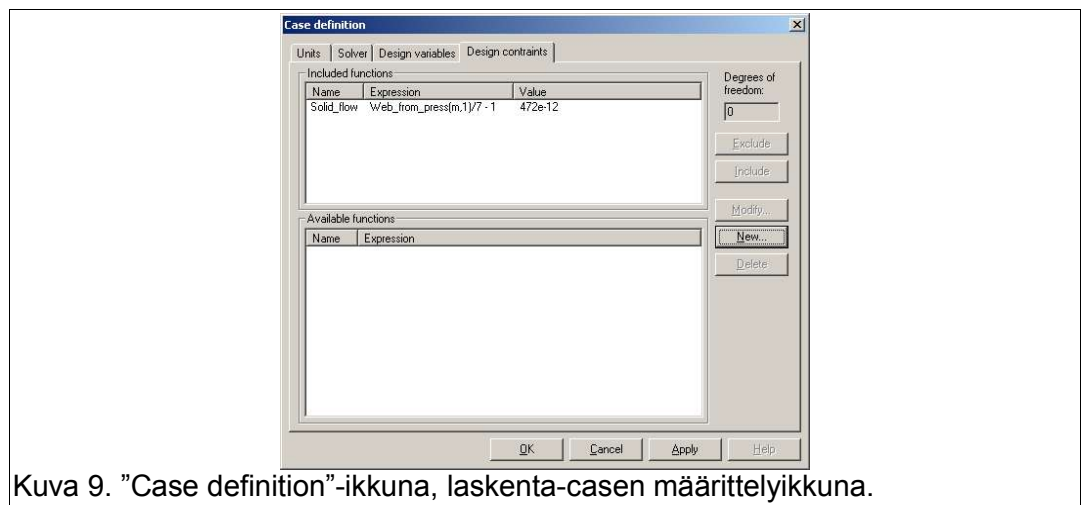
Lisäksi erillinen kirjoitettu teksti näytetään sellaisenaan tietoja esitettäessä. Tietojen esittäminen saadaan kytkettyä päälle ja pois päältä "Display data"-valinnan avulla.

4.4 Laskenta-caset ja niiden määrittely

Laskenta-case on kokonaisprosessin määrittely, jossa kerrotaan simulaatiossa käytettävät laitteet ja virtaukset sekä käytettävä matemaattinen ratkaisija. Case:ssä

määritellään kaikista prosessikaaviossa esiintyvistä laitteista mukaan simulointiin vain halutut laitteet. Case:ssä myös määritellään haluttu matemaattinen ratkaisija. Valittava ratkaisija määräytyy ratkaistavan ongelman tyyppin mukaan. FloSheet-prosessikaaviota tehtäessä muodostuu automaattisesti BaseCase, jossa ovat mukana kaikki prosessikaavion laitteet.

Uusi laskentatapaus määritellään Balas > Simulator > Select Case > New, jolloin avautuu ”Case definition”-ikkuna, jossa on kaksi välilehteä ”Units” ja ”Solver”. ”Case definition”-ikkunan (kuva 9) välilehdeltä ”Units” valitaan laskenta-caseen halutut prosessilaitteet listalta ”Remaining process units”. Kaksoisnapauttamalla siirtyy laite ”Included unit” listaan, johon tulee näkyviin laskenta-caseen tulevat laitteet. Lisäksi ”Units”-välilehdellä valitaan millaista laskentamallia käytetään. ”Case definition”-ikkunan ”Solver”-välilehdellä valitaan käytettävä ratkaisija ja määritellään ratkaisijalle ratkaisijakohtaiset parametrit. Kun asetukset on saatu valmiiksi, ne hyväksytään ”OK”-painiketta napauttamalla.



Kuva 9. ”Case definition”-ikkuna, laskenta-casen määrittelyikkuna.

Luodut laskenta-caset saadaan näkyviin valitsemalla Balas > Simulator > Select Case. ”Select case”-listasta voidaan valita haluttu laskenta-case joko kaksoisnapsauttamalla sitä tai valitsemalla laskenta-case ja napauttamalla ”Select”-painiketta. Jos laskenta-casea on tarpeen muokata, valitaan muokattava laskenta-case ”Select case”-listasta napsauttamalla sitä kerran. Tämän jälkeen avataan valittu laskenta-case muokattavaksi napauttamalla ”Modify”-painiketta.

”Modify”-painikkeen napautus avaa ”Case definition”-ikkunan, jonka sisältämät toiminnot käsiteltiin jo edellä.

Kun on luotu ja valittu haluttu laskenta-case, se voidaan simuloida Balasin ”Start simulator”-painikkeesta. Tiedot simulation etenemisestä tulevat ”Balas messages”- ja ”Simulator messages”-ruutuihin.

Laskentatilat

Laskentatilat määrittävät, minkälaiseen ongelmaan simulaatiolla haetaan ratkaisua. Balasissa laskentatiloja on viisi. Balasissa laskentatiloina ovat tasapaino-tilan simulointi (Steady-state simulation), suunnittelu/mitoitus (Design (rating)), dynaaminen simulointi (Dynamic simulation), optimointi (Optimisation) ja parametrien arviointi (Parameter estimation). Muissa kuin tasa-painotilan simuloinnissa simuloinnin pohjana on prosessin muokkaus haluttua tai todettua tilaa vastaavaksi hakemalla sopivat parametrien arvot. Laskettava ongelma ilmaistaan ”Design variables”- ja ”Design constraints”-välilehdillä. Välilehdellä ”Design variables” määritellään suunnittelumuuttujat eli käsiteltävät parametrit ja välilehdellä ”Design constraints” määritellään suunnittelurajoitukset eli yhtälöt, jotka ilmaisevat, miten prosessissa tutkittavan suureen arvo muuttuu (esim. jonkin tuotekomponentin tavoiteltu virtaus). Solver-välilehdellä valitaan ja parametroidaan haluttu ratkaisija. Seuraavaksi on esitelty Balasin laskentatiloja tarkemmin.

- *Tasapainotilan simulointi* (Steady-state simulation). Tässä laskentatilassa simuloidaan prosessit, jotka ovat täysin määriteltyjä lähtötilaltaan ja voidaan siten simuloida tasapaino-tilan simuloinnilla. Simuloidessa tämän kaltaisia prosesseja voidaan käyttää *Quasi-Newton* ja *Secant* - matemaattisia ratkaisijoita.
- *Suunnittelu* (Design (rating)). Tätä laskentatilaa käytetään, kun olemassa olevien mittausarvojen avulla halutaan muodostaa jonkin prosessilaitemallin kuvaavat parametrit. Tässä laskentatilassa tunnetut parametrien loppuarvot asetetaan muuttumattomiksi ja sama määrä parametrejä jätetään muuttuviksi. Käyttämällä

annettuja loppuarvoja haetaan laitteen avoimet parametrit niin, että prosessi on tasapainossa. Suunnittelu-caseissa käytetään *Quasi-Newton*-ratkaisijaa.

- *Dynaaminen simulointi* (Dynamic simulation). Balasilla voidaan tutkia dynaamisesti säiliöiden aikakäyttäytymistä ja putkiston aiheuttamia viiveitä. Tyypillisiä sovellutuksia ovat säiliöiden mitoitus ja prosessin vaihteluiden tutkiminen.
- *Optimointi* (Optimisation). Balasissa on ratkaisija epälineaariseen optimointiin. Tätä ratkaisijaa käytettäessä voidaan määrittää optimoitava yhtälö, suunnittelurajoitukset ja epätasapainorajoitukset sekä avoimet muuttujat (suunnitteluparametrit). Ratkaisija muuttaa avointen muuttujien arvoja ja etsii optimiarvon optimoitavalle yhtälölle. Tyypillisiä sovellutuksia ovat paperitehtaan vesitasapainon määrittäminen ja parametrien optimointi.
- *Parametrien arviointi* (Parameter estimation). Tässä laskentatilassa mittaustuloksia syötetään prosessikaavioon, jonka jälkeen avoimet muuttujat ja rajoittavat yhtälöt syötetään kuten optimointitilassakin. Ratkaisija muuttaa avoimia muuttujia ja sovittaa mittatulokset ja simuloitujen arvot toisiinsa mahdollisimman tarkasti käyttäen pienimmän neliösumman menetelmää. Tyypillinen sovellus on liuenneiden kolloidisten aineiden lähteiden etsintä paperitekniikassa.

4.5 Hierarkkisen mallin rakentaminen

Laajoja prosessikokonaisuuksia mallinnettaessa saavutetaan selkeämpi prosessikaavio, kun muodostetaan hierarkkinen malli, jossa voidaan kokonaisprosessi kuvata hierarkkisesti järjestettyinä, toisiinsa liittyvinä osaprosesseina. Osaprosessi voi olla yksikköprosessi tai jo itsessään laajempi osa prosessia. Esimerkkinä voidaan esittää kuvitteellinen tuotantolaitos. Koko tuotantolaitos olisi hierarkian korkein taso ja se esitettäisiin ulkoasultaan yksinkertaisesti sarjana alaprosesseja kuvaavia laatikoita, jotka on yhdistetty toisiin

alaprosesseihin numeroitujen liitäntäporttien kautta. Portit kuvaavat energia- ja ainevirtauksien kulkureittejä, eli putkien ja johtojen liitoskohtia eri laitteistoissa.

Hierarkkisen mallin rakentaminen aloitetaan alimman hierarkiatason mallinnuksesta. Kokonaisprosessissa esiintyvät osaprosessit kuvataan jokainen omaan prosessikaavioonsa, jotka liitetään korkeamman hierarkiatason prosessikaavioihin. Osaprosessit toisiinsa liittäviin virtauksiin tulee merkitä käytetyt liitäntäportit > FloSheet-työkalupalkki > Symbol window > Hierarcial connections > Terminal in | out. Osaprosessiin tulevat virtaukset ovat *Terminal in* -virtauksia. Osaprosessista lähtevät virtaukset ovat *Terminal out* -virtauksia. Portti lisätään virtauksen loppuun tuotevirtauksille ja alkuun syöttövirtauksille. Portille tulee antaa kuvaava nimi ja sille tulee määrätä porttinumero, joiden numerointi alkaa yhdestä. Nimeäminen tapahtuu ikkunassa, joka aukeaa porttia kaksoisnaputtamalla.

Kun tarvittavat osaprosessit on mallinnettu, luodaan yhteen kokoava päähierarkiatason prosessikaavio. Aloitetaan uuden prosessikaavion piirtäminen FloSheetissä ja tallennetaan se sopivan hakemistoon. Kun seuraavassa kappaleessa liitetään päähierarkiatason prosessikaavioon alaprosesseja, Balas tallentaa osaprosessit päähierarkiatason prosessikaavion hakemiston alihakemistoon, jolla on sama nimi kuin päähierarkiatason prosessikaaviolla.

Kun päähierarkiatason prosessikaavio on tallennettu, liitetään siihen osaprosesseja. Osaprosessia kuvaavan symbolin valinta tapahtuu seuraavan valinnan kautta: FloSheet-työkalupalkki > Symbol window > Hierarcial connections > Sub_Process_ | (big) | (medium) | (medium_2) | (small) |. Ainoa ero osaprosessien merkintään käytettävillä symboleilla on se, kuinka monta porttia ne tarjoavat tulevien ja lähtevien virtausten määrittelyyn. Sub_Process_(big) tarjoaa 84 porttia virtausten määrittelyyn, Sub_Process(medium) 30 porttia, Sub_Process_(medium_2) 40 porttia ja Sub_Process_(small) 12 porttia.

Kun uuden osaprosessin symboli on asetettu FloSheet-prosessikaavioon, avataan osaprosessin määrittelyikkuna kaksoisnaputtamalla symbolia. Avautuvassa

”Unit”-ikkunassa valitaan ”Parameters”-väli-ikkunan ”*Create Sub-process*”-painikkeella avautuvassa tiedostoikkunassa symboliin liitettävä osaprosessi kaksoisnaputtamalla tiedoston ikonia. Kun osaprosessin valinta on tehty, kysyy FloSheet nimeä osaprosessille. Annetaan kuvaava nimi. Nyt nähdään ”Unit”-ikkunan ”Terminal connections”-välilehdellä osaprosessissa olevat terminaalit ja mihin porttiin kukin niistä on kytketty. Halutessa voidaan osaprosessin prosessikaaviota katsoa painamalla ”Unit”-ikkunan ”Parameters”-välilehdellä ”*Open Drawing*”-painiketta. Kun halutut muutokset on tehty, ”Unit”-välilehti suljetaan napauttamalla ”OK”-painiketta.

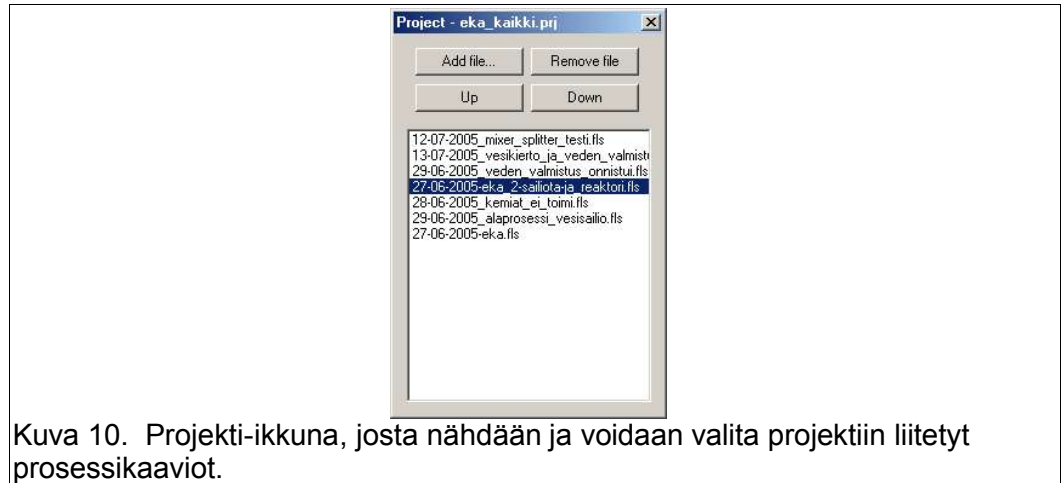
Kun kaikki tarvittavat osaprosessit on merkitty prosessikaavioon, liitetään ne toisiinsa käyttämällä portteja. Näin muodostuvat kokonaisprosessin ylikulkevat aine- ja energiavirtaukset. Portit liitetään toisiinsa käyttämällä joko ”Viiva”-työkalua tai ”AutoConnect”-työkalua. Toimenpidettä helpottaa, jos ”Snap Points”-ikoni on napsautettu pohjaan. Tällöin liitosportit ovat näkyvissä ja voidaan jo ennen piirtotyökalun käyttöä suunnitella porttien liittämistapa. Osaprosessin symbolia napauttamalla avautuvan ”Unit”-ikkunan ”Terminal connections”-välilehdeltä kannattaa tarkastaa osaprosessin virtausten porttien numerot. Myös hiiren osoittimen portin päälle siirtämällä ja hetken odottamalla saadaan ruudulle tietolaatikko, joka kertoo portin numeron, onko portti yhdistetty toisen osaprosessin porttiin sekä onko virtauksen suunta sisään vai ulos.

Kun kaikki tarvittavat virtaukset on liitetty osaprosessien porttien kautta, täytyy päähierarkiatason prosessikaavion topologiaa tarkistaa. Tämän jälkeen voidaan kaikki liitetyt osaprosessit simuloida käynnistämällä päähierarkiatason prosessikaavion simulaatio.

4.6 Projektit

Projekteissa voidaan useita prosessikaavioita tallentaa samaan projektitiedostoon, jolloin samaan projektiin kuuluvia prosessikaavioita on helpompi hallita (kuva 10). Uusi projektitiedosto luodaan valitsemalla FloSheet > File > New > Project. Näin avautuu ”*Project*”-ikkuna, jossa projektiin voidaan lisätä prosessikaaviotiedostoja

”Add file” -painikkeella, tiedostoja voidaan poistaa projektista (muttei kiintolevyiltä) ”Remove File” -painikkeella, ja prosessikaavioita voidaan siirtää ylös- tai alaspäin listalla, jossa on projektiin kuuluvat prosessikaaviot. Myös FloSheet > File on useita projektin hallintaan tarvittavia komentoja.



Kuva 10. Projekti-ikkuna, josta nähdään ja voidaan valita projektiin liitetyt prosessikaaviot.

Kun uuteen projektiin on lisätty siihen kuuluvat tiedostot, voidaan projekti tallentaa: FloSheet > File > Save Project as. Projektitiedoston on oltava samassa hakemistossa niiden prosessikaaviotiedostojen kanssa, jotka projektitiedostoon liitetään.

Yksi tapa kiertää tämä vaatimus on lisätä projektikansioon linkki haluttuihin prosessitiedostoihin. Linkin luonti tapahtuu tiedostoselaimessa. Ensin etsitään haluttu prosessitiedosto, napautetaan sitä oikealla hiiren painikkeella ja valitaan ”Create Shortcut”, jolloin muodostuu linkki, joka viittaa alkuperäiseen prosessitiedostoon. Linkkitiedosto siirretään projektikansioon. Näin voidaan käyttää prosessitiedostoa omassa kansiossaan ja silti se on liitettynä projektiin ilman, että on tarve pitää yllä kahta erillistä tiedostoa. Jos kuitenkin on tarpeen, että projektiin liitetty prosessitiedosto voidaan muokata alkuperäisestä prosessitiedostosta poikkeavaksi, voidaan tällöin prosessitiedosto kopioida suoraan projektikansioon ja prosessikaavioita voidaan käyttää ja muokata toisistaan riippumattomina. ”Project”-ikkunan listassa oleva prosessikaavio saadaan avattua FloSheetiin kaksoisnapauttamalla sitä listassa.

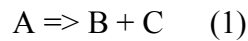
4.7 Kemiallisen reaktion määrittely FloSheetissä

Balasissa kemiallisiin reaktioihin osallistuvien aineiden määrät määritellään massapohjaisina stoikiometrisinä kertoimina niiden laitteiden Unit-ikkunoissa, joissa kyseinen reaktio tapahtuu. Reaktioiden kautta toteutetaan Balasissa paitsi reaktiot, myös aineen faasimuutokset. Massapohjaiset stoikiometriset kertoimet voidaan muodostaa käyttämällä pohjana kyseisen reaktion reaktioyhtälöä, jossa esiintyvien aineiden stoikiometriset kertoimet kerrotaan kyseisen aineen molekyyli­massalla niin, että tietyn aineen stoikiometrinen kerroin kerrotaan aina sen omalla molekyyli­massalla. Näin menetellään kaikkien aineiden kohdalla. Esimerkiksi veden muodostumisen reaktion yhtälö on: $2 \text{H}_2 + \text{O}_2 \Rightarrow 2 \text{H}_2\text{O}$. Tämän reaktion reaktiokertoimet ilmaistaan massapohjaisina muodossa $(2,016 \text{ g/mol} * 2) \text{H}_2 + (16,00 \text{ g/mol} * 2) \text{O}_2 \Rightarrow (18,016 \text{ g/mol} * 2) \text{H}_2\text{O}$ eli lopputulokseksi saadaan $4,032 \text{ H}_2 + 32,00, \text{ O}_2 \Rightarrow 36,032 \text{ H}_2\text{O}$. Laitteikkunassa, johon reaktio merkitään, on huomioitava, että lähtöaineiden massapohjainen stoikiometrinen kerroin merkitään negatiivisena (tässä siis H_2 kerroin $-4,032$ ja O_2 kerroin $-32,00$), koska ne kulu­vat reaktiossa. Muodostuvien reaktiotuotteiden kertoimet ovat positiivisia (tässä siis H_2O kerroin $36,032$).

Yleisimmin reaktiot tapahtuvat reaktoreissa, mutta niitä voidaan määrittellä myös tietyissä muissa laitteissa. Yhteen reaktorilaitteeseen voidaan määrittellä sisältyväksi kymmenen reaktiota, jotka lasketaan sarjassa ensimmäisestä reaktiosta alkaen, joten reaktioiden määrittelyn järjestys on merkityksellinen. Kun ensimmäinen reaktio on tapahtunut, on pääkomponenttia jäljellä alkuperäisestä määrästä vain reaktiosta ylitse jäänyt määrä. Esimerkiksi jos pääkomponentin konversiokerroin on 78 %, on sitä reaktion jälkeen jäljellä 22 % alkuperäisestä määrästä ja vain tämä 22 % otetaan huomioon seuraavan reaktion laskentaan siirryttäessä. Tämän selventämiseksi alla on esitetty kaksi esimerkkireaktiota ja niiden mahdolliset merkintätavat.

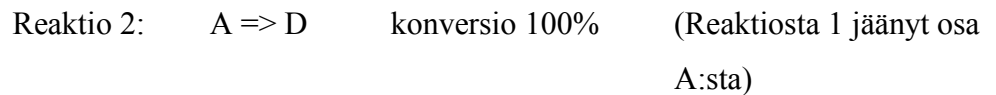
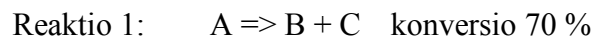
Esimerkki I

Laitteessa esiintyy kaksi samanaikaista reaktiota, joista A:sta kuluu 70 % reaktiossa 1 ja 30 % reaktiossa 2.

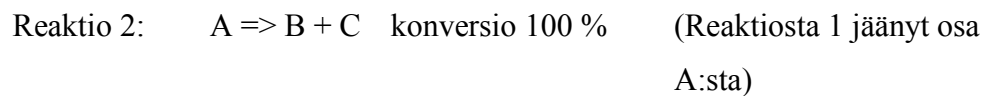


Tässä tapauksessa reaktiot voidaan määritellä kahdella tavalla:

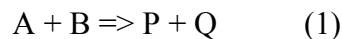
Tapa 1:



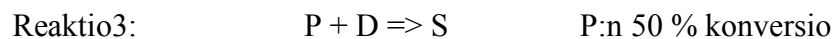
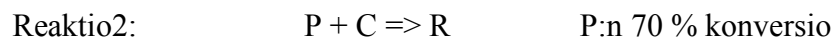
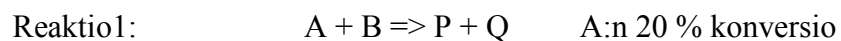
Tapa 2:



Esimerkki II



20 % A:sta reagoi reaktiossa 1. Välituotteesta P 70 % reagoi reaktiossa 2 ja 15 % reaktiossa 3, loput 15 % P:stä jäävät reagoimatta. Reaktiot voidaan määritellä seuraavasti:



Ainetta P reagoimatta reaktion 2 jälkeen: $100 \% - 70 \% = 30 \%$, josta 15 % on puolet.

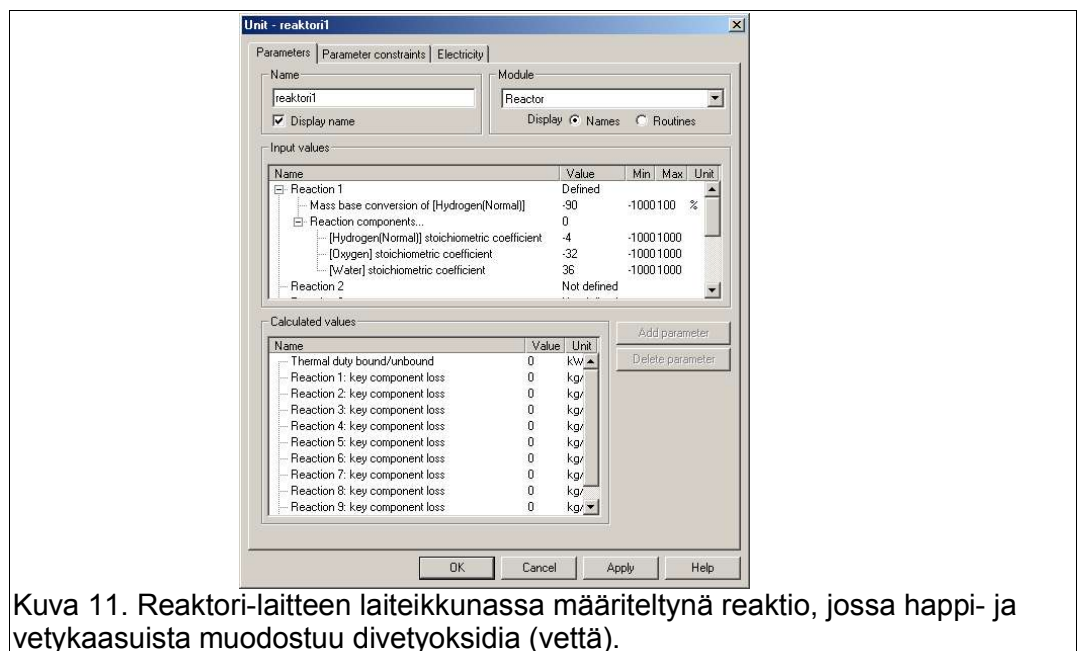
Seuraavassa kuvaillaan reaktion määrittäminen reaktorilaitteeseen. Aloitetaan valitsemalla jokin Reactors-symbolikirjaston reaktoreista, jossa reaktio määritellään tapahtuvaksi. Valittua laitetta kaksoisnapsauttamalla prosessikaaviossa avautuu laiteikkuna, jossa napsautetaan ”Not defined”-tekstiä ja muutetaan avautuvasta valikosta valinnaksi ”Defined”. Näin reaktion laskenta on aktivoitu.

Oletusarvoisesti reaktioita ei oleteta tapahtuvan. Jos on tarpeen aktivoida samassa laitteessa tapahtuviksi useampia reaktioita, voidaan uusia reaktioita samalla

menetelmällä aktivoida tapahtuviksi kymmeneen perättäiseen, sarjassa tapahtuvaan reaktioon asti.

Kun reaktiot on aktivoitu, voidaan reaktioiden kulku ja niihin osallistuvat aineet määrittellä (kuva 11). Reaktioista määritellään pääkomponentin konversioaste sekä muut reaktioon osallistuvat komponentit ja niiden stokiometriset kertoimet.

Lähtöaineiden stokiometrinen kerroin merkitään negatiivisena, koska ne kuluvat reaktiossa, kun taas tuotteiden kertoimet ovat positiivisia.



Kuva 11. Reaktori-laitteen laiteikkunassa määriteltynä reaktio, jossa happi- ja vetykaasuista muodostuu divetyksidia (vettä).

Tässä kohdin tulee vastaan yksi Balasin heikkouksista, sillä Balas ei osaa arvioida, onko määritelty reaktio kemiallisesti mahdollinen, eikä siten myöskään osaa arvioida, ovatko käyttäjän syöttämät reaktion stokiometriset kertoimet järkeviä. Ominaisuus mahdollistaa erilaisten ajatusleikkien kokeilemisen, mutta simulaation laatijan on itse tunnettava reaktiodynamiikka, reaktion alkamiseen tarvittavat reaktio-olosuhteet ja syntyvät reaktiotuotteet. Toiselta näkökannalta katsottuna, kuten Balasin dokumentaatiossakin tuodaan esiin, on onnistuneen simulaatioympäristön rakentamiseksi tunnettava mallinnettavien prosessien ominaisuudet laajasti sisältäen näissä prosessissa esiintyvät reaktiot ja reaktiomuutosten vaikutukset näihin reaktioihin.

Reagoiville lähtöaineille ja tuotteille määriteltävien stoikiometristen kertoimien on oltava yhteenlaskettuna tasan nolla. Balas tarkistaa kertoimet ja jos niiden yhteenlaskettu summa eroaa nolasta, tulostuu ”Simulator messages”-ikkunaan virheilmoitus. Virhetilanteessa Balas muokkaa määritettyjä kertoimia niin, että niiden mittasuhteet pysyvät samoina, mutta yhteenlaskettu tulos on nolla.

Lisää tietoa Balasin käytöstä kemiallisen prosessin simulointiin löytyy liitteestä 7: ”Process simulation – a tool for studying the impacts of varying process conditions and chemical dosing on wet end chemistry”. Siinä on käsitelty erityisesti paperikoneen märän pään kemiallisia muutoksia, kun kemikaalien annostusta ja prosessimuuttujia muutetaan.

5. MALLINETUN PROSESSIN SIMULAATIOAJO

Prosessin simulaatioajon valmistelut

Kun prosessikaavioon on saatu merkittyä kaikki tarvittavat laitesymbolit ja putkilinjat, voidaan prosessin simulaatioajon valmistelut aloittaa. Ennen varsinaista simulaation suorittamista on suoritettava seuraavat valmistelut.

1. Tarkastetaan topologia.
2. Nimetään syöttövirtaukset.
3. Luodaan virtausluokat.
4. Alustetaan syöte- ja iteraatiovirtaukset.
5. Annetaan laitteille parametrit.

Balasisa topologia tarkistetaan ennen prosessin simulaatiota. Tässä vaiheessa tarkistetaan, että kaikki liitokset putkilinjojen ja laitteiden välillä on muodostettu oikein. Tarkastuksessa varmistetaan, että kaikilla virtauksilla on ainakin yksi liitos johonkin laitteeseen. Samalla varmistetaan, että laitteissa, joiden sisään tuleviin liitosportteihin on liitetty virtauksia, on myös lähtövirtauksia. Balasin käyttöliittymästä löytyvästä ”Check topology”-painikkeella käynnistetään topologian tarkastus. Mahdolliset topologiasta löytyneet virheet tulostuvat ”Balas messages”-ikkunaan. Ilmenneet virheet korjataan prosessikaaviossa ja topologia

tarkistetaan uudelleen. Jos topologiavirheitä löydetään, ne ilmoitetaan samassa ikkunassa. Kaikki topologiavirheet on korjattava ennen kuin simulointi voidaan aloittaa. Topologiavirheet saadaan esiin napauttamalla ”Balas messages”-ikkunassa olevan virheilmoituksen edessä olevaa “+”-merkkiä. Avautuvan virhelistan eri kohtia napauttamalla nähdään, missä kyseisen virheen aiheuttaneet virtaukset ja laitteet ovat. Kun Balas hyväksyy prosessikaavion topologian, näkyy ”Balas messages”-ikkunassa ilmoitus ”No topology errors found” ja voidaan jatkaa seuraavaan vaiheeseen.

Seuravana vaiheena nimetään *syöttövirtaukset*. Syöttövirtauksia nimetessä kannattaa käyttää mahdollisimman kuvaavia, mutta lyhyitä nimiä. Kuvaavat nimet auttavat oikean virtausluokan määrittämistä virtaukselle. Lisäksi tämä helpottaa vahingossa tapahtuneiden yhdistämättä jääneiden liitosten löytämistä, joita FloSheetiä käyttäessä saattaa syntyä. Syöttövirtausten nimeäminen aloitetaan napsauttamalla ”Valinta”-painiketta FloSheet-työkalurivistä. Tämän jälkeen valitaan haluttu syöttövirtaus prosessikaaviosta napsauttamalla sitä kahdesta hiiren oikealla näppäimellä, jolloin avautuu virtauksen ikkuna. Syöttövirtaukselle sopiva nimi syötetään ”Name”-kenttään. Jos nimen halutaan näkyvän prosessikaaviossa, merkitään ”Name”-kentän alla oleva ruutu. Kun on syötetty oikeat tiedot, voidaan hyväksyä muutokset napsauttamalla ”OK”-painiketta. Samat toimenpiteet toistetaan kaikille syöttövirtauksille.

Virtausluokkien määrittäminen on seuraava alustustoimenpide. Virtausluokka on tietorakenne, joka sisältää kolmenlaista tietoa: käyttäjän valitsemat kemialliset komponentit, fysikaalisten ominaisuuksien arviointiin käytettävät laskentamenetelmät sekä määrittelyn nimeltä ”*Output style*”, joka määrittää, mitä yksiköjä käytetään, kun näytetään tietoja virtauksesta (lämpötila, kokonaisvirtaus, paine) virtauksen ikkunassa. Yleensä on tarpeen määrittää vain virtausluokassa esiintyvät kemikaalit, muut arvot voidaan jättää oletusarvoihinsa. Virtausluokan määrittäminen aloitetaan napsauttamalla ”*Initialization*”-painiketta Balas-työkalurivissä. Alustusikkuna avautuu. Uuden virtausluokan luominen aloitetaan painamalla ”*New Class*”-painiketta ikkunan oikeassa kulmassa, jolloin avautuu ”*Stream Class Definition*”-ikkuna. Jälleen suositellaan käyttämään kuvaavia nimiä.

Balasisa kaikki käytettävissä olevat *kemikaalit* on luokiteltu viiteen aineluokkaan, jotka ovat "Reid", "Pulp", "Fuel", "Electrolyte" ja "Obsolete". "Reid" on yleiskemiallinen tietokanta, josta löytyvät tavallisimmat kemikaalit. "Pulp"-tietokannassa on paperinvalmistukseen liittyviä komponentteja, joilla kuvataan erilaisia puukuituja ja täyteaineita. "Fuel" koostuu polttoaineista. "Electrolyte" sisältää epäorgaanisia kiinteitä ja nestemäisiä komponentteja. "Obsolete" on vanhentunut tietokanta, jonka muut tietokannat ovat korvanneet. "Obsolete" on mukana Balasin uusissa versioissa vain aikaisempien versioiden yhteensopivuuden takaamiseksi ja sen käyttämistä ei suositella.

Halutun komponentin sisältävä tietokanta valitaan alasetoalistasta, jolloin lista tietokantaan sisältyvien *kemikaalien lista* kohdassa "*Components in Database*" vaihtuu tietokannan mukaan. Tiettyä kemikaalia etsittäessä voidaan käyttää "Filter"-suodatinta "Components in Database"-syötteen alla syöttämällä "Filter"-syötteeseen halutun kemikaalin nimi tai osa siitä, jolloin vain tämän syötetyn merkkijonon sisältävät aineet näkyvät tietokannan listassa.

Kun virtausluokkaan on syötetty kaikki siinä esiintyvät kemikaalit, voidaan "Stream Class Definition"-ikkuna sulkea "OK"-painikkeesta. Tarvittavat virtausluokat syötetään toistamalla edellä mainittuja vaiheita.

Syöttö- ja iteraatiovirtausten alustus aloitetaan Balas-työkalupalkin "Initalization"-painiketta painamalla. Näin varmistetaan, että alustusikkuna on auki. Syöttövirtausten alustus aloitetaan varmistamalla, että alustusikkunan "Feed stream"-välilehti on valittuna. Tämän jälkeen liitetään sopiva virtausluokka syöttövirtaukseen napsauttamalla kerran virtauksen nimeä "Streams"-listassa ja sen jälkeen kahdesti napsauttamalla virtausluokan nimeä "Stream classes"-listassa. Sitten syöttövirtauksen nimeä napsauttamalla avataan virtausvalikkoikkuna, jossa määritetään alkuarvot lämpötilalle, paineelle, kokonaisvirtaukselle ja komponenttien osuudet. Edellä kuvatut vaiheet toistetaan kaikille syöttövirtauksille.

Iteraatiovirtaukset alustetaan valitsemalla "*Iteration*"-ikkuna, jonka jälkeen napsautetaan kahdesti virtauksen nimeä. Tämä avaa virtausikkunan, jossa voidaan

antaa "koulutettuun arvaukseen" perustuvat alkuarvot lämpötilalle, paineelle, kokonaisvirtaukselle ja komponenttien osuuksille. Mitä lähemmäs arvatut arvot osuivat oikeita arvoja, sitä nopeampi on iterointiprosessi. Kaikille iterointivirtauksille toistetaan samat vaiheet. Kun kaikki iterointivirtaukset on alustettu, voidaan ikkuna sulkea napsauttamalla "OK"-painiketta.

Laitteille annettavat oletusparametrit on hyvä tarkistaa ennen simulaation aloittamista, jotta syöttöparametrit ovat oikein. FloSheet-työkalurivistön "Valinta"-ikonin napsautuksen jälkeen napsautetaan kahdesti haluttua laitetta. Laitteen ikkuna avautuu. Joihinkin symboleihin on liitetty useampia laskentamoduuleita. Haluttu laskentamoduuli voidaan valita alasetusvalikosta "Module". On huomattava, että jokaisella laskentamoduulilla on omat parametrinsa. Halutun laskentamoduulin parametrit asetetaan prosessia kuvaaviksi.

Simulaation käynnistys

Kun alustustoimenpiteet on suoritettu, simulaatio käynnistetään Balas-työkalurivin "Play"-painikkeesta. Simulaatio voidaan pysäyttää milloin vain Balas-työkalurivin "Stop"-painikkeesta. Simulaation edistymistä koskevat viestit tulevat näkyviin "Simulator messages"-ikkunaan Balasin pääikkunassa. Edistymistä kuvaavat viestit koostuvat sen hetkisen iteroinnin järjestysluvusta ja iteraation jäännösluvusta. Iteraation jäännösluvun pitää lähestyä nollaa huomattavalla nopeudella. Jos jäännösluku kuitenkin kasvaa tai pienenee hitaasti, on simulaatio keskeytettävä ja iterointivirtauksiin on syötettävä paremmat arvaukset tai vaihdettava ratkaisijan asetuksia. Myös simulaation pysäyttäminen ja uudelleenkäynnistäminen saman tien ilman muutoksia saattaa viedä simulaation loppuun. Kaikki simulaation aikana havaitut ongelmat ja virheet näkyvät "Simulator messages"-ikkunassa.

Tulosten tarkastelu

Onnistuneen simulaatioajon jälkeen voidaan eri virtausten ja laitteiden tilaa tarkastella löydetyssä tasapainotilassa napsauttamalla haluttua laitetta tai virtausta kahdesti. Tulokset voidaan myös siirtää Microsoftin Excel- taulukkolaskentaohjelmaan, jossa voidaan myös muokata tuloksia. Tätä varten on

tarpeen luoda linkki Balasin ja Excelin välille. Tämän linkin luominen käsitellään kappaleessa 6.

Matemaattiset ratkaisijat Balasissa, toiminta ja asetukset

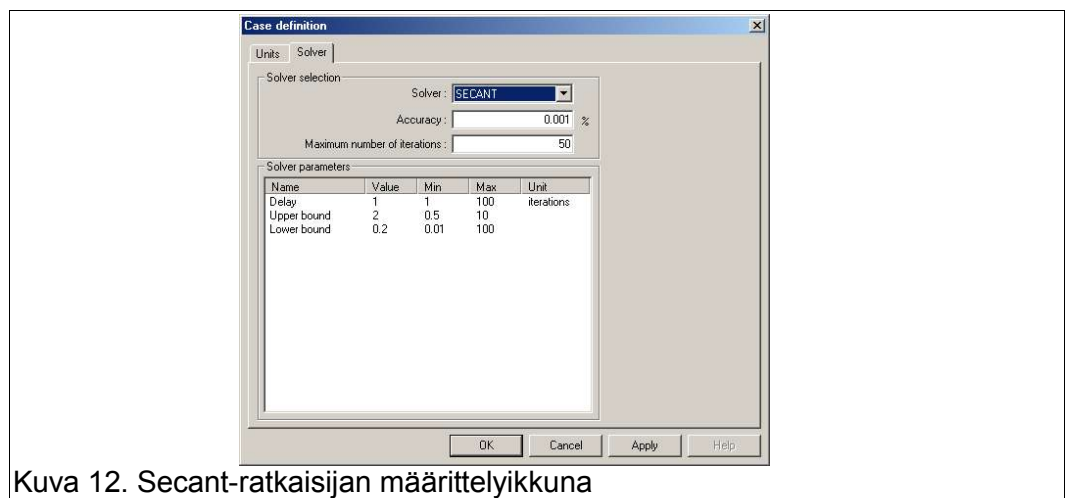
Matemaattinen ratkaisija valitaan ”Case definition”-ikkunan ”Solver”-välilehdellä. Valittavana on neljä matemaattista ratkaisijaa, joista Quasi-Newton ja Secant ovat simulointia varten. Quasi-Newton ratkaisijaa käytetään myös suunnittelussa. SQP-ratkaisija on käytössä optimoinnissa ja kerättyjen mittatietojen sovittamisessa. Dynamic-ratkaisijaa käytetään dynaamisten prosessien tutkimisessa. Matemaattisista ratkaisijoista ja niiden ominaisuuksista voidaan saada lisää tietoa liitteestä 8: ”Solvers”.

Prosessikaavio, jossa ei ole kiertovirtauksia ja jossa on lähtövirtauksille annettu kaikki tarvittavat arvot, voidaan simuloida suoraan, ilman vaativia laskutoimituksia. Kehittyneempiä matemaattisia ratkaisijoita on käytettävä, jos simulaatio sisältää kiertovirtauksia tai sitä käytetään suunnittelutyökaluna. Tällöin käyttäjä antaa laskenta-casen simuloinnin laskennalle suunnittelurajoituksia, eli syöttää tuotevirtauksille tai muille prosessiparametreille tavoitellut arvot. Nämä arvot ovat pohjana, kun lasketaan tavoitteiden saavuttamiseksi vaadittavia lähtövirtausten arvoja.

Matemaattiset ratkaisijat parametroidaan kukin kyseiselle ratkaisijalle ominaisella tavalla. Kaikille ratkaisijoille yhteisiä muuttujia ovat prosentteina määriteltävä tarkkuus (Accuracy) ja iteraatiolaskentavaiheiden määrä (Maximum number of iterations). Kun simulaatio on käynnistetty, sen etenemistä kuvaa ”Balas messages”-ikkunaan tulostuva residuaali. Mallin simulointi ei etene, jos residuaali pysyy samana tai kasvaa. Tällöin kannattaa simulaatio pysäyttää ja aloittaa uudelleen muutaman kerran. Jos tämäkään ei auta muutetaan ratkaisijaksi Secant, jolle annetaan parametriksi Delay-arvo 100. Yleisissä tapauksissa käytetyistä ratkaisijoista Quasi-Newton on nopeampi, kun taas Secant on hitaampi simulaation laskennassa.

Secant

Secant-ratkaisijassa prosessin laskenta edistyy *asteittainen* ja jokainen prosessilaitte lasketaan erikseen. Secant-ratkaisija perustuu ratkaisumalliin, jonka lähtökohtana ovat sellaiset yksikkölaitteet, joihin saapuvien virtausten ominaisuudet tunnetaan. Näiden perusteella simulaattori laskee virtauksille laitteissa tapahtuvat muutokset kyseistä yksikkölaitetta kuvaavilla yhtälöillä, jolloin saadaan ominaisuuksiltaan tunnettuja lähtövirtauksia laitteelle. Näin voidaan laskentaa jatkaa eteenpäin, kunnes kaikki laitteet ja virtaukset on käsitelty.



Kuva 12. Secant-ratkaisijan määrittelyikkuna

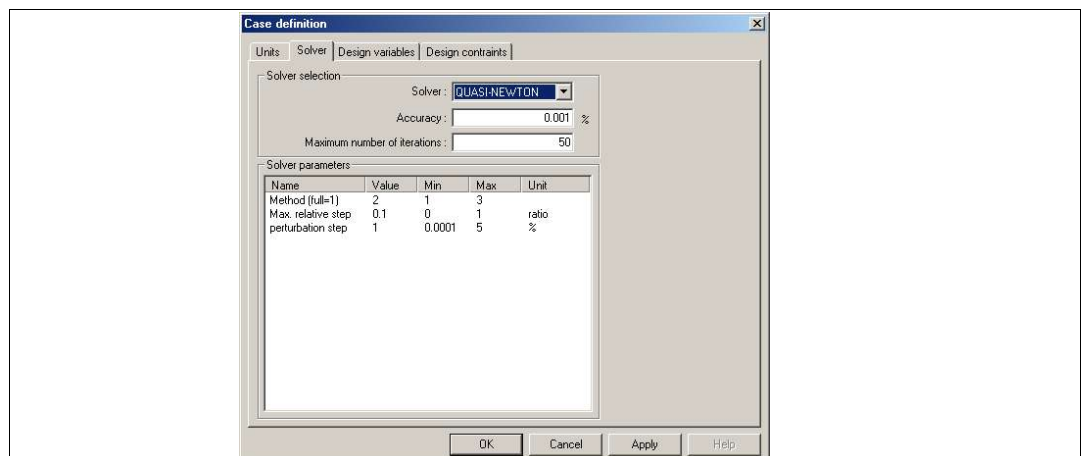
Mallissa tuntemattomien virtausten arviointiin käytetään iterointia. Kun jossain yksikkölaitteissa on joitain tuntemattomia tulovirtauksia, arvaa käyttäjä noille tulovirtauksille jonkin mahdollisen arvon ja laskelmia jatketaan. Kun koko prosessi on laskettu, verrataan laskelmista saatuja tuloksia annettuihin arvauksiin. Jos ne poikkeavat toisistaan, eron suunnasta ja suuruudesta päätellään uudet arvot arvauksille ja laskelmat uusitaan. Jatketaan uusilla arvauksilla, kunnes arvausten ja laskettujen arvojen välillä ei ole enää merkittävää eroa, tällöin ongelma on ratkaistu. Secant-ratkaisijaa käytettäessä on ratkaisijan toiminta määriteltävä kolmella muuttujalla. Muuttujat ovat *Delay*, *Lower bound* ja *Upper bound* (kuva 12).

Quasi-Newton

Quasi-Newton-ratkaisijassa prosessiongelmat ratkaistaan massataseita kuvaavien yhtälöiden avulla. Quasi-Newton-ratkaisija perustuu ajatteluun, jossa tunnettujen

virtausten arvojen perusteella muodostettujen yhtälöiden avulla ratkaistaan kaikki virtaukset ja niiden koostumukset kerralla. Tätä yhtälöpainotteista lähestymistapaa on käytetty Balasissa toisessa Balasin matemaattisista perusratkaisijoista, Quasi-Newtonissa. Matemaattisesti Quasi-Newton perustuu iteroitaviin jakobiaanimatriiseihin. Tästä seuraa, että vastaukseksi simuloitaviin prosessiongelmiin saadaan vain paikallinen ääriarvo. Tällöin simulaatio, jolle annetut alkuarvot jäävät kauaksi todellisesta arvosta, ei etene ratkaisuun asti.

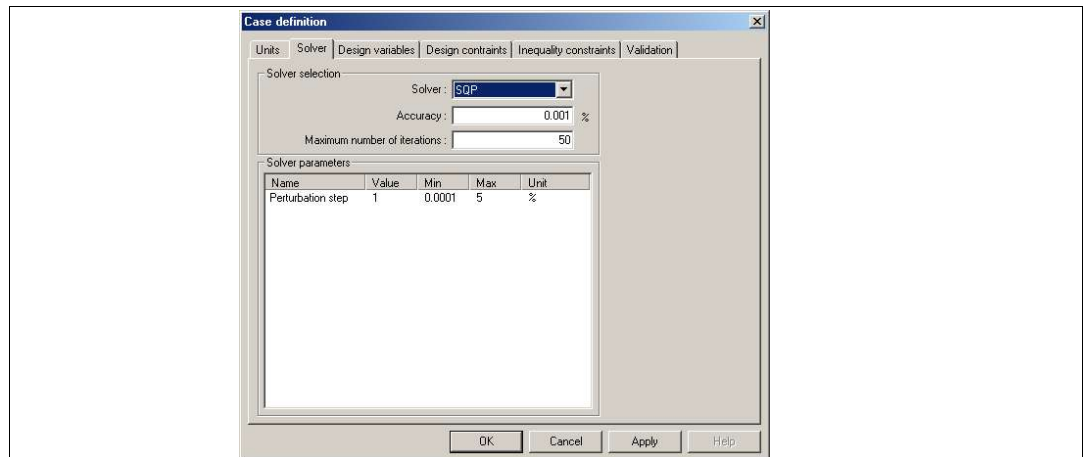
Quasi-Newtonille on kolme vain sitä koskevaa määrittelyparametriä (kuva 13). ”*Method*”-muuttujalla valitaan Quasi-Newtonissa käytettävä jakobiaanin arviointimenetelmä. Muuttujan arvot 1-3 merkitsevät Quasi-Newton ratkaisijan eri arviointimenetelmiä. Menetelmässä 1 käytetään jakobiaanimatriisin alkuarvojen arviointiin äärellistä erotusta, kun taas menetelmässä 2 käytetään pohjana yhtäläisyysmatriisia. Menetelmä 3 perustuu, kuten menetelmä 1, numeeriseen laskentaan ja on nopeampi kuin menetelmä 1, mutta se on vasta koeasteella. Yleisesti menetelmä 2 on suositeltava, mutta Design-caseissa on käytettävä menetelmää 1. ”*Max. Relative step*”-muuttujassa määritellään suurin suhteellinen etenemisaskel suhteessa koko simulaation aikana läpikäytävään arvojoukkoon. ”*Perturbation step*”-muuttujalla määritetään häiriövaiheen koko, kun lasketaan osaderivoiteja prosentiosuuksina käsiteltävästä muuttujasta.



Kuva 13. Quasi-Newton-ratkaisijan määrittelyikkuna.

SQP

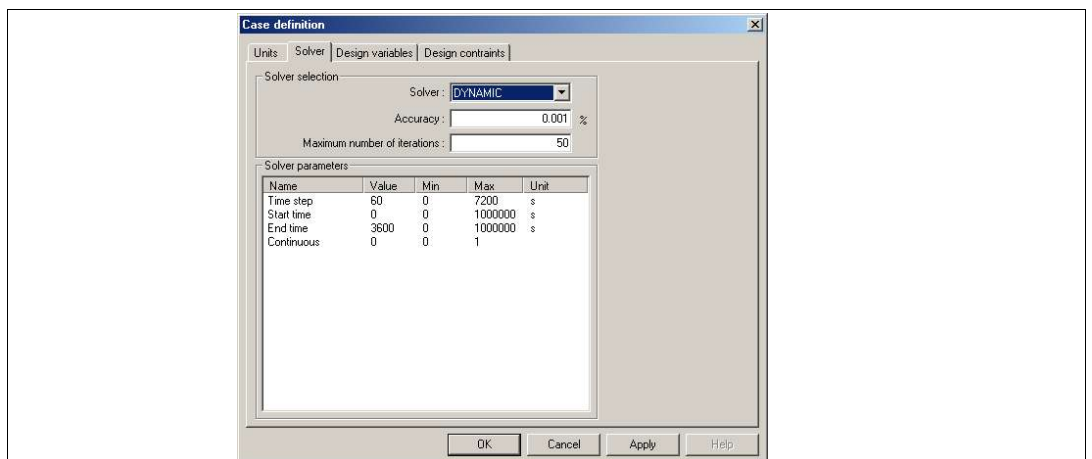
SQP-ratkaisijaa käytetään *Optimising* (optimointi) ja *Validation case*-tyypeissä. SQP-ratkaisijan määrittelyssä on parametrinä *Perturbation step*, häiriövaihe, jolle määritellään Value (arvo), Min (pienin arvo) ja Max (suurin arvo). Käytettävänä yksikkönä (Unit) on prosentti (kuva 14).



Kuva 14. SQP-ratkaisijan määrittelyikkuna.

Dynamic

Dynaamisen simuloinnin laskennassa käytetään Dynamic-ratkaisijaa. Ratkaisijan etenemisen määrittelevät muuttujat ovat: Time step (aika, jonka eri laskentavaiheet etenevät edellisestä, arvot 0-7200 sekuntia), Start time (simuloinnin määritelty alkuaika, jos muu kuin 0-piste), End time (simuloinnin määritelty loppuaika) sekä Continuous (onko prosessi jatkuva, mahdolliset arvot 1=on ja ja 0=ei) (kuva 15).



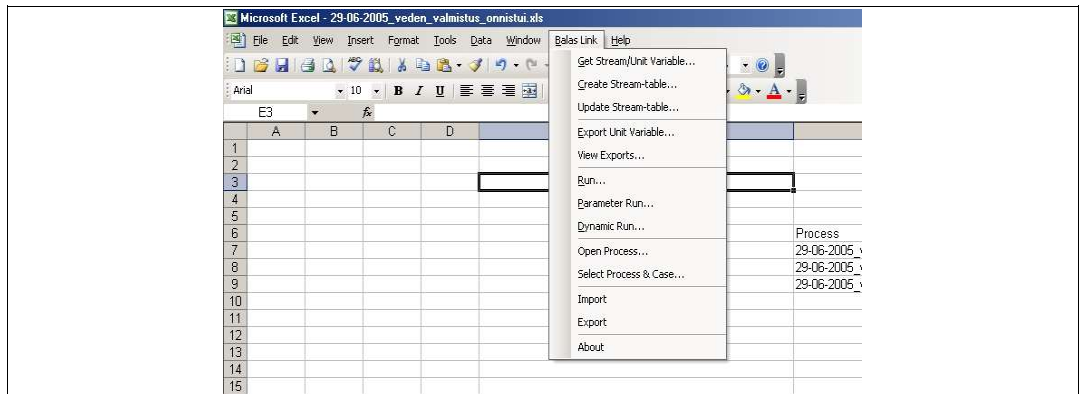
Kuva 15. Dynamic-ratkaisijan määrittelyikkuna.

6 BALASIN EXCEL-LINKKI

Balasin ja Excel-taulukkolaskentaohjelman välille on mahdollista luoda linkki, jonka kautta voidaan siirtää tietoja ohjelmien välillä. Kun luodaan linkki Excelin ja Balasin välille, voidaan luotuja simulaatioita ajaa Excelin kautta. Balasista voidaan myös tuoda arvoja Exceliin ja Excelistä viedä parametrejä Balasiin. Kun Excelissä avataan Balas-prosessitiedosto, niin samalla käynnistyy myös Balas-ohjelma, jos se ei ole jo käynnissä. Mutta tällöin Balas avautuu ilman FloSheet tai Visio-prosessikaavio-ohjelmaa. Haluttu prosessikaavionsuunnitteluohjelma voidaan käynnistää haluttaessa itse. Tällöin on tärkeää avata sama prosessikaavio kuin Excelissä.

Linkki ohjelmien välillä on Excelissä toteutettu *Add-In*-toimintona. Linkin luomiseksi käynnistetään Excel. Tämän jälkeen valitaan Excelin valikoista Excel > Tools > Add-Ins, jolloin avautuu "Add-Ins"-valikkoikkuna. Tässä valikkoikkunassa painetaan "Browse"-painiketta ja haetaan Balasin asennushakemiston alta löytyvästä excel-alihakemistosta tiedosto "balas3.xla". Käytettäessä tämän ohjeen asennushakemistoja on Add-In polussa D:\Program_Files\Balas30\excel\balas3.xla. Jos Balas on asennettu vakioasennushakemistoonsa, on tiedostopolku C:\Program_Files\Balas30\excel\balas3.xla.

Varmistetaan, että Balas3 on valittuna Excelin "Add-Ins"-valikkoikkunassa, eli sen edessä olevassa ruudussa on rasti. Jos näin ei ole, lisätään rasti napauttamalla hiirellä. Tämän jälkeen hyväksytään muutokset painamalla "OK"-painiketta.



Kuva 16. Balasin ja Excelin välille luodun linkin ansiosta on Excelissä näkyvillä "Balas Link"-valikko.

Kun linkki on luotu, Excelin työkalupalkkiin ilmestyy "Window" ja "Help"-valikkojen väliin "Balas Link"-valikko (kuva 16). FloSheetillä luodun ja tallennetun prosessikaavion käsittely aloitetaan valitsemalla "Balas Link"-valikosta "Open process" ja valitsemalla haluttu prosessikaaviotiedosto. Balas-prosessitiedostot ovat päätteeltään ".pro"-loppuisia. Linkin ollessa käytössä avattaessa Balas-prosessitiedosto avautuu se myös Exceliin.

Linkkiä käytettäessä ei Balasiin jaettava tietoa saa poistaa Excelin työkirjasta suoraan Del-näppäimellä. Ensin valitaan Excelistä BalasLink > View exports, josta poistetaan ensin parametri "Remove parameter". Sitten voidaan tyhjentää ruutu Excelin keinoilla, esimerkiksi Del-painikkeella.

Kun on luotu Balas-linkki Exceliin, avataan tyhjä prosessikaaviopohja Flosheetiin. Tämän jälkeen käynnistetään Excel. Avataan haluttu prosessi Flosheetillä. Tällä käynnistysjärjestyksellä taataan tietojen siirtyminen oikein.

Seuraavaksi on esitetty Exceliin liitetyn Balas Add-In-valikon sisältö, komennot ja niiden toiminnot.

Valikon komento	Komennon toiminnon kuvaus
Get Stream/Unit Variable	Hakee tietyn virtauksen tai laitteen yhden ominaisuuden FloSheetistä Excelin soluun
Create Stream-table	Luo virtaustaulukon, johon voidaan käytettävästä FloSheet-prosessitaulukosta valita halutut virtaukset ja niistä halutut tiedot omiin soluihinsa
Update Stream-table	Valittaessa jokin solu aikaisemmin luodusta virtaustaulukosta, voidaan koko kyseinen virtaustaulukko päivittää FloSheetissä voimassa oleviin arvoihin "Update Stream-table"-komennolla
Export Unit Variable	Asettaa FloSheet-prosessikaavioon vietävien laitteiden parametrien arvot sisältävät solut. Ensin valitaan solu johon kyseisen parametrin arvo tullaan syöttämään. Tämän jälkeen "Export Unit Variable"-ikkunassa valitaan ensin "Process & Case"-kohdasta valittu prosessi ja laskentatapaus, toiseksi "Units"-kohdasta haluttu laite ja kolmanneksi "Parametres"-kohdasta laitteen parametri, jota solusta halutaan säätää. Arvot eivät automaattisesti päivyty Excelin soluista FloSheetiin, vaan halutut solut täytyy valita ja siirtää FloSheetiin erikseen "Balas Link"- valikon "Export"-komennolla.
View Exports	Tällä komennolla saadaan esiin ikkuna, johon on kerätty kaikki FloSheetiin vietävät laitteiden parametrit
Run	Ajaa simulaation
Parameter Run	Määrätyin askelin etenevän simulaation käynnistys
Dynamic Run	Dynaamisen simuloinnin käynnistys
Open Process	Avaa prosessikaavion
Select Process & Case	Valitsee prosessin ja laskenta-casen
Import	Tuo arvoja Balasista
Export	Vie arvoja Balasiin
About	Tietoja Balasin Excel-integraatiosta

7 BALAS-OHJELMISTOON LIITTYEN KEHITTEILLÄ

Balas on jatkuvasti kehittyvä ohjelma. Nykyään kehityksen alla on seuraavat ominaisuudet:

- Balasiin lisätään ChemApp-monifaasikemian laskenta.

- Balasiin lisätään esimerkkiprosessina sellunkeitto.
- Interaktiivinen monen kohteen prosessinoptimointiohjelma on kehitteillä Jyväskylän yliopiston Nimbus-ohjelman pohjalta. Optimoinnissa käytetään Pareto-optimaalisuusperiaatetta.
- Jo mainittu Visio-ohjelma tulee käytettäväksi ainoana prosessikaavioiden laatimisohjelmanä.
- Suunnitellaan avoin käyttöliittymä käyttäjän määrittelemille käyttömoduuleille.

8 BALAS-OHJELMISTON SOVELTUVUUS OPETUSOHJELMISTOKSI TAMPEREEN AMMATTIKORKEAKOULULLA

Balas on simulointiohjelmana hyvin verrannollinen muihin tässä tutkintotyössä esiteltyihin simulointiohjelmiin. Valmiiden työkalujen osalta Balas on kuitenkin painottunut paperinvalmistuksessa vaadittaviin työkaluihin, kun taas kemiantekniikan osastolla ovat tarpeellisia muiden ohjelmistojen sisältämät paremmat peruskemian laskentatyökalut. Niinpä Balasin opetus TAMKissa hyödyttäisikin paremmin paperi-insinöörien koulutusta. Kemiantekniikan opetukseen ei Balas tuo jo käytössä olevaan ChemCAD-ohjelmistoon mitään lisää. Jos tarkoitus on vain opettaa prosessisimulaation toteutusta nykyaikaisilla simulaatio-ohjelmilla, on nykytilanne siihen riittävä.

Ainoastaan yhden ohjelman valinta opetukseen on mielestäni perustelua simulaatio-ohjelmiin käytettävien opetustuntien vähyydestä johtuen. Tällöin kannattaa mielestäni harkita ChemCADin korvaamista Balasilla, koska tällä toimenpiteellä voidaan saavuttaa taloudellista säästöä lisenssin hinnassa. Toisaalta on varauduttava siihen että Balasin käyttö on monimutkaisempaa. Käytössä Balasin laskennalliset ominaisuudet ovat hyvin verrannolliset ja kaikki Tampereen ammattikorkeakoulussa opetuksen vaatimat toiminnot ja laitteet löytyvät myös Balasista lukuun ottamatta tislaukolonnia.

Jos kuitenkin halutaan antaa mahdollisimman laaja kuva yleisesti käytetyistä simulointiohjelmissa, olisi opetuksen ja talouden kannalta tarpeen neuvotella

erittäin edulliset oppilaitoslisenssit ainakin kaikista tämän työn alussa esitellyistä prosessisimulointiohjelmista, jotta niitä kaikkia voitaisiin käyttää. Tällöin kuitenkin muodostuu erittäin paljon ohjelmien välistä päällekkäistä toiminnallisuutta.

LÄHTEET

Sähköiset lähteet

1. aspenOne-ohjelmiston kotisivu (viitattu 19.2.2006) [www-sivu]. Saatavilla: http://www.aspentech.com/industry_solutions/index.cfm.
2. Balas-ohjelmiston sähköinen manuaali (viitattu 9.12.2005) [CHM-tiedosto]. Saatavilla: <http://virtual.vtt.fi/virtual/balas/BalasManual.chm>.
3. ChemCAD-ohjelmiston version 5.5 ominaisuuksien esittely (viitattu 21.2.2006 11:20) [PDF-tiedosto]. Saatavilla <http://www.chemstations.net/documents/55feats.pdf>.
4. ChemCad-ohjelmiston esittely [www-sivu] (viitattu 21.2.2006 9:18). Saatavilla: <http://www.chemstations.net/products2.htm>.
5. FloSheet-ohjelmiston kotisivut (viitattu 18.2.2006) [www-sivu]. Saatavilla: http://www.coastform.co.uk/procede/intro_2.htm.
6. FlowMac-ohjelmiston kotisivu (viitattu 16.12.2005) [www-sivu] <http://www.papermac.se/flowmac.html>.
7. KnowPap ja KnowPulp-projekten taustatietoja (viitattu 9.12.2005) [www-sivu]. Saatavilla: <http://www.knowpap.com/suomi/project.htm>.
8. Pro/II:n ominaisuuksien esittely (viitattu 14.11.2005 17:32) [PDF-tiedosto]. Saatavilla: <http://www.simsci-esscor.com/NR/rdonlyres/92919C00-4C67-4916-9F15-B122E27C6A22/0/Batch.pdf>.
9. Yleiskatsaus Balas-simulatiohjelmaan (viitattu 13.12.2005) [www-sivu]. Saatavilla: <http://virtual.vtt.fi/virtual/balas/index.html?http&&&virtual.vtt.fi/virtual/balas/overview.html>.

Painamattomat lähteet

10. VTT:n Balas-koulutus, tutkija Juha Leppävuori, Tampereen ammattikorkeakoululla 15-16.9.2005.
11. Sähköpostikeskustelu, pt.tuntiopettaja Reijo Vaittinen, 9.3.2006.
12. Sähköpostikeskustelu, yliopettaja Kaj Jansson, 13.3.2006.

LIITTEET

1. Pro II -ohjelmiston lisenssit
2. Introduction to Balas software
3. Balas Process Simulation Software
4. Flosheetin painikkeet
5. FloSheetin valikot
6. Balasin valikot
7. Process simulation – a tool for studying the impacts of varying process conditions and chemical dosing on wet end chemistry
8. Solvers

LIITE 1. Pro/II-ohjelmiston ja siihen liittyvien oppilaitosisenssin esittely.

Saatu sähköpostin liitteenä David P. Whittakerilta maanantaina, 31. lokakuuta 2005, kello 15:24

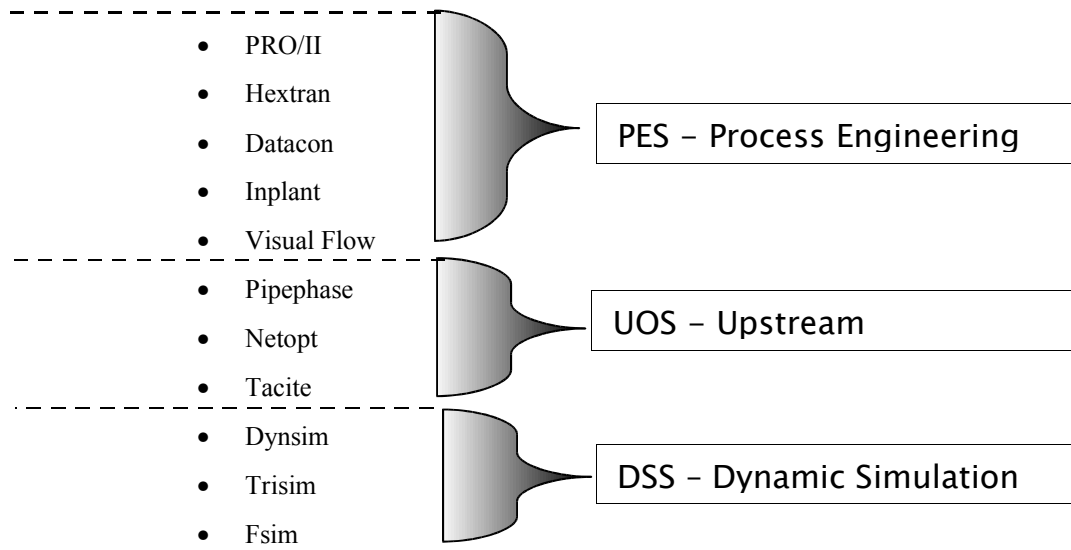


ACADEMIC PROGRAMME

SimSci-Esscor, a division of Invensys Plc, offers the leading simulation software for the Upstream Oil & Gas, Refining, Petrochemical and Chemical industries.

Our Academic Program is designed to allow Academic Institutions and Students to have access to the same software that is widely used in industry. We believe that training Chemical & Petroleum Engineers in the use of simulation tools is essential and will prepare them for their future employment, as their jobs will almost certainly involve simulation tools in one form or another. The software will also be a valuable aid for design projects, course assignments and research projects.

Commercial Simulation Tools from SimSci-Esscor:



Each of the above use a common database of physical and thermodynamic properties which is the most extensive available in any commercial simulator. They provide the backbone of any process design, be it conceptual or detailed.

Simulation Tool Description

Process Engineering Suite -PES

PRO/II

PRO/II is a general process simulator for modeling processes and calculating heat and material balances, predicting process performance etc. It has rating and sizing tools for distillation columns and heat exchangers. It also has modules for batch processes, electrolytes and polymers. Many engineers consider Pro/II to be the most intuitive and easy to use process simulation tool available and it has the added advantage of a back-up keyword input file which can be reviewed off-line.

Hextran

Hextran is a powerful, steady state simulator for heat transfer and heat exchanger systems. It is particularly well suited to the rigorous analysis and design of complex heat recovery networks. **Hextran** also offers integrated versions of exchanger design programs from HTRI and HTFS (for subscribing members).

Datacon

Datacon is a data reconciliation and process verification package that is designed to take real time process data and turn it into consistent and reliable information.

Visual Flow

Visual Flow is a hydraulic design program that enables process/safety engineers to design and model safety systems and pressure relief networks. It includes an interactive isometric drawing capability that makes entering pipe and connection information quick and easy. Its capabilities have been extended to cover a wide range of piping applications, such as steam systems.

Inplant

Inplant is a rigorous, multi-phase flow simulation program for the design, rating and analysis of plant piping systems.

Upstream Engineering Suite -UOS

Pipephase

Pipephase is a multi-phase fluid flow simulator for the design of Oil and Gas gathering networks. It can handle both 'Black Oil' and Compositional models and has the most sophisticated network-solving capabilities of any hydraulic calculation package on the market.

Netopt

With the addition of the Netopt add-on module to Pipephase it is possible to carry out field wide optimisation studies. For example this could include line sizing, compression studies, or gas-lift optimisation.

TACITE

With the addition of the TACITE add-on module it is possible to carry out 3-phase dynamic analysis of pipelines. This would include pigging studies, terrain-induced slugging analysis and other multi-phase transient flow phenomena.

Dynamic Simulation

Dynsim

Dynsim is a state of the art dynamic process simulation tool. It allows engineers to investigate the effects of different designs on the operation of a process including the ability to add control schemes to the flowsheet. The same modeling environment gives the ability for advanced conceptual design, control strategy selection, safety (HAZOP) studies, DCS checkout, operator training and plant improvement studies.

Further information on these programs and the full range of SimSci-Esscor products and services is available on our website at www.simsci-esscor.com

How can my department and students get access to these programs?

Our new academic policy offers these products for a small fraction of the commercial rate. Individual academic staff or students can have single standalone PC licenses or alternatively a 20-User Network license is available for the purpose of teaching groups of engineers (larger user numbers can be arranged), within the department. A combination of a department network license and individual copies might be most effective.

Under the Academic Program the simulation tools are licensed as the suites PES, UOS or DSS. A 'suite' license allows the user access to all of the programs in the suite, one at a time. For example 1 license of PES gives the user access to PRO/II, Inplant, Visual Flow, Hextran and Datacon.

How much will it cost?

A 12-month license for the PES Suite, UOS Suite or DSS Suite costs:

- Single User standalone PC copy (1-user) US\$200
- Package of 20 standalone PC copies US\$1,000
- 20-users network copy US\$1,000

Commercial Terms

- 1) Payment terms: in advance for contracted term
- 2) Non-cancelable for the contracted term
- 3) Shipping and handling charge: US\$ 25 per shipment

The license fee includes:

- Software
- Standalone PC security (Dongle) or electronic security code
- Online Documentation, manual, reference guide, example models, application briefs, etc.
- 1 copy of the tutorial manual for each PC copy
- 4 copies of the tutorial manual for each 20-user PC or LAN package
- For network license holders, a half-price place on one of our scheduled 2-day training courses.

Show us what you can do!

We are offering an annual US\$500 prize in each of our sales regions (Americas, Europe, Africa and Asia Pacific) to the authors of the best published paper describing the use of simulation in process engineering.

What Next?

We hope that you and your department will see the benefit of using commercial simulators as part of the university courses that you offer, whether it be full training of the tools or as teaching aids to help students with their studies.

If you would like to set up a license agreement for these tools or would like further information on the programs that SIMSCI-ESSCOR offer then please contact:

David Whittaker, Sales Manager

Email: david.p.whittaker@ips.invensys.com, Tel: +44 161 429 6744, Tel: +44 161 429 4708 (Direct)

Fax: +44 161 480 9063



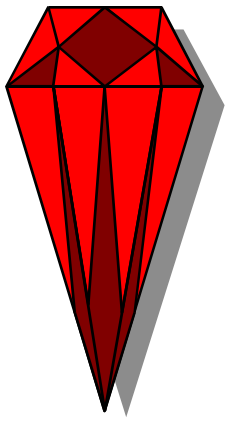
Introduction to Balas software

Sakari Kaijaluoto
VTT Processes



Balas

- ▼ A steady-state simulation package for pulp and paper mills
- ▼ Extensive selection of unit operation modules for
 - mechanical pulping
 - paper machine line
 - heat recovery
 - water and wastewater treatment
 - power plants
 - Drying section
- ▼ Applications
 - site-wide material and energy balances
 - heat recovery and heat integration analyses
 - modelling of dissolved and colloidal substances
 - process optimisation and fitting process model to measured data
- ▼ Easy MS Excel interface
 - import and export any process parameters and run the process model within Excel
 - visualisation of process data
 - tailored report sheets and clear representation of balances and process parameters



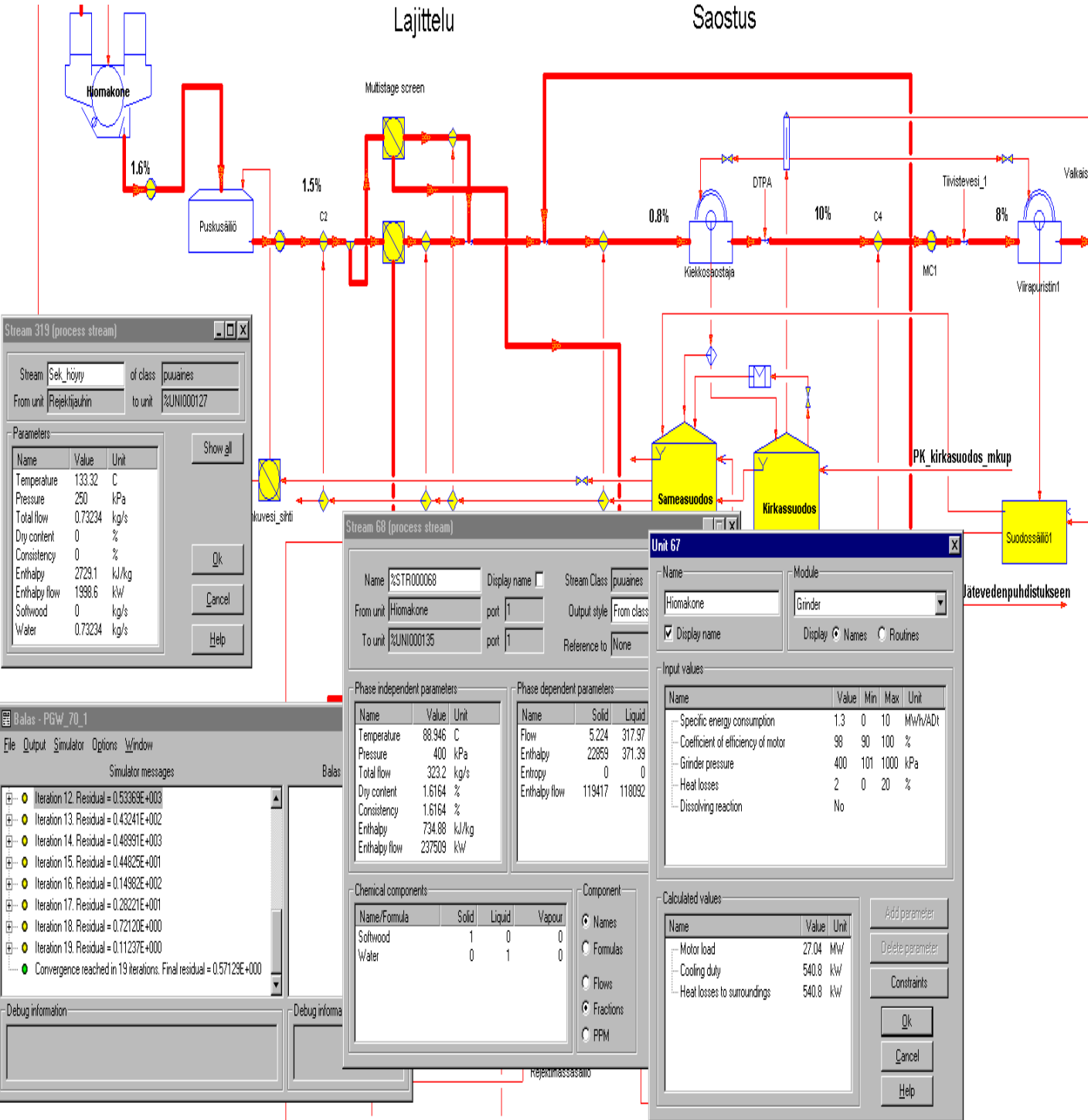
BALAS

Process Simulation Software

Painehiomoprosessi PGW-70

Lajittelu

Saostus



Stream 319 (process stream)

Stream: Sek_höyry of class puuaines
From unit: Rejektiainuhin to unit: %UNI000127

Parameters

Name	Value	Unit
Temperature	133.32	C
Pressure	250	kPa
Total flow	0.73234	kg/s
Dry content	0	%
Consistency	0	%
Enthalpy	2729.1	kJ/kg
Enthalpy flow	1998.6	kW
Softwood	0	kg/s
Water	0.73234	kg/s

Stream 68 (process stream)

Name: %STR000068 Display name: Stream Class: puuaines
From unit: Hiomakone port 1 Output style: From class
To unit: %UNI000135 port 1 Reference to: None

Phase independent parameters

Name	Value	Unit
Temperature	88.946	C
Pressure	400	kPa
Total flow	323.2	kg/s
Dry content	1.6164	%
Consistency	1.6164	%
Enthalpy	734.88	kJ/kg
Enthalpy flow	23750.9	kW

Phase dependent parameters

Name	Solid	Liquid
Flow	5.224	317.97
Enthalpy	22859	371.39
Entropy	0	0
Enthalpy flow	119417	118092

Chemical components

Name/Formula	Solid	Liquid	Vapour
Softwood	1	0	0
Water	0	1	0

Unit 67

Name: Hiomakone Module: Grinder
Display name: Display: Names Routines

Input values

Name	Value	Min	Max	Unit
Specific energy consumption	1.3	0	10	MWh/ADt
Coefficient of efficiency of motor	98	90	100	%
Grinder pressure	400	101	1000	kPa
Heat losses	2	0	20	%
Dissolving reaction	No			

Calculated values

Name	Value	Unit
Motor load	27.04	MW
Cooling duty	540.8	kW
Heat losses to surroundings	540.8	kW

Balas - PGW_70_1

File Output Simulator Options Window

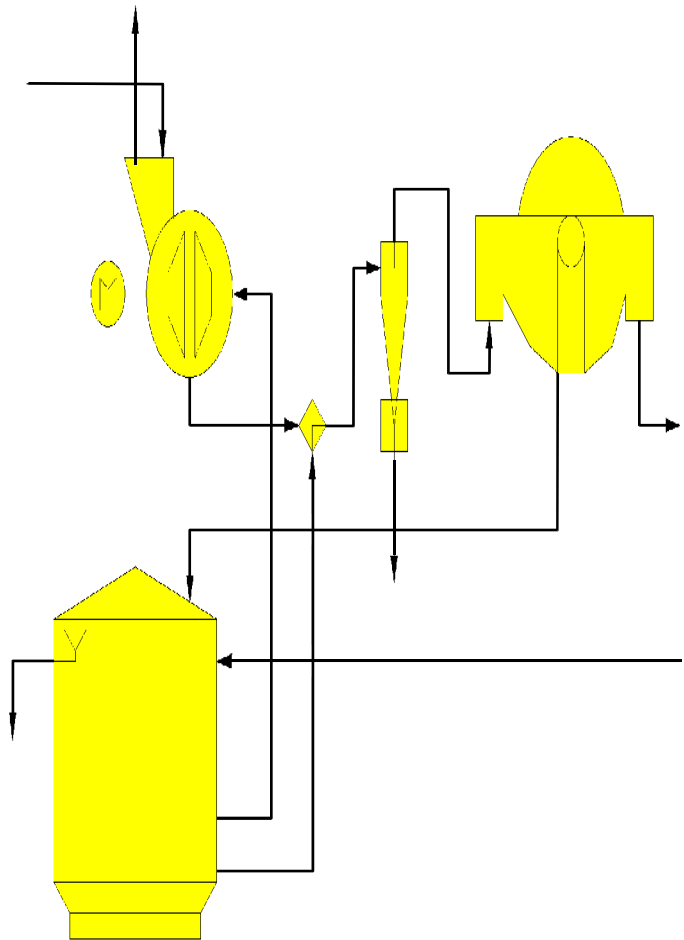
Simulator messages

Iteration 12. Residual = 0.53363E+003
Iteration 13. Residual = 0.43241E+002
Iteration 14. Residual = 0.48891E+003
Iteration 15. Residual = 0.44825E+001
Iteration 16. Residual = 0.14982E+002
Iteration 17. Residual = 0.28221E+001
Iteration 18. Residual = 0.72120E+000
Iteration 19. Residual = 0.11237E+000
Convergence reached in 19 iterations. Final residual = 0.57129E+000

Debug information:

What is steady-state simulation?

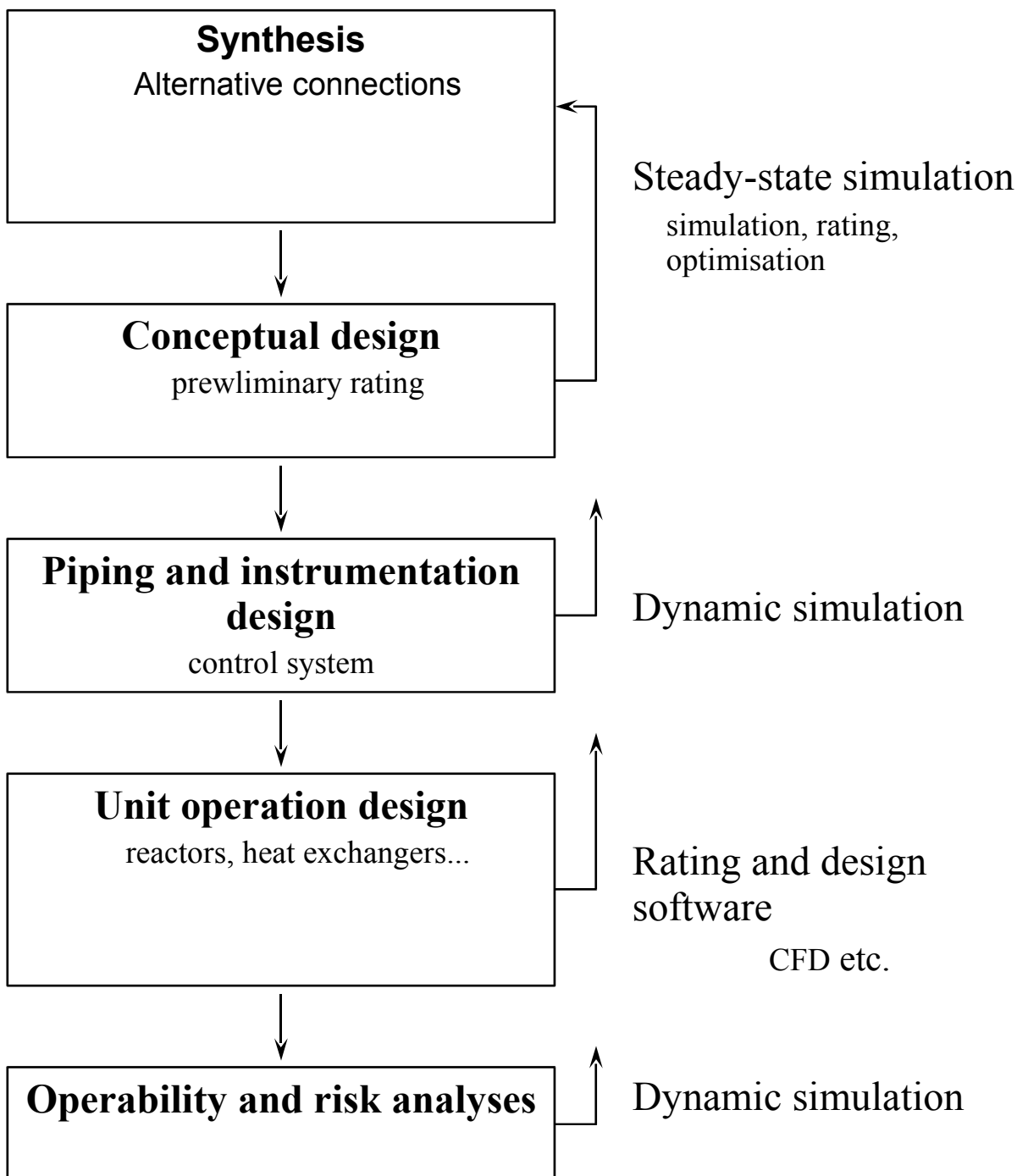
- ▼ Computing mass and energy balances by computer
- ◆ Calculation modes
 - Simulation
 - Rating (design)
 - Optimization
 - Parameter estimation (data fitting)



What can one use simulation for?

- ▼ Improving understanding
- ▼ Site-wide integration studies
- ▼ What if - studies
- ▼ Conceptual design
- ▼ Process analysis based on process measurements
- ▼ As a prerequisite for other analyses e.g. Pinch Analysis

Process synthesis flowchart



Consequences of steady-state assumption

- ▼ No transients
- ▼ No holdups
- ▼ No delays
- ▼ Towers and tanks are computationally equivalent to mixers
- ▼ Average capacity
- ▼ Average production of broke

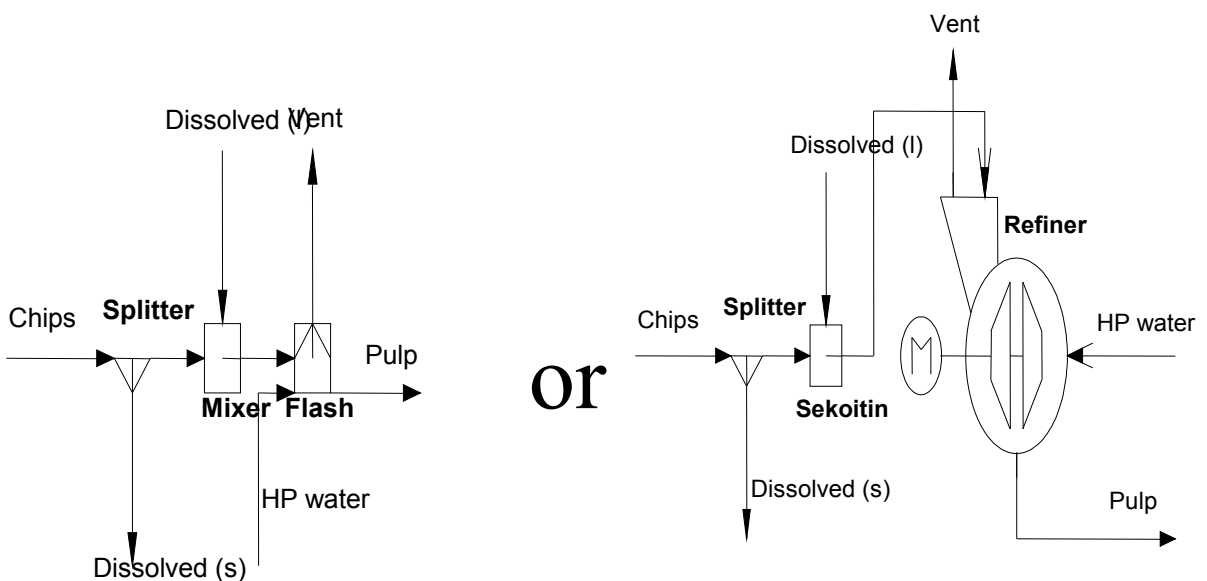
User requirements

- ▼ Be familiar with the process!
- ▼ Art of simplification
- ▼ Basic understanding of simulation
- ▼ Practical knowledge of mathematical solvers
 - what to do when problems do not converge
- ▼ Ability to improvise
 - How can one model various processes by a few basic unit operations
- ▼ These skills are acquired through practice and experience

Ability to improvise

The problem of missing refiner

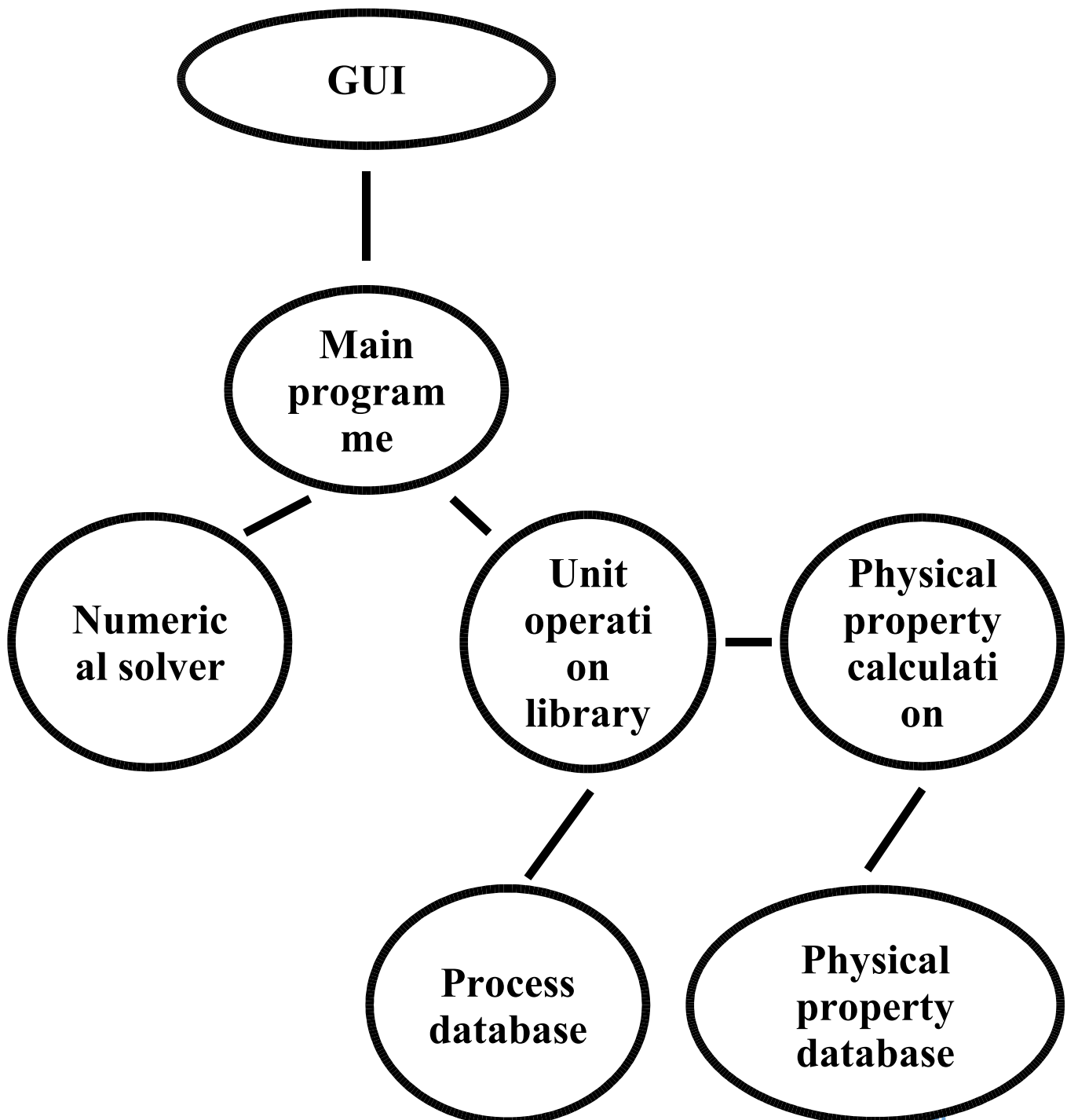
- ▼ Refiner basic operation
 - chips become pulp
 - part of wood dissolves
 - mechanical work becomes heat
- ▼ A refiner can be represented by a splitter, a mixer and a flash vessel



Basic concepts

- ▼ **Streams** carry matter, energy and information
 - no quality properties like freeness, brightness or particle size
 - solid, liquid and vapour phases
 - no pressure drop, heat losses, holdup or delay
- ▼ **Units** manipulate the matter, energy and information carried by the streams

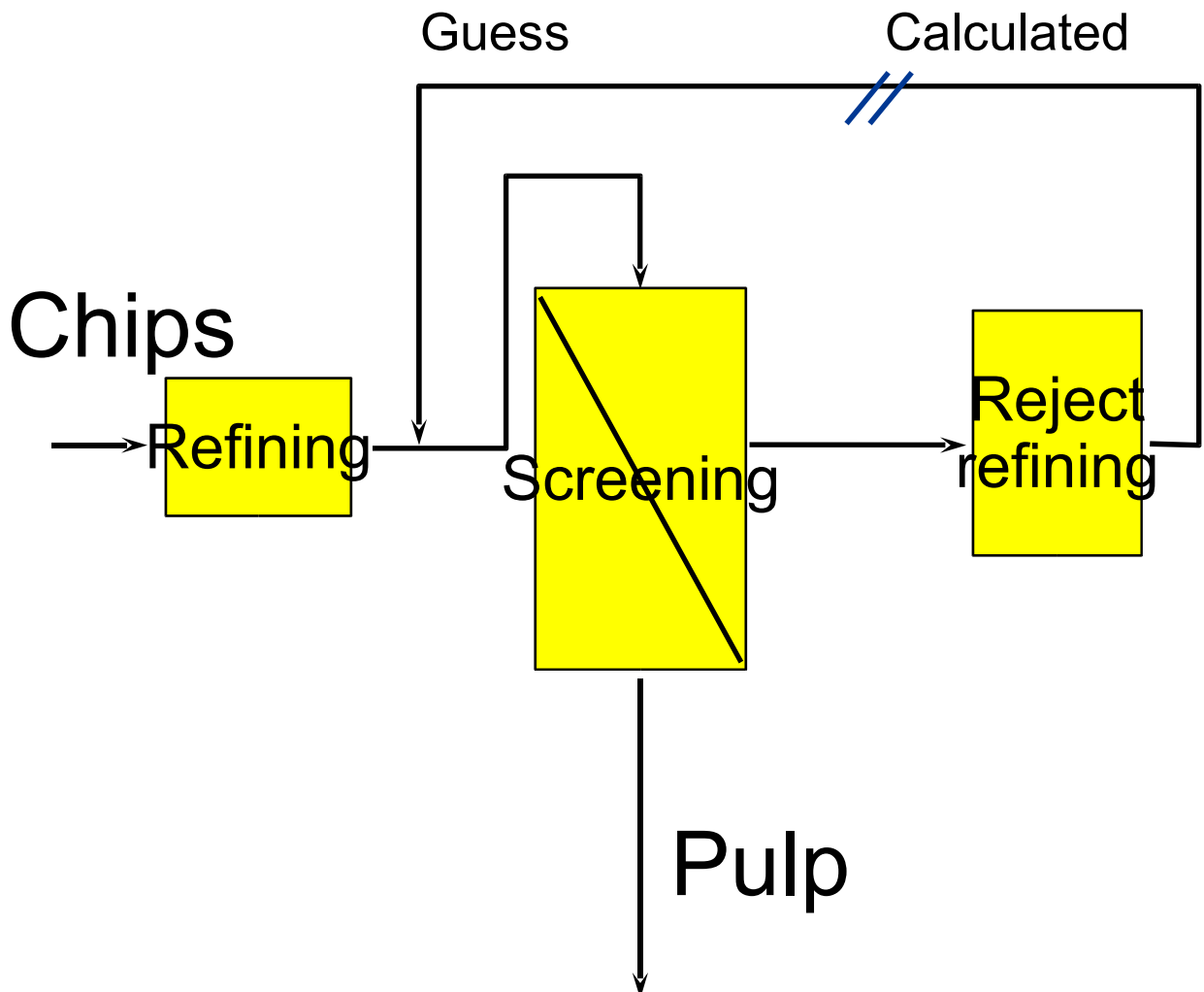
Main elements of a simulator



Different ways of solving simulation problems

- ▼ Equation oriented
 - Process is represented by a large non-linear set of equations (mass and energy balances, equilibrium equations, connectivity equations...)
 - Solved usually iteratively using linearisation
 - mathematically elegant
- ▼ Sequential
 - Each one of the unit operations is separately calculated using a subroutine, which calculates values for the output streams as function of input streams
 - different process can be simulated by connecting the unit operations in different ways
 - mathematically simple, resembles manual calculation

Iteration



Continue until $\text{guess} \approx \text{calculated}$

Information flow and reverse calculation

- ▼ In sequential modular simulation the direction of information is normally the same as the direction of flow of material
- ▼ This rule has been relaxed for
 - some unit operations consuming such utilities as cooling water, fuel or steam
 - some control-type actions

Detail of modelling

- ▼ Depends on the purpose and the extent of the model
- ▼ The question is "What is the question?"
 - before you start building a model you must know, what the customer wants
- ▼ Mastering of "the art of simplification" is essential
 - simple models are easier to maintain and use

PI-diagram and simulation model

- ▼ No explicit control structures in simulation model
 - the ideal "build in" controllers used may be difficult to comprehend for non-experts
- ▼ Fictitious units must sometimes be added to realise control actions
- ▼ Sometimes a particular unit operation must be compiled of several basic unit operation blocks
- ▼ It is often advisable to add "unnecessary" units like towers to improve the readability of the model

Control loop representation

- ▼ Flow, consistency and temperature can be controlled
- ▼ Build-in feature in a number of units, like
 - pulper (consistency)
 - refiner (consistency, cooling water demand)
 - condenser (cooling water demand)
 - steam heater (steam consumption)
 - etc.
- ▼ Arbitrary control loops can be set up by adding design constraints to the problem

Physical property databases

- ▼ Balas comes with 5 property databases
 - **Pulp**: substances for pulp and paper industry
 - **Reid**: mostly a petrochemical database but includes basic components like water, oxygen and nitrogen
 - **Electrolyte**: Dissolved solids and electrolytes
 - **Fuel**: Some solid and liquid fuels
 - **Obsolt**: Old CTP databas. Do not use! Use alias instead.
- ▼ Databases can be examined using Balas Database manager -tool
- ▼ System databases cannot be changed
- ▼ If one wants to create a new component the best way is to use Alias-function in the Database manager
- ▼ New databases can be created and used
- ▼ User defined property databases are saved with the process file

Drawing objects (FloSheet)

- ▼ Streams
 - stream styles can be created
- ▼ Unit symbols
 - no one-to-one mapping between symbols and calculation modules
 - a symbol can be mapped to several calculation modules
 - a calculation module can be mapped to several symbols
 - own symbol libraries can be compiled
- ▼ Arrowheads
 - not compulsory
 - make the drawing easier to read
- ▼ Text
 - can be connected to other objects
 - text styles can be created

Drawing a flowsheet (FloSheet)

- ▼ Insert symbols representing unit operations
 - Choose symbol-tool
 - Click the symbol on the screen and move it to desired location
- ▼ Join unit operations with streams
 - line-tool
 - default direction for a stream is the direction it is drawn
- ▼ Add arrows
 - arrow-tool
 - not necessary but helps in interpreting the flowsheet
- ▼ Save
- ▼ Check topology
 - Either from Balas toolbar or from menu simulation - check topology
 - correct any topology errors you may have
- ▼ Initialise process streams
 - Either from Balas toolbar or from menu simulation - initialisation
 - Create new stream classes and initialise feed and iteration streams if required
- ▼ Initialise unit operation parameters

Drawing a stream (FloSheet)

- ▼ Choose line-tool (pen)
- ▼ Select the starting point by clicking left mouse button once on desired location
- ▼ Corner points are added by single left mouse button clicks
- ▼ Select end point to a snap point by a single left mouse button click and to any other point in the flowsheet by a double left mouse button click
- ▼ Choose the arrow-tool
- ▼ Position the arrow on the top a line by a single left mouse button click
- ▼ Every time process topology is changed, it is necessary to execute "check topology" before simulation

Modifying a stream (FloSheet)

- ▼ Delete a stream by selecting it and pressing delete-button or by clicking the right mouse button and selecting delete from the menu
- ▼ Changing stream connection or routing
 - Select the line-tool
 - Select an end of a stream by clicking it with left mouse button (pen tilts 90 degrees and the line becomes green. In case stream does not turn green, you have not clicked close enough to the end of it and you are starting a new stream. In this case press delete-button and try again)
 - Extend stream by adding new corner points and/or an end point
 - Shorten stream by removing previous end / corner points by pressing delete-button or selecting delete from the right mouse button menu
 - Run topology check if the connections have been changed
- ▼ The best way of noticing unsuccessful connections is to activate the Line Snap Warnings -option from FloSheet Format/Preferences menu (tab Lines and Snapping)

Modifying a stream

Common problems (FloSheet)

- ▼ To activate the stream you must click **very close** the end point of the stream
- ▼ Unable to modify a stream
 - this sometimes happens if the endpoint you are trying to click is very close to a snap point but not attached to it (Flowsheet bug)
 - the only way to solve the problem is to
 1. deactivate Auto-Routing
 2. move the symbol
 3. shorten the stream
 4. move the symbol back to the original place
 5. connect the stream to the snap point

Changing a unit operation symbol

- ▼ Delete an existing symbol by pressing delete-button or using delete command from right menu button menu
- ▼ Select a new symbol from the list and place it on an empty spot in the flowsheet
- ▼ Select connecting streams by clicking at the end of it.
- ▼ Add / remove segments to connect it to the new symbol
- ▼ Add arrows if necessary
- ▼ Check topology
- ▼ Initialise parameters for the new unit operation
- ▼ Initialise any new feed or iteration streams you have created

Topology errors

- ▼ Topology error list will appear on the right hand side window in Balas
- ▼ Open the error list by clicking once on the "+" sign
- ▼ Typical sources of errors
 - unconnected ports in unit operations (so called compulsory ports)
 - stream has a wrong direction
- ▼ Place pointer on the top of the message and press left button to see details
- ▼ If you do not remember where the unit / stream is located in the process
 - Select 'list units and streams' from Balas 'output' menu
 - Separate tabs exist for streams and units
 - Select the unit /stream you want to locate and it will start blinking on the flowsheet

Streams

Common mistakes

- ▼ Stream not connected
 - always observe the snap warning
 - connections can be tested by activating Auto-Routing and by moving the unit (reverse the operation using Undo)
- ▼ Surplus streams
 - if you fail to activate a stream when trying to edit it you start drawing a new stream. Delete it using escape or delete –key or the menu under the righthand mouse button.
- ▼ Stream extended by drawing a new stream connected to it
 - streams can only be connected by using units
- ▼ Two streams connected to a same port
 - illegal connection
 - Balas does not give a warning (a bug), but does not create the connection either => a process can be created where a connected stream is not connected

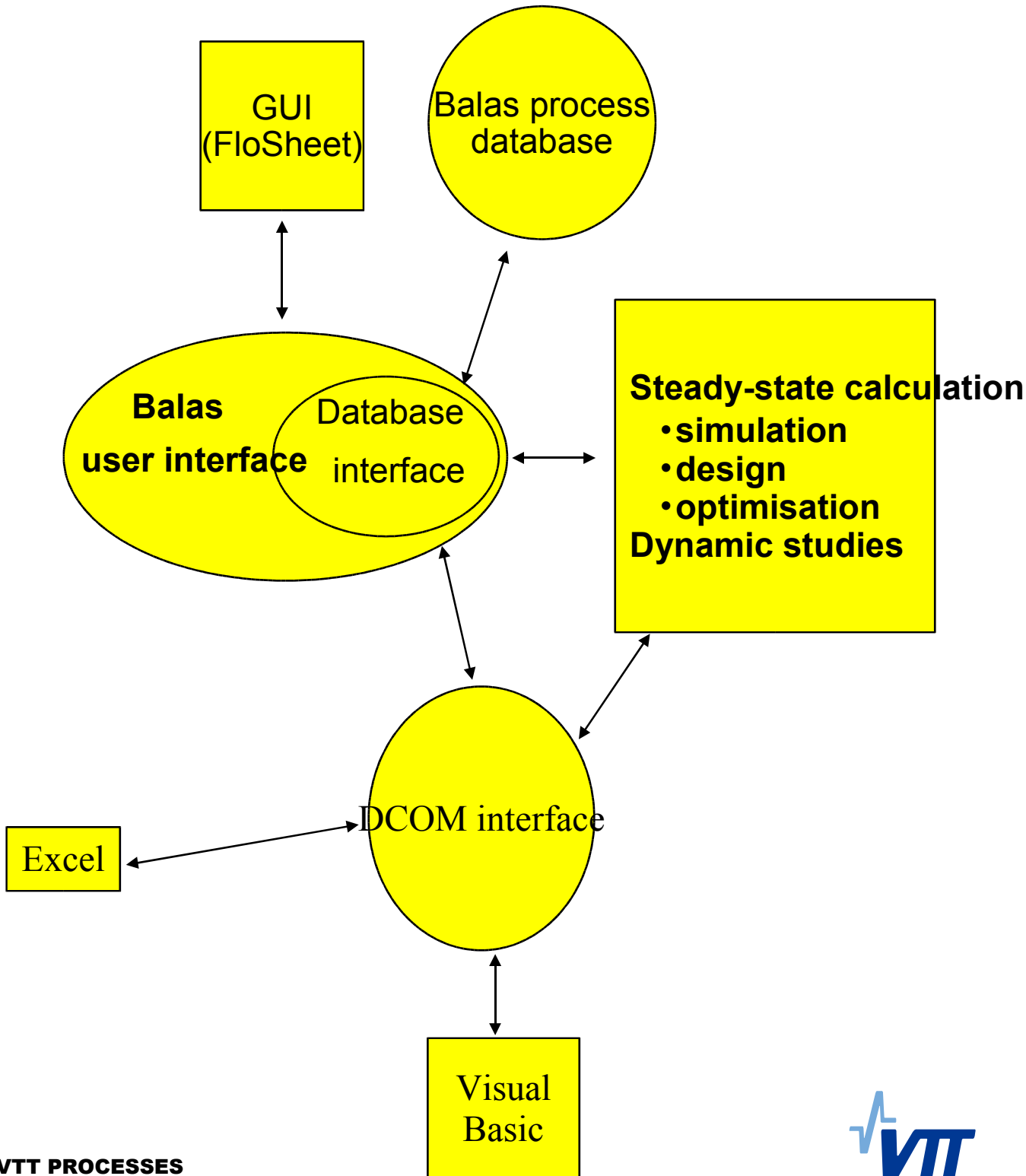
Tips on stream connections

- ▼ It is always good to name all inlet and outlet streams
 - you can view the lists using Excel-link
 - a stream with a default name is an indication of a possible missing connection

Balas, some technical details

- ▼ Sequential modular
 - design constraints can be added
 - parameter functions
 - any unit parameter can be expressed as a function of streams entering the unit
 - reverse calculation
 - some unit operation models calculate flowrates for streams **entering** the unit
- ▼ Solvers
 - Secant
 - Quasi-Newton
 - Optimising (SQP)
 - Validation (SQP)
 - Dynamic (explicit euler)

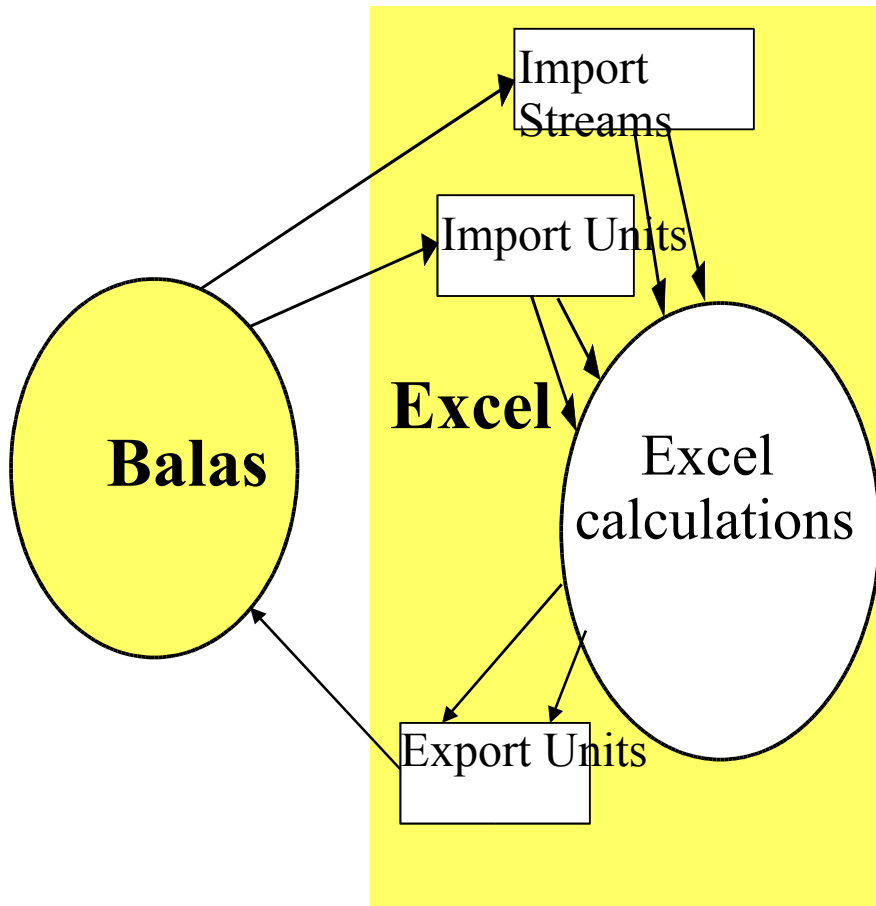
Balas architecture



Comparison of Balas with other programmes

- ▼ Advanced solver
 - parameter functions
 - design constraints
 - tools for data fitting
 - optimisation (can solve general NLP-problems)
- ▼ Easy link to Excel
 - based on DCOM-technology (enables links also to other programmes)
- ▼ Large unit process library
- ▼ Can deal with multicomponent vapour-liquid equilibria
 - VOC-discharges
- ▼ Large water networks can be easily modelled
 - reverse calculation
- ▼ Modelling of power generation and chemical recovery

Link to Excel

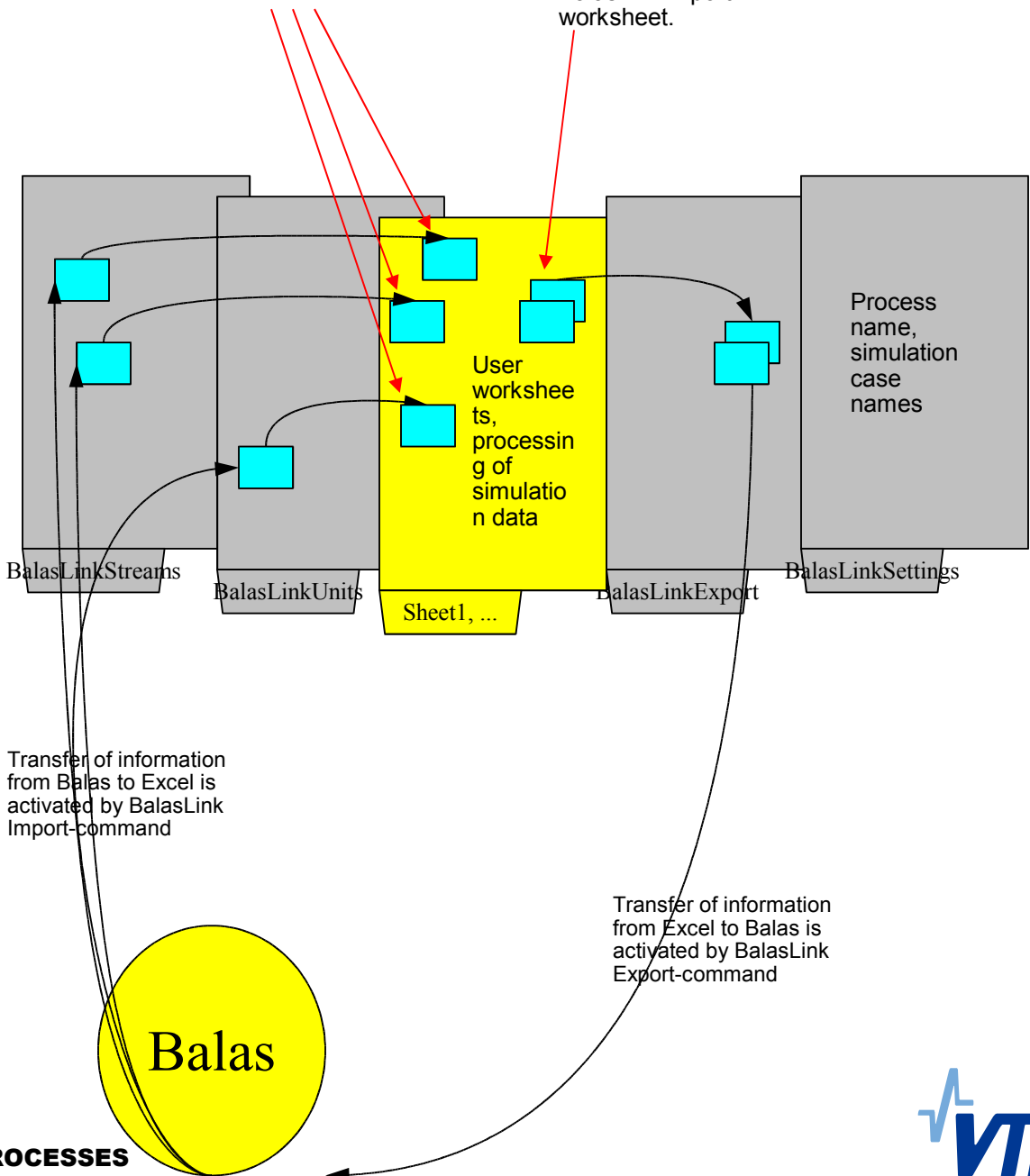


- ▼ Balas can be run from Excel
- ▼ Post-processing of results
- ▼ Sensitivity analyses
- ▼ Data logging on dynamic calculation

Link to Excel

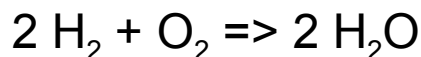
Import cells created by BalasLink Get Stream/Unit variable or Create Stream-table -commands containing references to cells in BalasLinkStreams and BalasLinkUnits worksheets.

Export cells created by BalasLink Export Unit variable -command referenced by appropriate cells in BalasLinkExport worksheet.



Mass based reactions in Balas

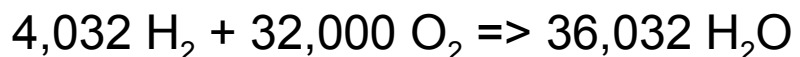
- ▼ The classical (and normal) way of representing reactions is to use molar stoichiometric coefficients:



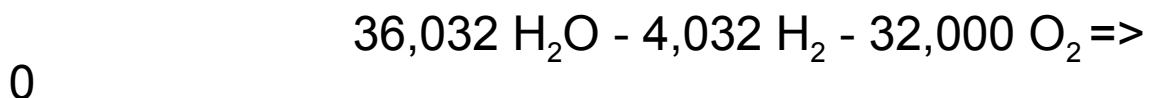
- 2 moles of hydrogen reacts with 1 mole of oxygen forming 2 moles of water.

- ▼ The same can be represented using mass based stoichiometric coefficients when molar weights are introduced:

- E.g. 2 moles of hydrogen equals to (2 mol*2,016 g/mol =) 4,032 g hydrogen [m=nM]



Alternatively:



Mass based reactions continued...

- ▼ The reactants have negative stoichiometric coefficients whereas products have positive ones
- ▼ The sum of coefficients must be zero! If needed, the simulator will scale the coefficients to ensure that mass balance holds
- ▼ Mass base conversion is used to denote the "completeness" of reactions
 - For example if conversion for a reactant is 99%, 1% of reactant based on weight is left unreacted
- ▼ Mass based coefficients are used since many organic components used in simulation (e.g. lignin) have no clearly defined molar mass

Using reactions in a model

- ▼ Converting one substance to another
- ▼ Changing phase (solid - liquid or solid - gas) of a substance
- ▼ Reactions can be defined in e.g.
 - Generic reactor module (REACT)
 - Refiners
 - Aeration lagoon
- ▼ Reactor calculation can be mapped to bleaching

Balas reactor model REACT

- ▼ Up to 10 reactions can be defined
- ▼ Reactions are calculated sequentially (Reaction 1, Reaction 2, Reaction 3, and so on).
- ▼ Reaction n is calculated based on the reaction mixture composition after performing reactions 1 ... 1- n and the conversion defined for reactants. Therefore the order in which reactions are defined and the conversion are important!

Balas reactor model REACT

▼ Example 1:

- Two parallel reactions



70 % of A is consumed in reaction (1) and 30 % in reaction (2).

- Reactions can be defined

	either	
Reaction 1: 70 %	$A \Rightarrow B + C$	conversion
Reaction 2: 100 % (the rest of A)	$A \Rightarrow D$	conversion
	tai	
Reaction 1: 30 %	$A \Rightarrow D$	conversion
Reaction 2: 100 % (the rest of A)	$A \Rightarrow B + C$	conversion

Contact info

- ▼ E-mail to all Balas team members: balas@vtt.fi
- ▼ Support
 - Sakari Kaijaluoto +358-(0)20-722 2657, sakari.kaijaluoto@vtt.fi (VTT Processes, P.O. Box 1603, FIN-40101 JYVÄSKYLÄ, Finland)
 - Jussi Manninen +358-(0)20-722 2723, jussi.manninen@vtt.fi (VTT Processes, P.O. Box 1603, FIN-02044 VTT, Finland)
 - Timo Puumalainen +358-(0)20-2722 2663, timo.puumalainen@vtt.fi (VTT Processes, P.O. Box 1604, FIN-40101 JYVÄSKYLÄ, Finland)
 - Juha Leppävuori +358-(0)20-2722 2726, juha.leppavuori@vtt.fi (VTT Processes, P.O. Box 1604, FIN-40101 JYVÄSKYLÄ, Finland)
 - Eemeli Hytönen +358-(0)20-2722 2729, eemeli.hytonen@vtt.fi (VTT Processes, P.O. Box 1604, FIN-40101 JYVÄSKYLÄ, Finland)
- ▼ Balas home page: <http://www.vtt.fi/pro/balas>

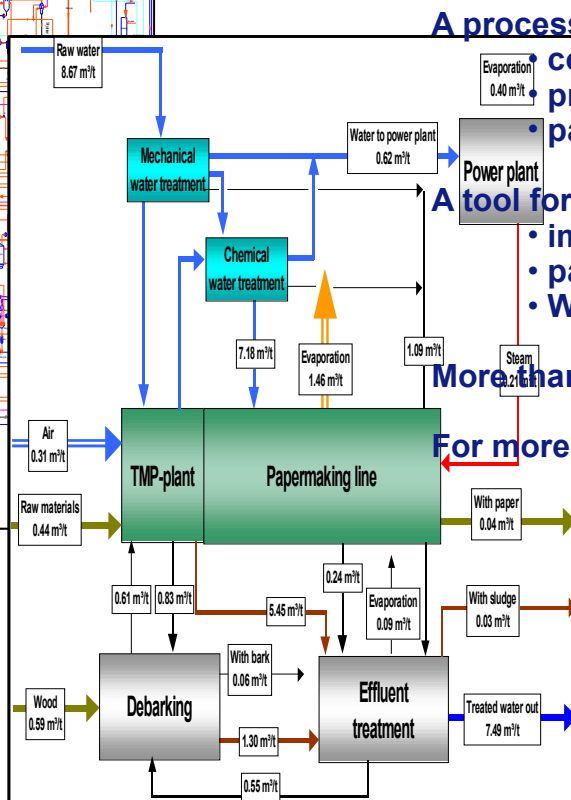
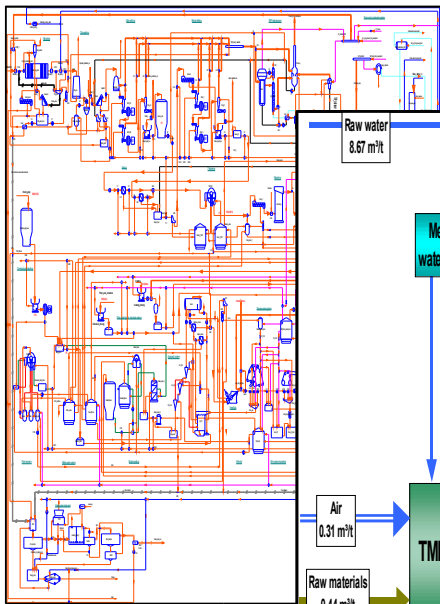


Balas[®] Process Simulation Software

Steady state process simulation



CONCEPTUAL PROCESS DESIGN WITH BALAS®



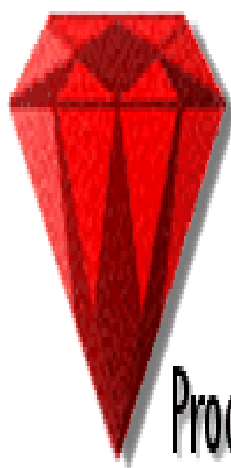
- A process design tool for
- concept studies
 - preliminary rating of equipment
 - parameter optimisation
- A tool for mills
- improved process understanding
 - parameter estimation from data
 - What-if studies

More than 60 industrial licenses

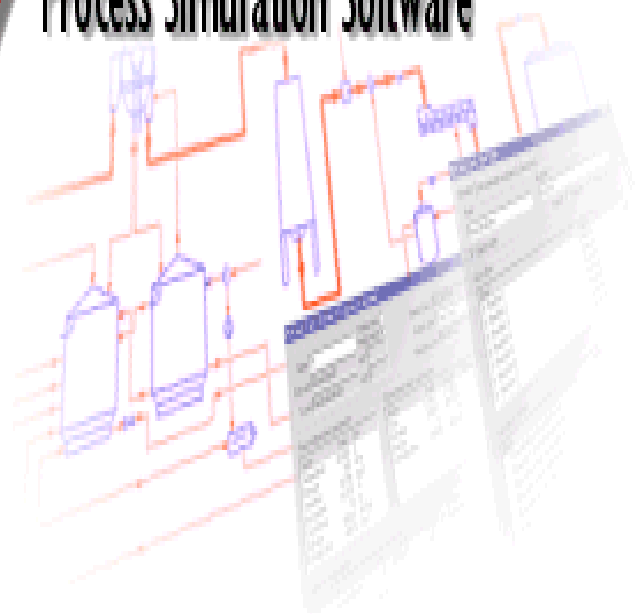
For more information see www.vtt.fi/pro/balas

MAIN FEATURES OF BALAS[®]

- ▼ Simulation package for pulp and paper mills for
 - steady-state simulation
 - simulation of tank dynamics
 - optimisation
 - parameter estimation
- ▼ Extensive selection of unit operation modules for
 - mechanical and recycled fibre pulping
 - kraft pulping
 - paper machine line
 - heat recovery and utilities
 - paper drying
- ▼ Hierarchical model structures
- ▼ Linked to MS Excel for post-processing of results

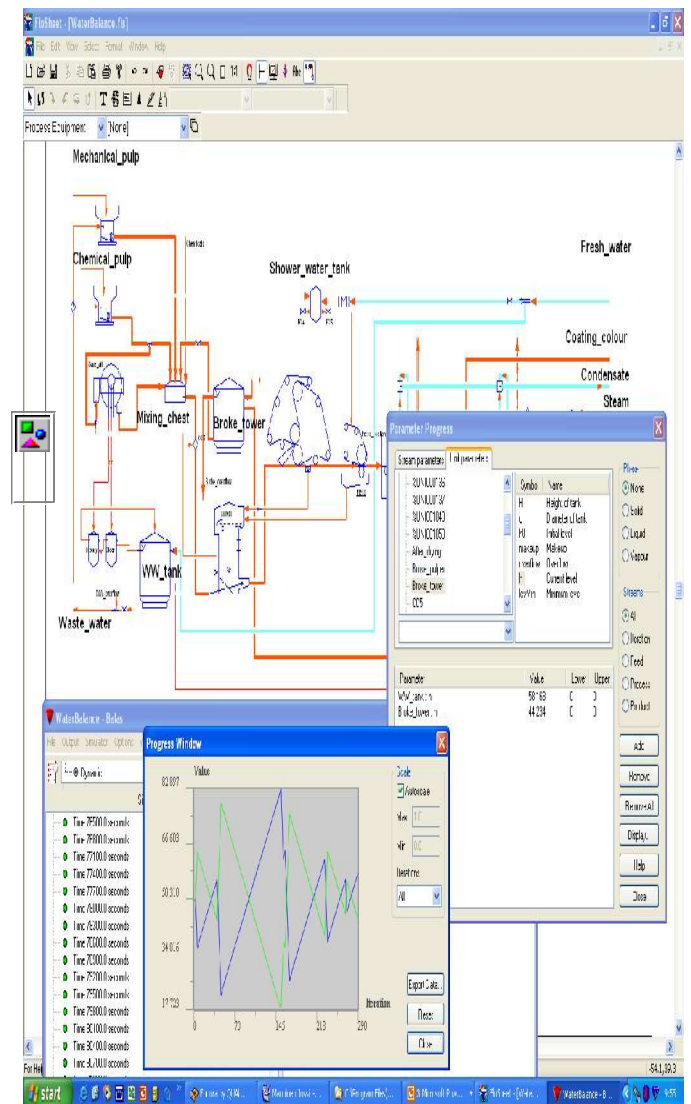


BALAS[®]
Process Simulation Software



SIMULATION OF TANK DYNAMICS

- ▼ Basic dynamic elements
 - CSTR tank
 - Plug flow pipe and tank
- ▼ Additional elements
 - PID controller
 - Splitters and flow controllers with stochastic behaviour
 - Integrator
- ▼ Time series of events can be defined
- ▼ Results can be viewed graphically or exported as text file or written directly to an Excel worksheet



ADDING OWN CORRELATIONS TO UNIT MODELS

- ▼ Own correlations can be added to unit operations based on e.g.
 - measured data
 - textbook data
- ▼ Correlations can contain references to
 - stream parameters
 - unit parameters



Unit - HRSG_tulistin

Parameters | Parameter constraints | Electricity

Parameter	Constraint
Heat transfer coefficient	
Heat transfer surface area	17.633*C[3,3,0]/1.02

Set
Clear

Functions

Expression	Value	Style	Output style
17.633*C[3,3,0]/1.02	1058.29	C/kg/s	C/kg/s

Add
Replace
Delete

Expression

Name	Type	P..
Unit parameters		
%STR008748	in	1
sk_tulistimelle	in	3
hrsg_höyry	out	2
sk_keittimelle	out	4

Symbol	Name
T	Temperature
p	Pressure
m	Total flow
d	Dry content
c	Consistency
w	Total mol weight

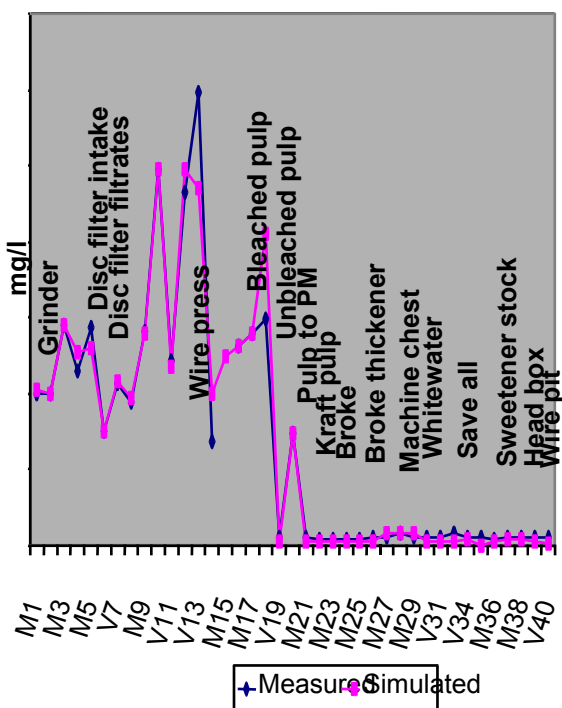
Phases

None
 Solid
 Liquid
 Vapour

OK Cancel Apply Help

FITTING PROCESS MODEL TO MEASURED DATA

Concentrations



Case definition

Units Solver Design variables Design constraints Inequality constraints Validation

Unit parameters Stream parameters

pgw_kemia_h

Symbol	Name	Phases
%STR000003		<input checked="" type="radio"/> None
%STR000004		<input type="radio"/> Solid
%STR000005		<input type="radio"/> Liquid
%STR000007		<input type="radio"/> Vapour
%STR000009		
%STR000013		
%STR000014		

Defined measurement points

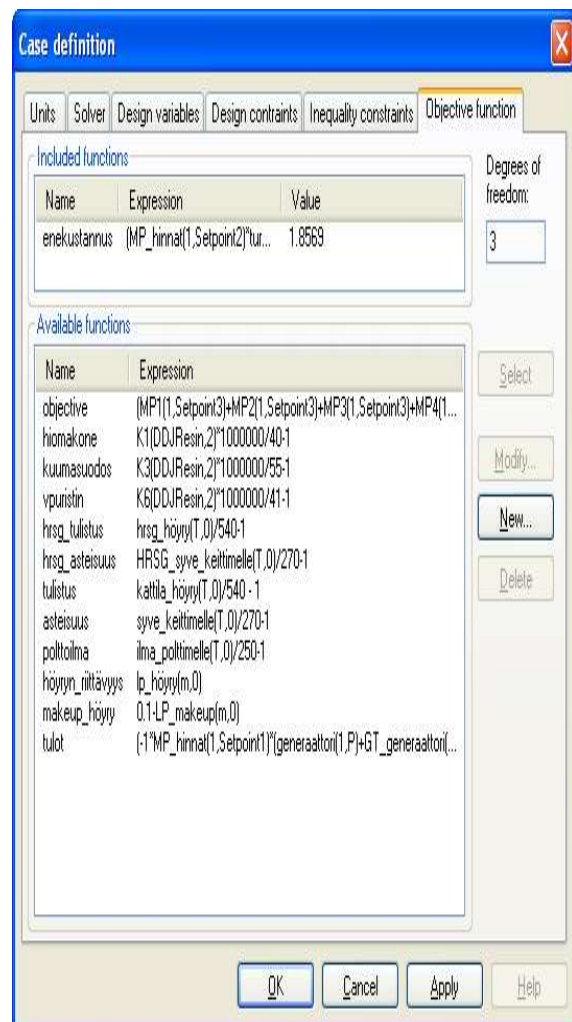
Stream	Parameter	Weight	Estimate	Set 1
K1	CGH1005	10000000	0.00221	0.003442
K2	CGH1005	10000000	0.00199	0.002707
K3	CGH1005	10000000	0.00175	0.002326
K4	CGH1005	10000000	0.00164	0.001981
K5	CGH1005	10000000	0.002	0.002647
K6	CGH1005	1	0.00181	0.002401
K7	CGH1005	1	0.00181	0.002345
K8	CGH1005	10000000	0.00164	0.001957

OK Cancel Apply Help

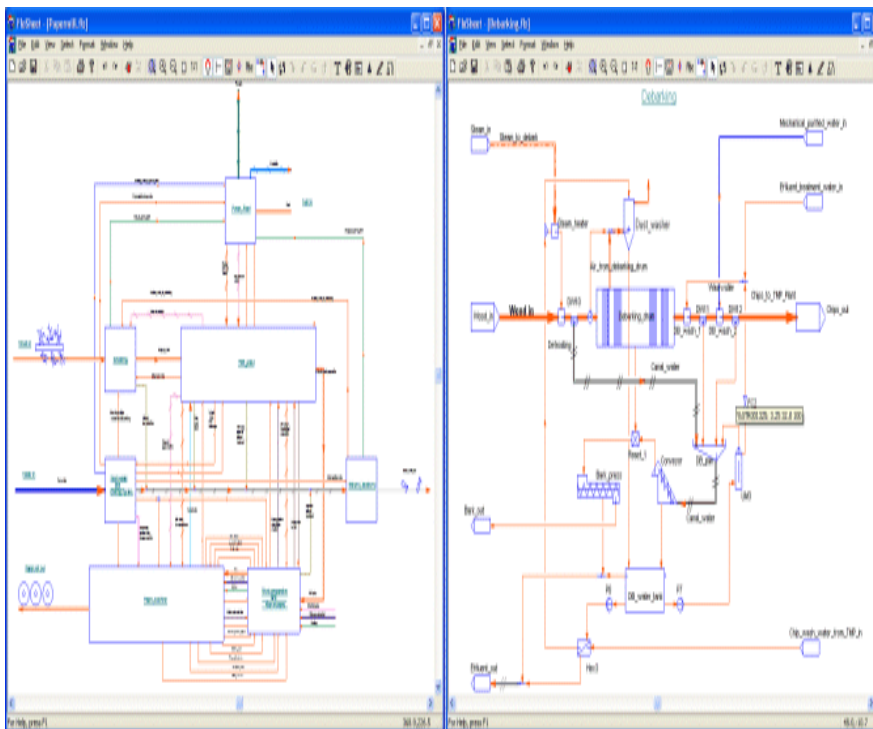
- Validation mode of Balas helps fitting process model to measured data using least-squares minimisation

PROCESS OPTIMISATION

- ▼ Balas is equipped with an SQP-solver for non-linear parameter optimisation problems
- ▼ User can define explicit equality and inequality constraints for the optimisation

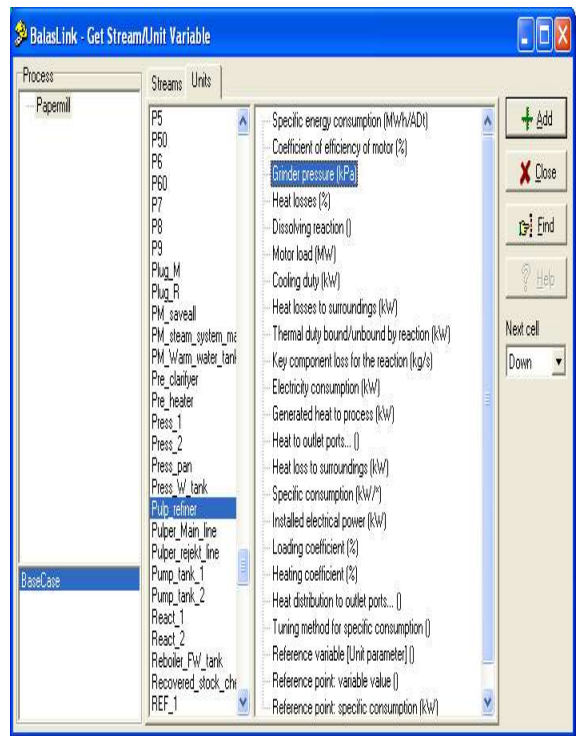
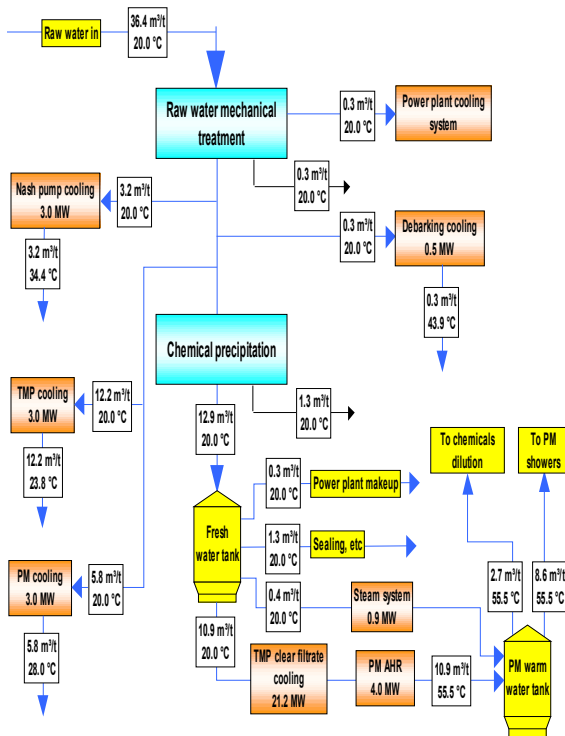


MODEL HIERARCHY



- ▶ Model hierarchy helps to organise and visualise large process models
- ▶ Input variables and output functions can be defined at sub-model definition dialog
- ▶ Model can contain an unlimited number of hierarchical levels

LINK TO MS EXCEL



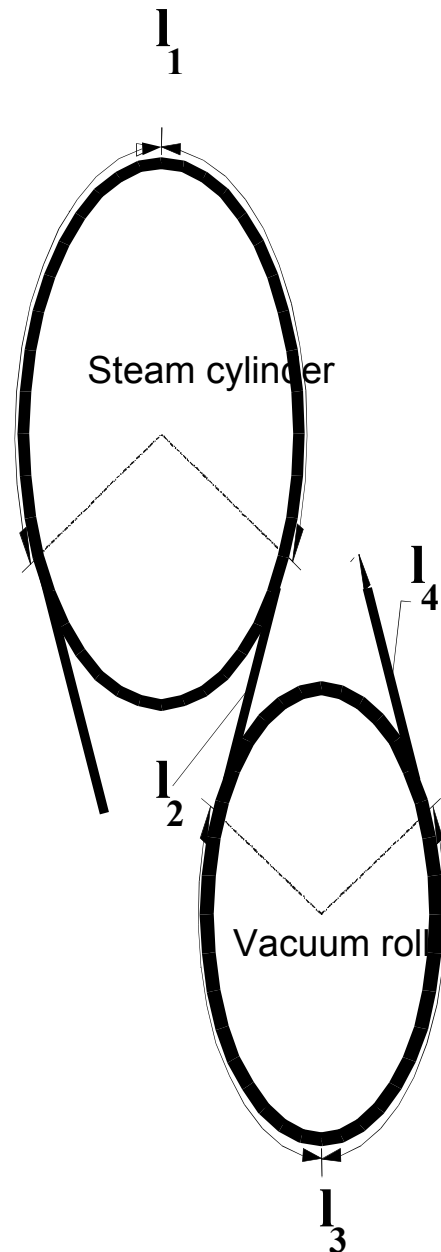
- ▶ All unit and stream variables can be imported
- ▶ Unit variables can be exported
- ▶ Model can be run from Excel
- ▶ Parameter runs for sensitivity analyses can be performed

WORK IN PROGRESS

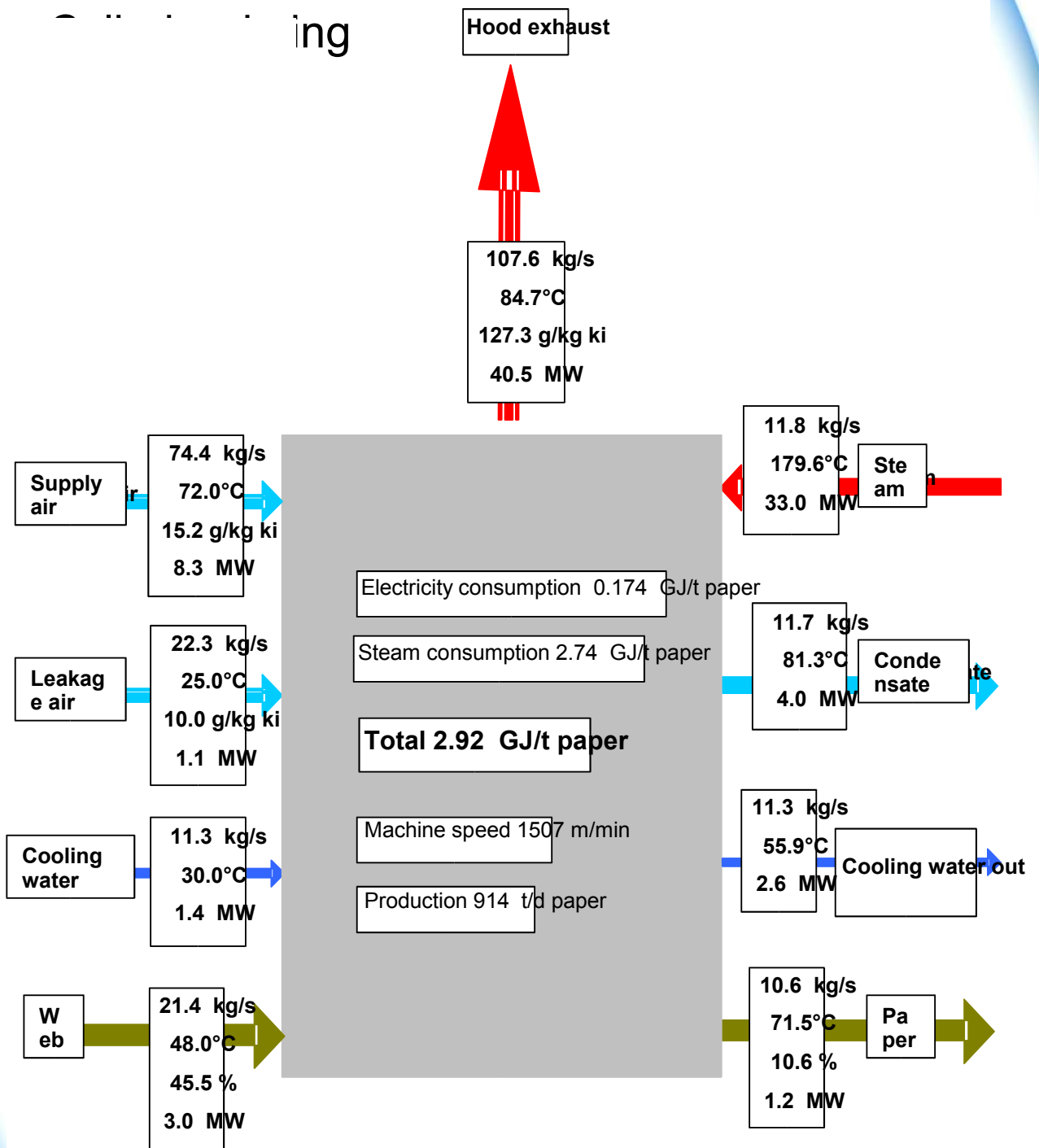
- ▼ Multi-phase chemical equilibrium calculation based on ChemApp calculation engine as an add-on package
 - Applications
 - pH-control
 - Precipitation
 - Chelation
 - Pulp washing
 - Ion-exchange between fibre and water phases
- ▼ Interactive multi-objective process optimisation based on NIMBUS-solver by University of Jyväskylä
- ▼ New graphical user interface (MS Visio)
- ▼ Open interface for user defined unit operation modules

EXAMPLE – Paper drying simulation

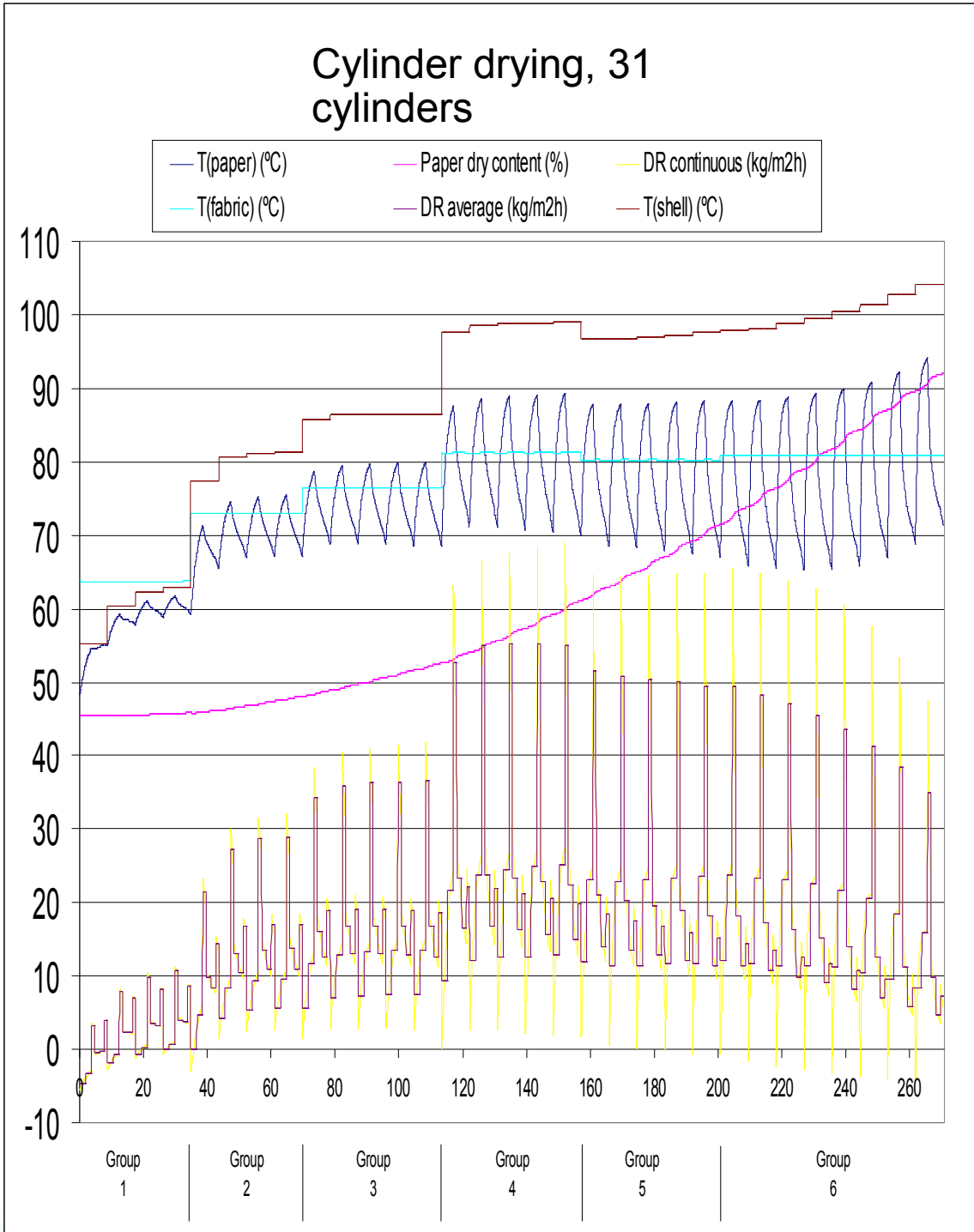
- ▼ Paper Nova drying simulator is implemented inside Balas
- ▼ Base unit in drying simulation is steam cylinder – vacuum roll pair
- ▼ Extensive parameterisation, e.g.
 - Paper properties
 - Cylinder specific properties
 - Number of cylinder pairs
 - Cylinder geometry
 - Heat transfer coefficients



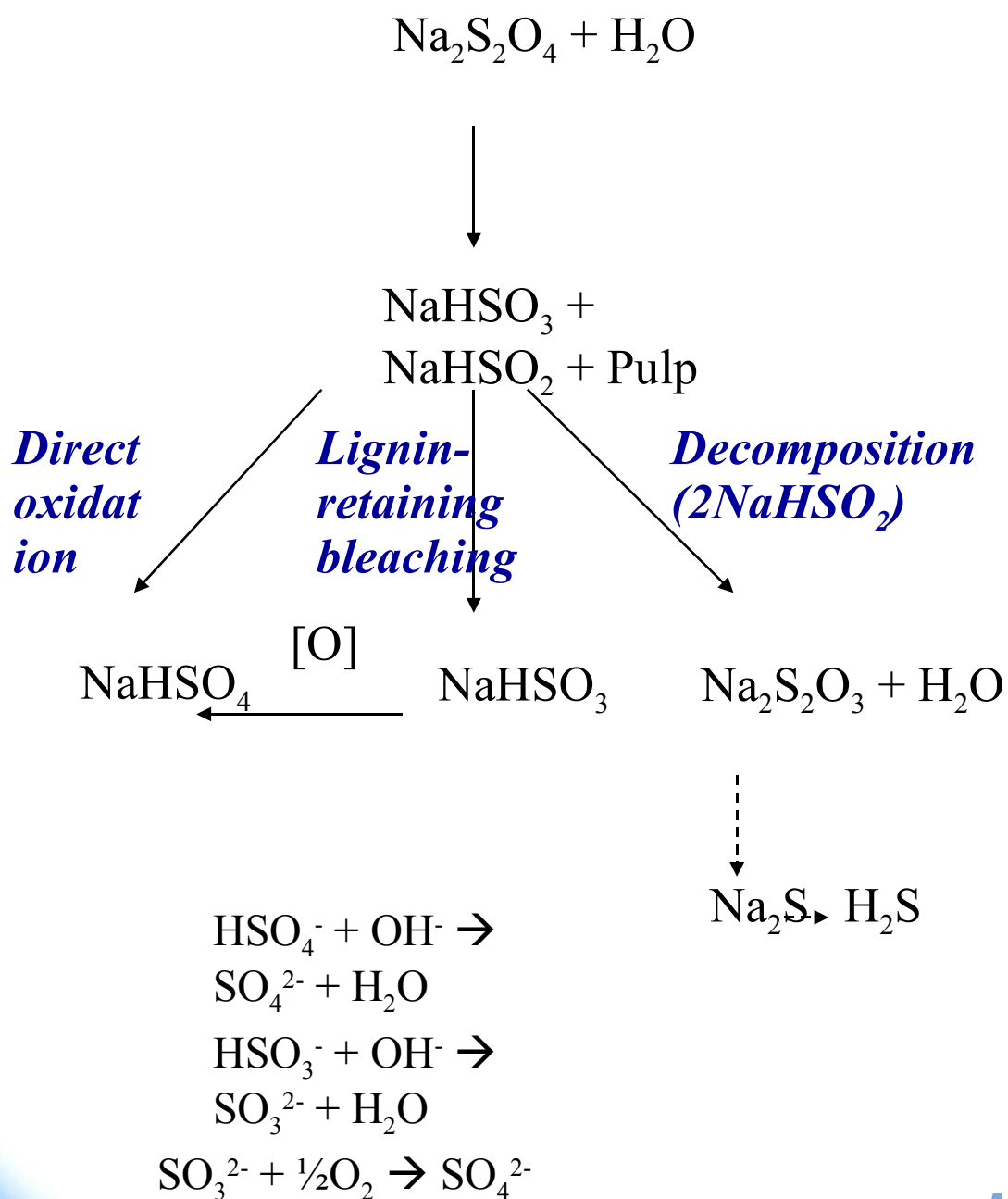
Material and energy balances in cylinder drying



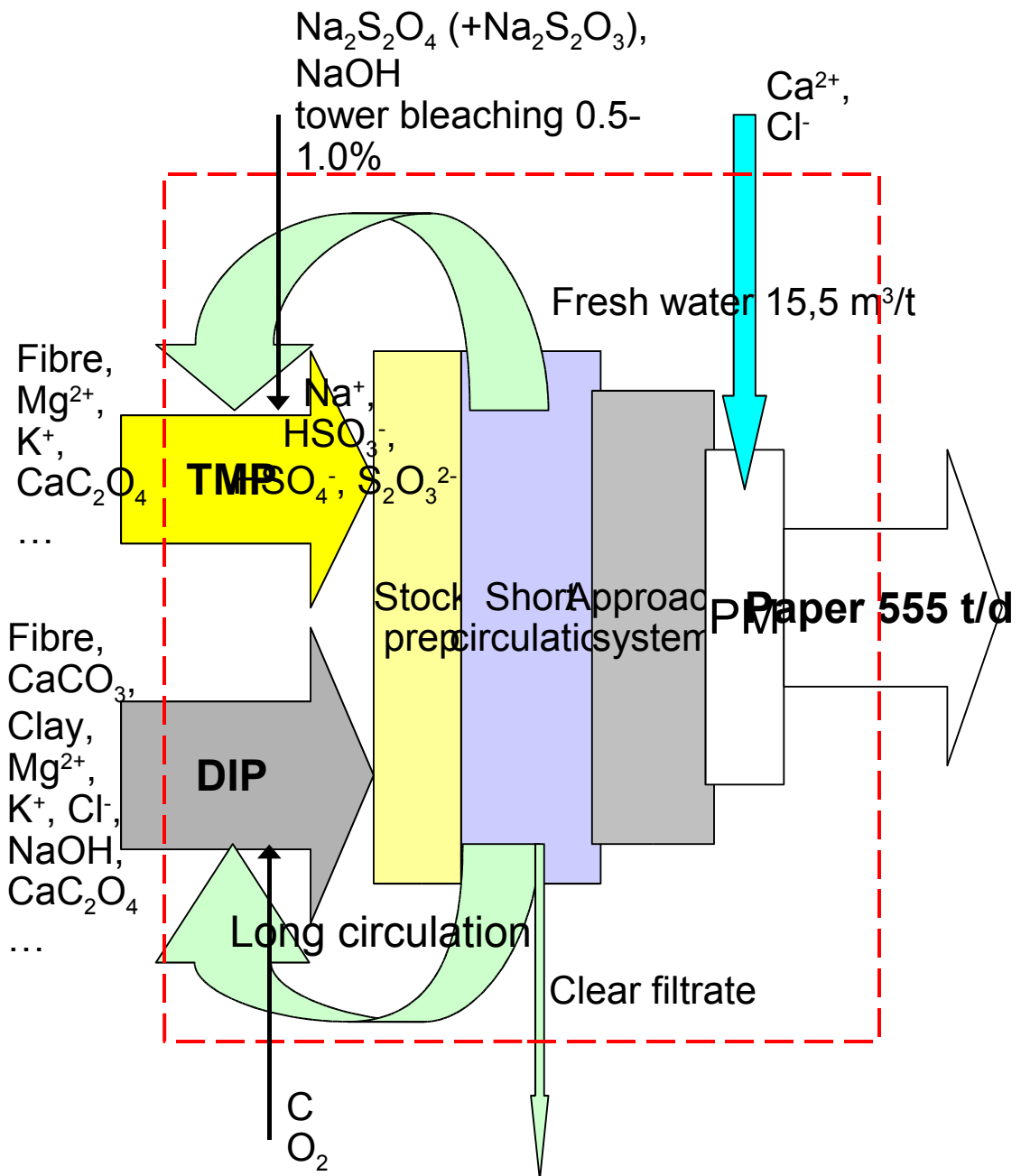
Drying rates and temperatures at drying section



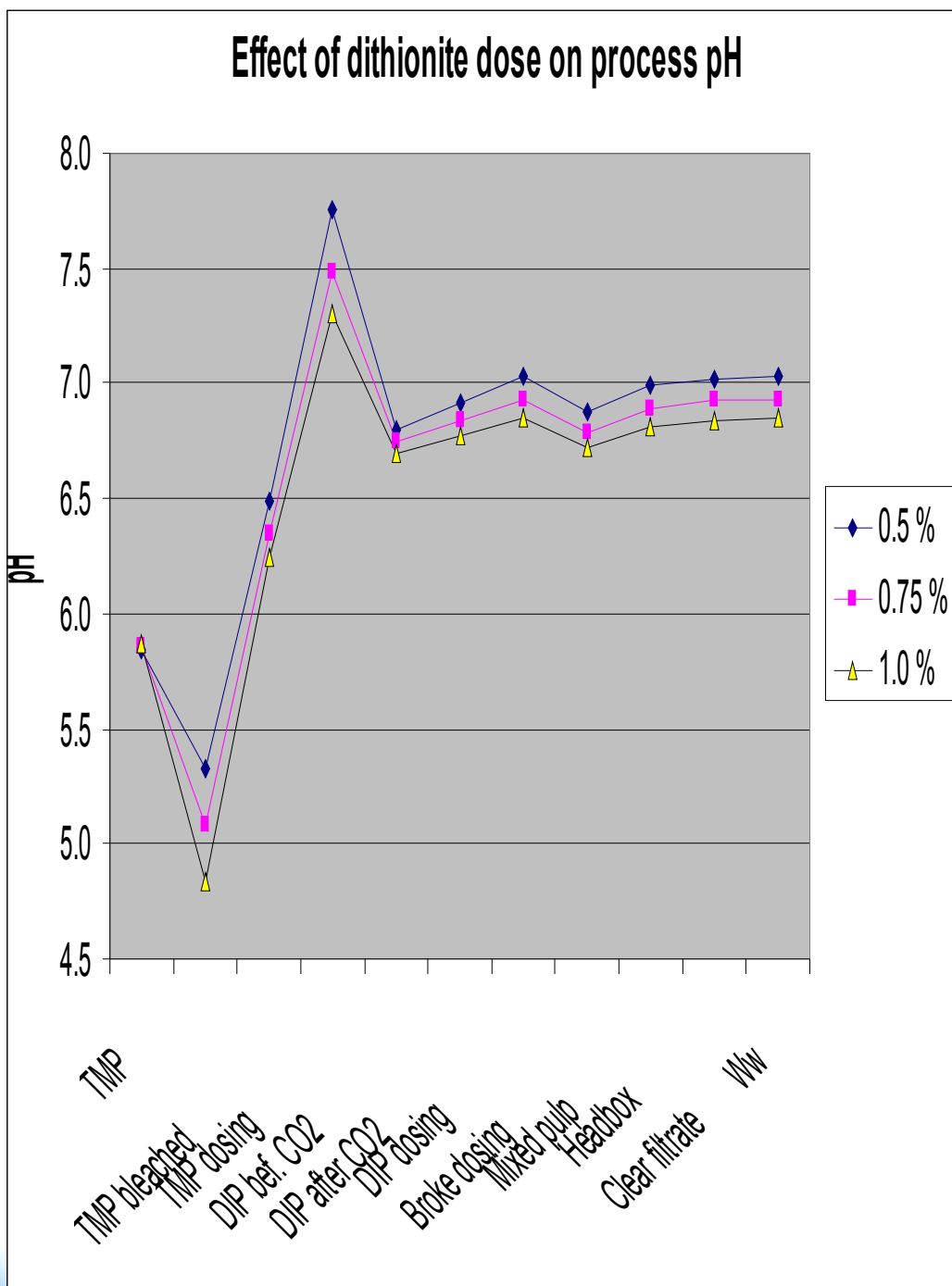
EXAMPLE – Dithionite (hydrosulphite) bleaching chemistry in newspaper manufacturing



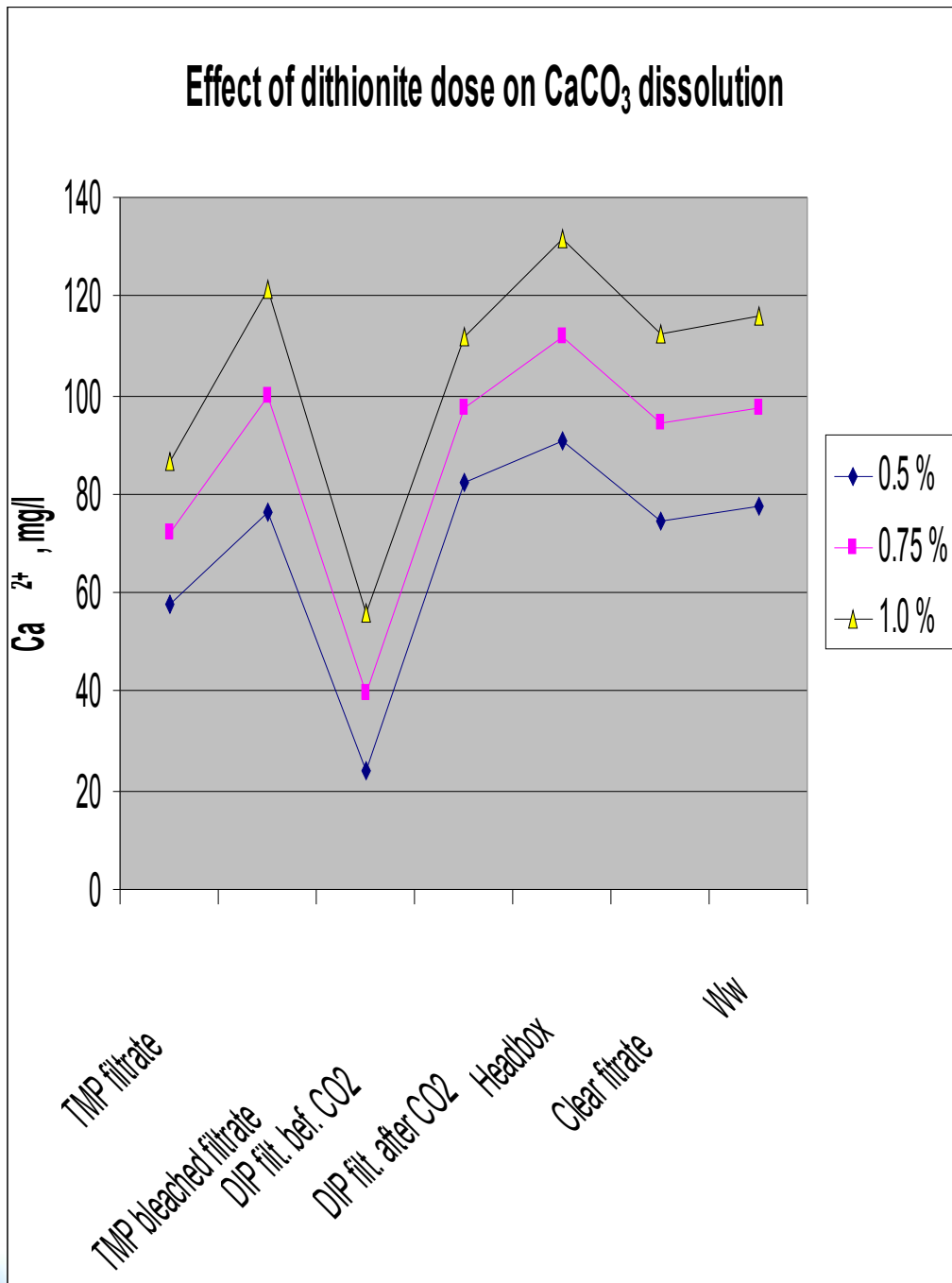
Simplified flowsheet of the process model



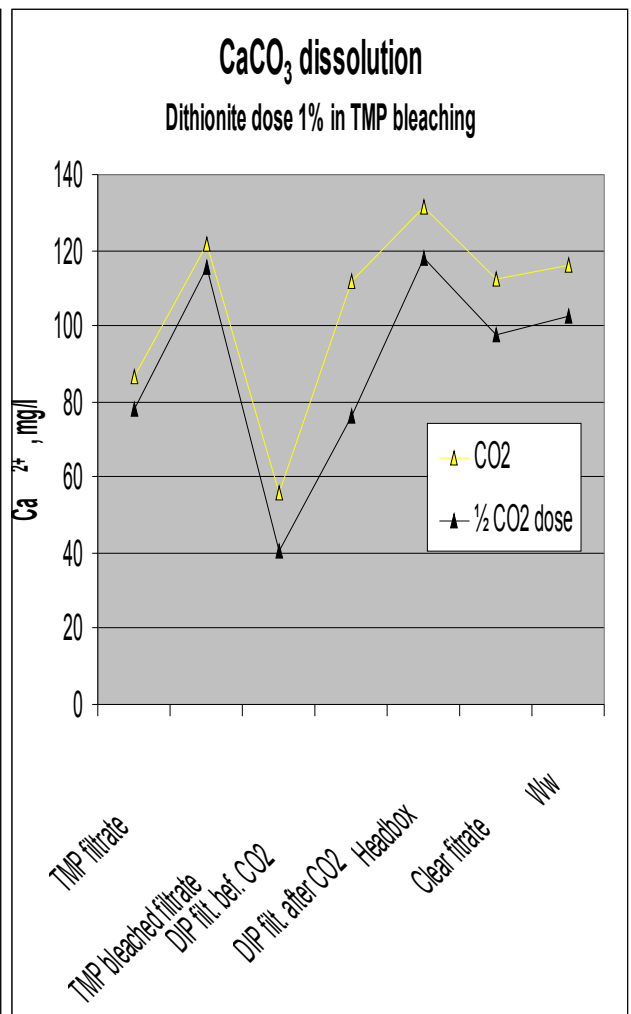
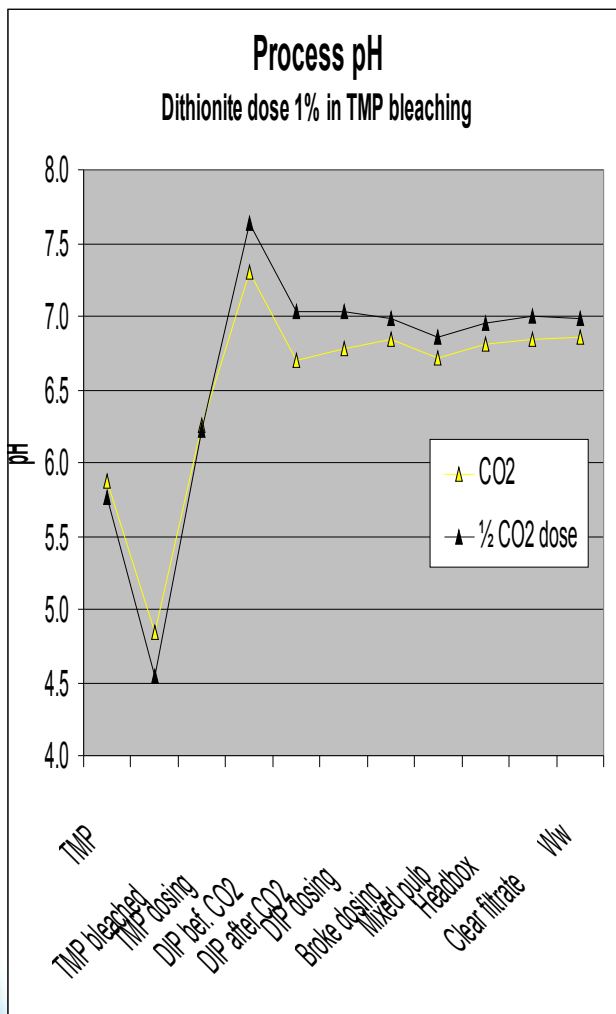
Effects of increasing dithionite dose in TMP tower



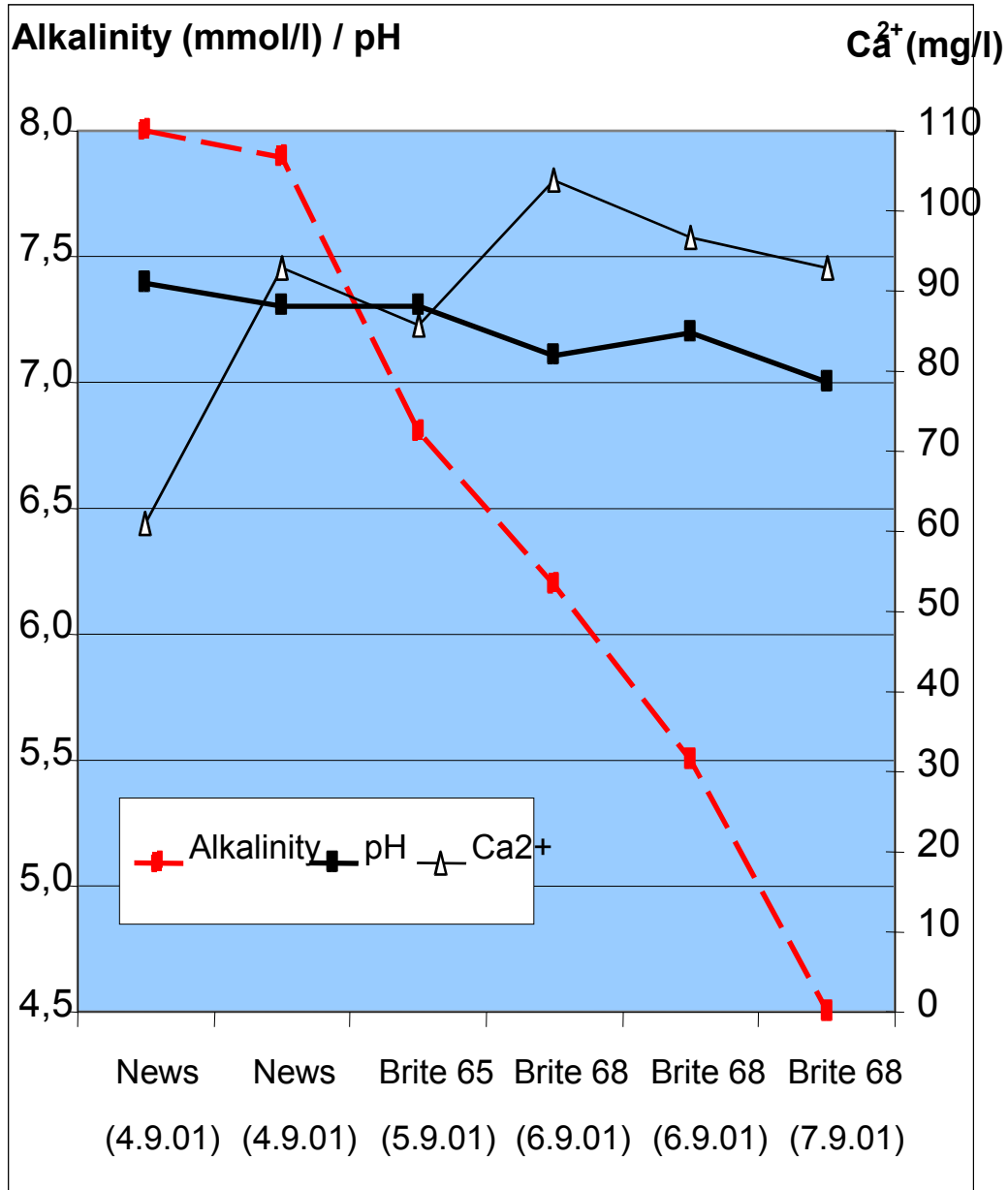
Effects of increasing dithionite dose in TMP tower



Effect of DIP CO2 acidification on process pH and soluble Calcium



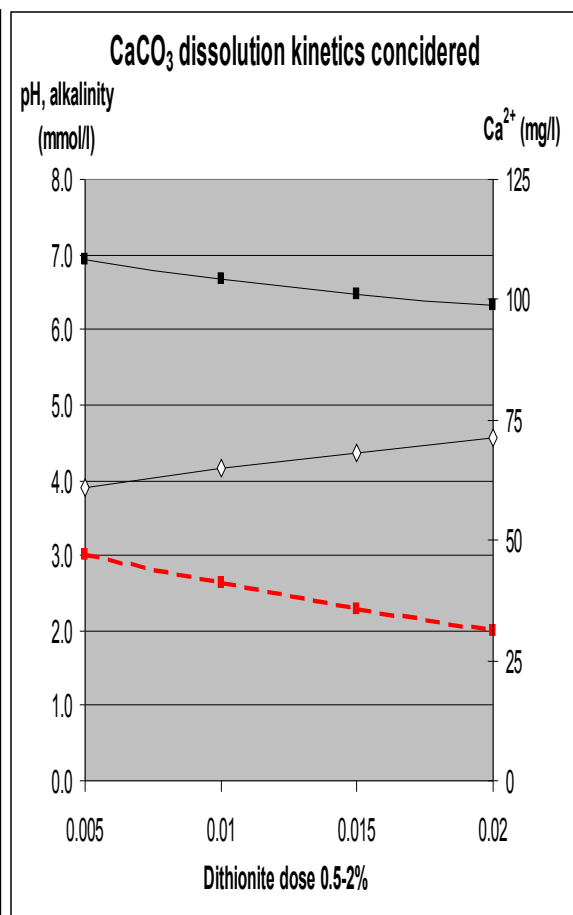
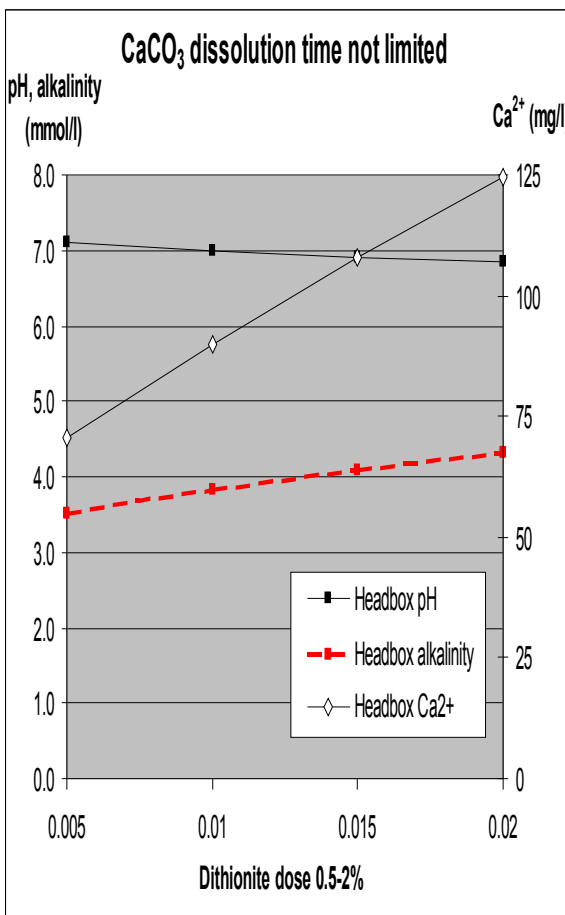
Measured values: Alkalinity, pH and Ca²⁺ in PM head box vs. brightness target of paper



PM uses 100% DIP; dithionite bleaching,
CO₂ acidification

Simulation:

Alkalinity, pH and Ca²⁺ in PM head box vs. dithionite dose



LIITE 4. FloSheet-ohjelman painikkeiden toiminnat.

Painikkeet 1-8. Perustoimintojen painikkeet.

1. Uusi tiedosto
 2. Avaa tiedosto
 3. Tallenna tiedosto
 4. Leikkaa valinta leikepöydälle
 5. Kopioi valinta leikepöydälle
 6. Liitä leikepöydän sisältö
 7. Tulosta avoin prosessikaavio
 8. Help-painike
-
9. Tehdyn toiminnon peruutuspainike
 10. Peruutetun toiminnon uudelleensuorituspainike. HUOM! Ei liitä virtauksia.

Painikkeet 11 ja 12

Painikkeet 13-17. Prosessikaavionäkymää muokkaavat painikkeet.

13. Painikkeen painamisen jälkeen on mahdollista valita prosessikaaviosta näkymä johon tarkennetaan
14. Tarkennus lähemmäksi
15. Kuva-ala taaemmaksi
- 16.
17. Kuvan alkuperäisen näkymän palauttava painike

Painikkeet 18-23. FloSheet-ohjelman asetuksien painikkeita.

18. Näytetäänkö tarttumapisteeet
19. Sallitaanko vain suorakulmaiset viivat (45 o vaihteluvälein.
20. Ruudun päivitys poistaa FloShetissä usein ruudulle muodostuvat virheelliset jäännökset poistetuista elementeistä
21. Näytetäänkö laitteiden liitäntäportit myös kun ei piirretä virtauksia
22. Käytettyjen kirjasintyyppien ja -kokojen muokkaus.
23. Connect-painike laitteita siirrettäessä virtausliitokset säilyvät

Painikkeet 24-29. Laitesymbolien käsittelypainikkeet.

24. Valinta-työkalu, jolla valitaan muokattavat laitteet ja virtaukset
- 25.-29. Valitun laitteen kääntöpainikkeet, jolla laitetta tai virtaa voidaan kääntää akseleidensa ympäri

Painikkeet 30-35. Työkaluja objektien lisäämiseksi prosessikaavioon.

30. Tekstityökalu
31. Laitesymbolikirjastot alavetovalikkoina

32. Laitesymbolikirjastot avautuvat selattaviksi erilliseen selattavaan ikkunaan
33. Lisää virtaussuunnan osoittavia nuolia virtauksiin
34. Virtauksen piirtoon käytettävä työkalu
35. Auto-Connect-piirtotyökalu, jolla voidaan virtaukset yhdistää päätepisteitä napsauttamalla. FloSheet muodostaa virtaukselle reitin, jota käyttäjä voi jälkikäteen muokata.

Painikkeet 36-38. Virtausten piirtoviivojen ominaisuuksia alasvetovalikoissa.

Painikkeet 39-40. Laitesymbolikirjastojen painikkeet. Laitesymbolikirjastot avautuvat näihin alasvetolaatikoihin napsautettaessa painiketta 31.

39. Avoimen laitesymbolikirjaston nimi
40. Avoimen laitesymbolikirjaston sisältämät laitteet

Painike 41. Järjestää avoimena olevat prosessikaaviot.

LIITE 5. Flosheetin valikot

FloSheetin valikkojen sisältö on esitetty seuraavissa taulukoissa, joissa on myös esitetty valikoiden toimintojen kuvaukset.

FloSheet-ohjelman File-valikko, työkalut tiedostojen käsittelyyn

New	> Drawing: Aloita uuden prosessikaavion piirtäminen > Browse templates: Valitse valmis pohja, joka sisältää laitesymbolit > Project: Aloita uusi projekti, johon voidaan liittää useita prosessikaavioita
Open	Avataan luotu prosessikaavio
Open Symbol Library	Avataan symboli kirjasto
Close	Sulje avoimena oleva prosessikaavio
Save	Tallenna avoimena oleva prosessikaavio
Save as	Tallenna avoimena oleva prosessikaavio nimellä...
Autosave	Automaattinen tallennus (ei toimi kunnolla, käyttöä ei suositella)
Open project	Avaa projekti
Save project	Tallenna projekti
Save project as	Tallenna projekti nimellä
Add file to project	Lisää prosessitiedosto projektiin
Add current to project	Lisää avoimena oleva prosessitiedosto projektiin
Remove from project	Poista prosessitiedosto projektista
Page setup	Määrittää tulostuksessa käytettävän paperikoon (valitun tulostusalueen reunojen osoittajana prosessikaavion taustalla näkyvä suorakulmio)
Print	Tulosta avoin prosessikaavio
Print setup	Muokkaa tulostuksen asetuksia
Send	Lähetä prosessikaavio
Lista avoimista prosessikaavioista	
Exit	Sulje FloSheet-ohjelma, sulkee myös Balasin. Tämä on suositeltava tapa sulkea FloSheet ja Balas.

FloSheet-ohjelman Edit-valikko, prosessikaavion muokkaukseen liittyviä toimintoja

Undo	Peru viimeisen toiminto
Redo	Tee uudelleen peruttu toiminta
Finish	Muutokset valmiit
Cancel	Peruuta muutos
Cut	Leikkaa merkityt osat prosessikaaviosta
Copy	Kopioi leikepöydälle merkityt osat prosessikaaviosta
Paste	Liitä muistista sinne tallennetut osat prosessikaaviosta

Paste Special	Liitä muistiin tallennetut osat prosessikaaviosta käyttäen erityismuotoilua
Delete	Poista merkityt osat
Move Back	Siirrä merkityt objektit yhden tason taaemmaksi prosessikaaviossa
Move Forward	Siirrä merkityt objektit yhden tason edemmäksi prosessikaaviossa
Move to Back	Siirrä merkityt objektit prosessikaavion takimmaiselle tasolle
Move to Front	Siirrä merkityt objektit prosessikaavion etummaiselle tasolle
Edit snappoints	Muokkaa
Change Symbol	Vaihda laitteen symbolia
Replace Symbols	Korvaa laitteen symboli toisella
Edit Symbol	Muokkaa laitesymbolia
Find text	Etsi teksti
Select All	Valitse kaikki prosessikaaviossa
Deselect All	Poista valinta kaikista prosessikaaviossa
Insert New Object	Lisää uusi objekti
Links	Linkit
Object	Objekti

FloSheet-ohjelman View-valikko, FloSheetin näkymän muokkaamiseen liittyviä toimintoja

Show Toolbar	Määritä, näytetäänkö FloSheetin työkalupalkki
Status Bar	Määritä, näytetäänkö FloSheetin tilapalkki ikkunan alaosassa
Zoom	Lähennä tai loitonna
Grid	
Rulers	
Snap Points	Määritä, näytetäänkö prosessikaaviossa tartuntapisteet
Screen Refresh	Päivitä näyttö

FloSheet-ohjelman Select-valikko

Selection Control	Valinnan hallinta
Tools	Työkalut
Shapes	Muodot
Add Snap Points	Lisää tarttumapisteitä
Rotate	Käännä
Build Symbol in	Rakenna symboli
Rebuild	Rakenna uudelleen
Breakup Symbol	Hajoita symboli
Layers	Muokkaa kerroksia

FloSheet-ohjelman Format-valikko

Layers and Libraries	Kerrokset ja kirjastot
Text	Teksti
Lines and Streams	Viivat ja virtaukset
Colours	Värit virtauksille
Preferences	Avaa Asetukset-ikkunan, jossa voidaan muokata FloSheetin asetuksia

FloSheet-ohjelman Window-valikko

New Window	Uusi ikkuna
Cascade	Pinoa ikkunat selattavaan muotoon
Tile Horizontally	Järjestä ikkunat horisontaalisesti
Tile Vertically	Järjestä ikkunat vertikaalisesti
Arrange Icons	Järjestä ikonit
Lista avoimista prosessikaavioista	

FloSheet-ohjelman Help-valikko

Help Topics	Aputiedoston aihevalikko
About FloSheet	Tietoja FloSheetistä

LIITE 6. Balasin valikot

Balas-ohjelman File-valikko

File-valikko sisältää prosessikaaviotiedostojen avaamiseen, sulkemiseen ja tallentamiseen sisältyviä toimintoja.

Valikon komento	Komennon toiminnon kuvaus
Open	Avaa prosessitiedosto
Close	Sulje prosessitiedosto
Save	Tallenna prosessitiedosto
Save as ...	Tallenna prosessitiedosto nimellä
Save Subprocess as ...	Tallenna aliprosessi nimellä
Exit	Sulje Balas-ohjelma. On kuitenkin suositeltavaa sulkea Balas FloSheet-ohjelman kautta lopettamalla FloSheet, jonka sulkeminen sulkee myös Balasin

Balas-ohjelman Output-valikko

Output-valikko sisältää tulosten esittämiseen ja muutosten seuraamiseen liittyviä toimintoja.

Valikon komento	Komennon toiminnon kuvaus
List Units and Streams...	Avaa "List streams and units"-ikkunan, jossa esitetään laitteet ja virtaukset, jotka esiintyvät prosessikaaviossa. "Streams"-välilehdellä esitetään virtaukset ja "Units"-välilehdellä prosessilaitteet. "List from"-kohdassa voidaan valita näytetäänkö vain aktiivisessa laskentatapauksessa esiintyvät laitteet ja virtaukset valintaruudulla "Case" vai kaikki prosessikaavion sisältämät laitteet ja virtaukset valintaruudulla "Process". Laite tai virtaus valitaan napsauttamalla sitä kahdesti jolloin avautuu kyseisen laitteen tai virtauksen ikkuna, jossa sen parametrejä voidaan muokata. Kun napsautetaan "Show selected"-kohtaan rasti, vilkkuu kerran naputettuna valittu laite tai virtaus prosessikaaviossa, jolloin se on helppo havaita.
Clear Balas Messages	Tyhjentää tulostuksen Balasin "Simulator messages" ja "Balas messages"-ikkunoista
Design Progress	Seuraa määritellyn suunnittelumuuttujan arvon muutosta simulaation aikana
Parameter Progress	Seuraa laitteiden ja virtausten muuttujien arvojen muutoksia simulaation aikana

Balas-ohjelman Simulator-valikko

Valikon komento	Komennon toiminnon kuvaus
Check Topology	Tarkastaa luodun prosessikaavion topologian. Virheet ilmoitetaan Balasin "Simulator messages"-ikkunassa
Select Case	Valitaan haluttu laskenta-case
Edit Active Case	Muokataan avointa laskenta-casea
Initialisation	Alustus, määritellään tulovirtaukset ja iterointivirtaukset

Run	Ajetaan simulaatio käyttämällä valittua prosessia ja casea
Synchronize	Synkronoi
Delete QN Matrix	Poistetaan aikaisemman simuloinnin luoma QuasiNewton-matriisi
Flash Feed/Iteration Streams	Alusta syöttö/iteraatiovirtaukset

Balas-ohjelman Options-valikko

Valikon komento	Komennon toiminnon kuvaus
Database Manager	Avaa Balasin tietokannan hallinnan. Täällä voidaan tarkastella ja muokata olemassa olevia symboli-, aine- ja laskentatietokantoja sekä syöttää näihin uusia tietoja. Balasin oletusainetietokantoja ei voida kuitenkaan muuttaa, omia aineita varten voidaan luoda oma ainetietokanta.
Save Window Position on Exit	Tallentaa Balas-ikkunan sijainnin, kun Balas suljetaan.
Save Message Window Split on Exit	Tallentaa Balas-ikkunan "Simulator messages" ja "Balas messages" laatikoiden jaon, kun Balas suljetaan.
Number of digits Displayed	Avaa "Change option"-ikkunan, jossa voidaan määrittellä, kuinka monen desimaalin tarkkuudella luvut esitetään virtauksissa ja laitteissa.
Define Output Styles	Määrittellään virtauksien tietojen ilmaisussa käytetyt luokat
Database Trace	Hyödyllinen vain ohjelman kehittäjille.
Simulator Trace	Hyödyllinen vain ohjelman kehittäjille.
Show Debug Output	Hyödyllinen vain ohjelman kehittäjille.
Show Stream/Unit Colours in FloSheet	Määrittää näytetäänkö virtauksille ja laitteille määritellyt värit. Tällä hetkellä ei kuitenkaan toimi.
Show Flow Data in FloSheet	Määrittää päivitetäänkö virtausten tietoja FloSheetissä näytettävissä virtaustiedoissa
Show Message Objects in FloSheet	Määrittää korostetaanko napsautettua viestiobjektia virtauskaaviossa

Balas-ohjelman Window-valikko

Valikon komento	Komennon toiminnon kuvaus
Close Stream Dialogs	Suljetaan virtausikkunat
Close Unit Dialogs	Suljetaan laiteikkunat
Close All Windows	Suljetaan kaikki ikkunat
Lista avoimista prosessikaavioista	Listaa voidaan käyttää siirryttäessä istunnolla avattujen prosessikaavioiden välillä

Balasin Help-valikko

Valikon komento	Komennon toiminnon kuvaus
Contents	Aputiedoston sisältö
Balas Home Page	Avaa VTT:n Balas-kotisivun verkkoselaimeen
About	Tietoja Balasista

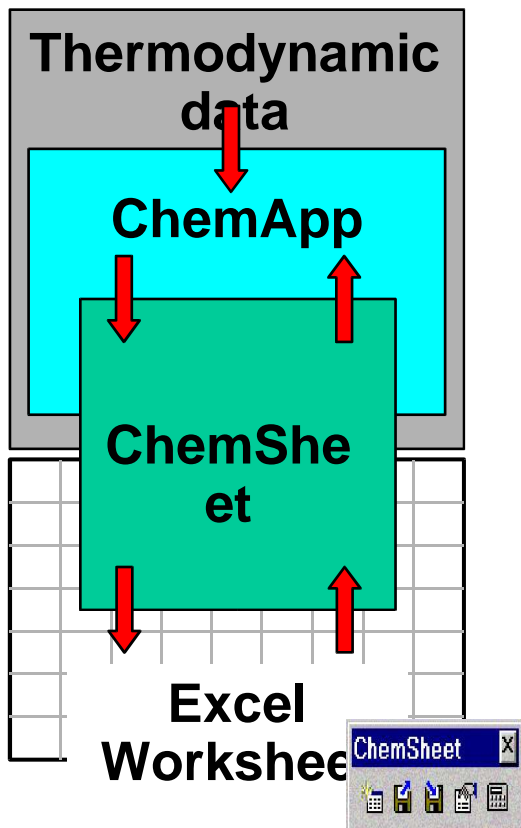
Process simulation – a tool for studying the impacts of varying process conditions and chemical dosing on wet end chemistry

Anna Kalliola, Risto Pajarre, Pertti Koukkari,
VTT Processes, Group of Chemical
Processing
Technical Research Centre of Finland
P.O.Box 1602, 02044-VTT, Finland
anna.kalliola@vtt.fi

Overview

- Thermodynamic multiphase chemistry calculation
- Multiphase chemistry in multi-state process simulation
- Case studies of newspaper manufacturing process
 - Ca-chemistry
 - Corrosion risk induced by dithionite bleaching
- Summary

Thermodynamic multiphase chemistry calculation



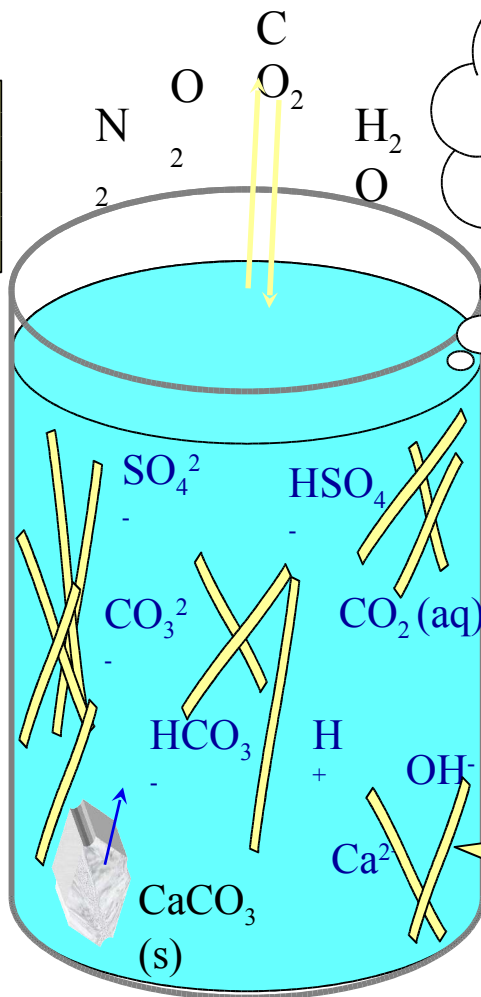
Multiphase theory for pulp suspensions

T, P constants and $\Delta_r G = 0$

$\Leftrightarrow \min(G)$

Electroneutrality within every phase

Reaction & mass transfer rates when applicable

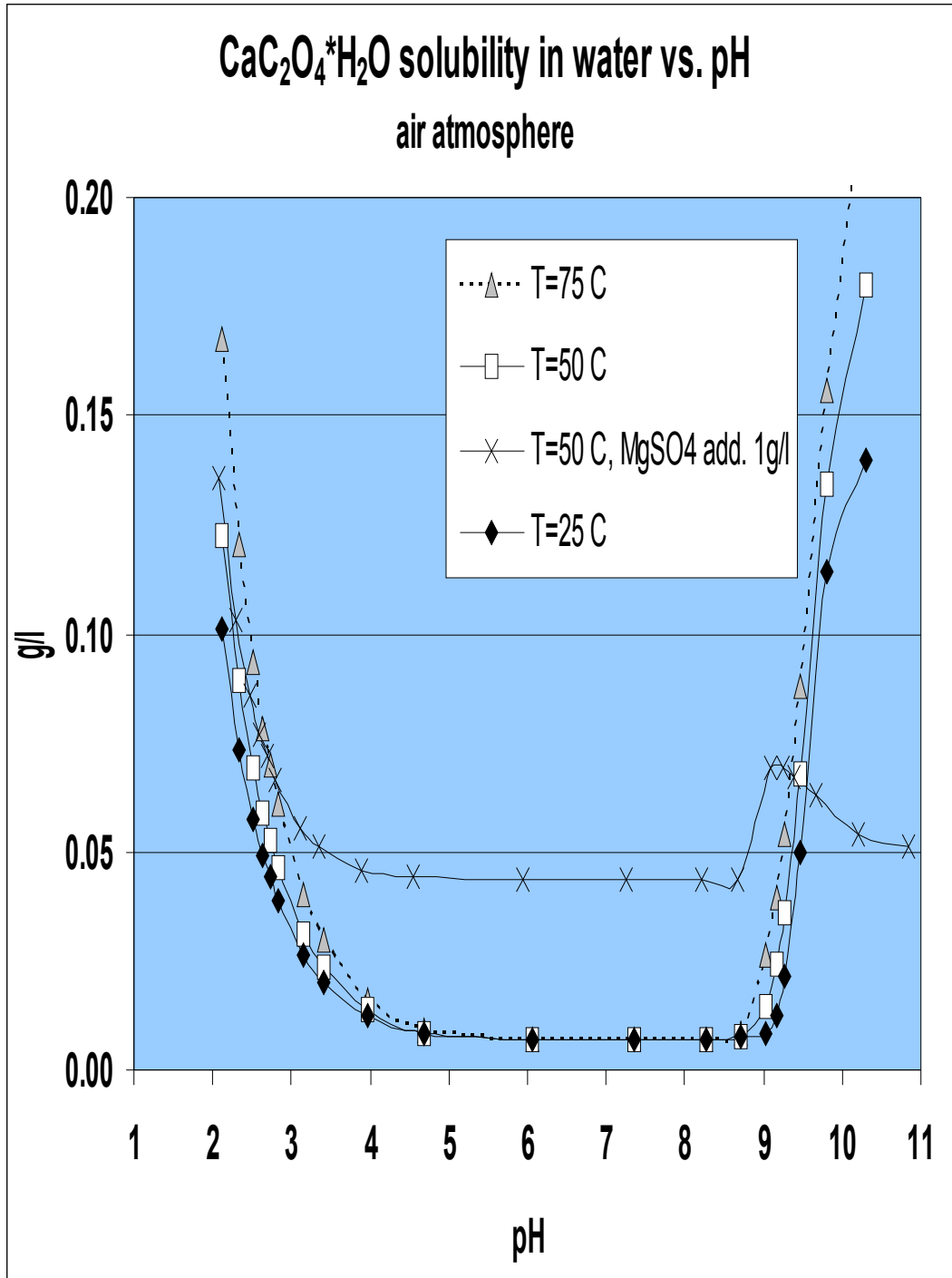


Donnan-rule for ion exchange of fibres

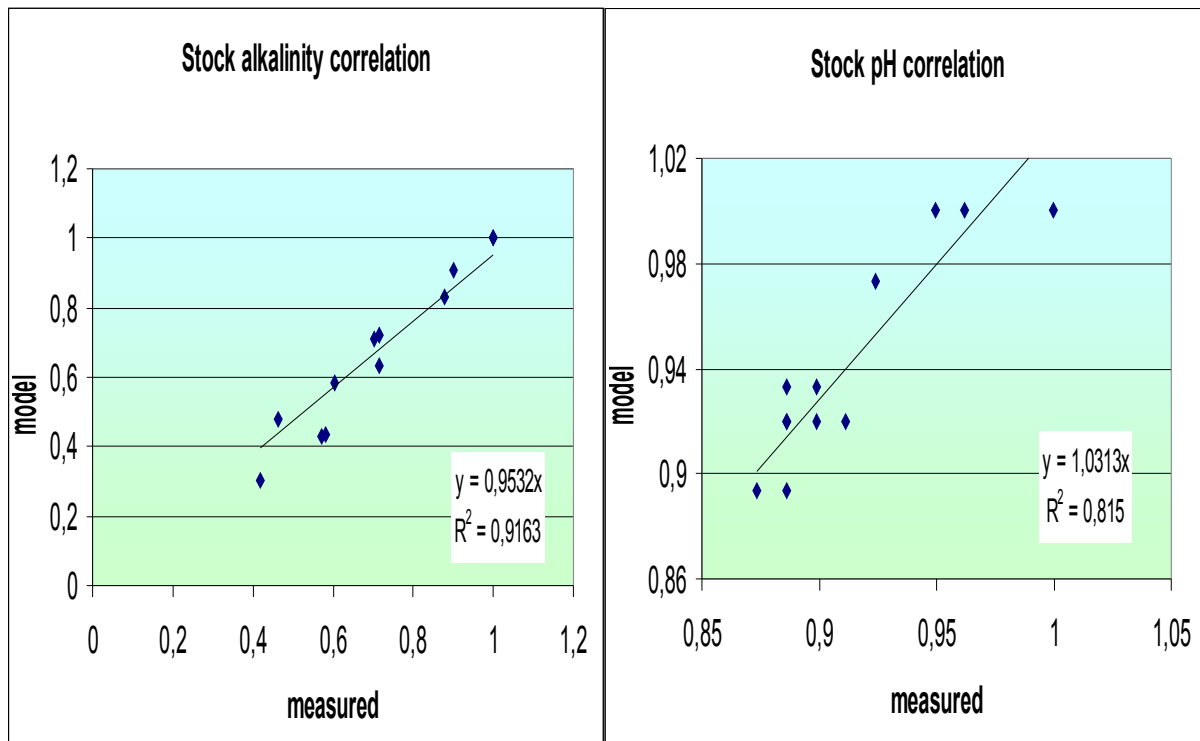
Stability & dissociation constants (acid groups, chelants etc.)

Chemical equilibrium btw. all phases

Example of multiphase calculation



Reliability of the multiphase calculations



- Multiphase chemistry calculation has been used e.g. in determining buffering aid doses for neutral PMs
- In mill runs, good correlation between measured and calculated alkalinity and pH values were achieved
 - results from incoming furnishes and broke, related to the maximum value of each measured set
 - narrow range of pH variation indicates successful buffering (non-stoichiometric bicarbonate addition)

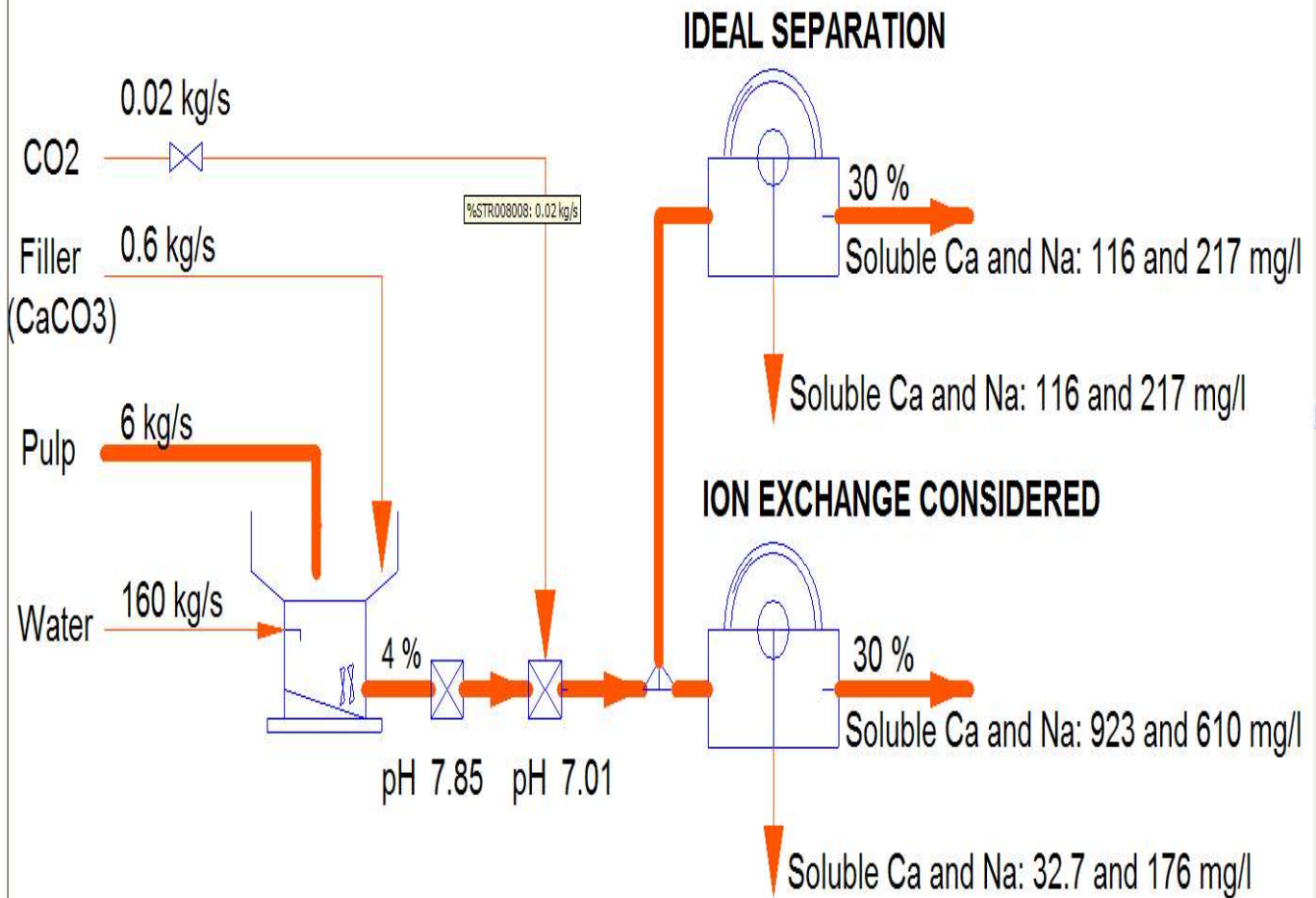
Multiphase chemistry in multi-state process simulation



Chemistry calculation in process simulation

- Process simulation software – Balas[®]
 - used in Finnish P&P industry for mass and energy balance simulation
 - calculation modes: steady-state simulation, design, optimisation, parameter estimation, dynamic simulation
 - Excel interface
 - ChemApp, multiphase chemistry calculation embedded in the software in unit operation level
 - model library for chemical components
 - includes 3 phases: solid, liquid, vapour
 - water content of the fibres assumed constant and part of the liquid phase
 - ion exchange phenomena of fibres

The effect of ion exchange between fibre and bulk liquid phase on solid-liquid separation



Unit - R_2b

Parameters | Parameter constraints | Electricity

Name: R_2b | Module: ChemApp-reactor

Input values

Name	Value	M...	M...	U...
Second aq. phase	Yes			
Solid comp. (Softwood), water retention	1.3	0	100	kg
Acid groups...				
[Acid3.4H(aq)], concentration	149	0	1000	mm
[Acid3.4(aq)], concentration	0	0	1000	mm
[Acid9.0H(aq)], concentration	57	0	1000	mm
[Acid9.0(aq)], concentration	0	0	1000	mm

Calculated values

Name	Value	Unit
pH	7.0092	
Carbonate alkalinity	9.17	mmol/l
Heat balance	-13.7	KW
Conductivity	0	µS/cm

OK | Cancel | Apply | Help

%STR008051 - process stream

Name: %STR008051 | Stream Class: %CLASS22

From unit: R_2b | port: 1 | Output style: From class

To unit: %UNI000003 | port: 3 | Reference to:

Phase independent parameters			Phase dependent parameters				
Name	Value	Unit	Name	Solid	Liquid	Vapour	Unit
Temperature	44.915	C	Flow	6.5536	160.47	0	kg/s
Pressure	101	kPa	Enthalpy	20197	182.16	0	kJ/kg
Total flow	167.02	kg/s	Entropy	4.1383	0.63799	0	kJ/kgK
Dry content	4.0244	%	Enthalpy flow	132362	29232	0	kW
Consistency	3.9237	%					
Enthalpy	967.48	kJ/kg					
Enthalpy flow	161593	kW					

Chemical components

Name/Formula	Solid	Liquid	Vapour
H(+aq)	0	0.00014	0
OH(-aq)	0	108.15	0
Ca(+2aq)	0	115.81	0
CO2(aq)	0	67.22	0
CO3(-2aq)	0	0.47331	0
HCO3(-aq)	0	539.37	0

Component: Names (selected), Formulas, Flows, Fractions, PPM

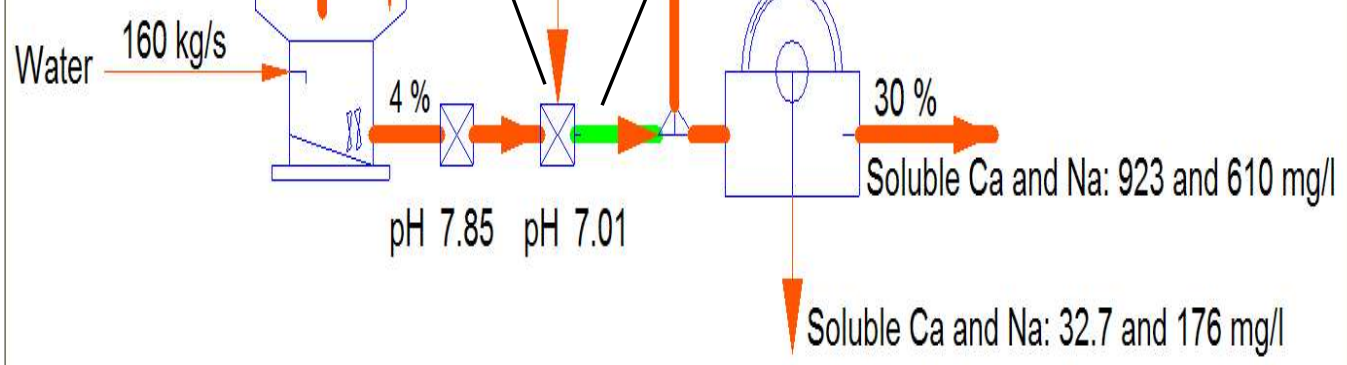
OK | Cancel | Help

CO2
Filler (CaCO3)
Pulp

217 mg/l

Soluble Ca and Na: 116 and 217 mg/l

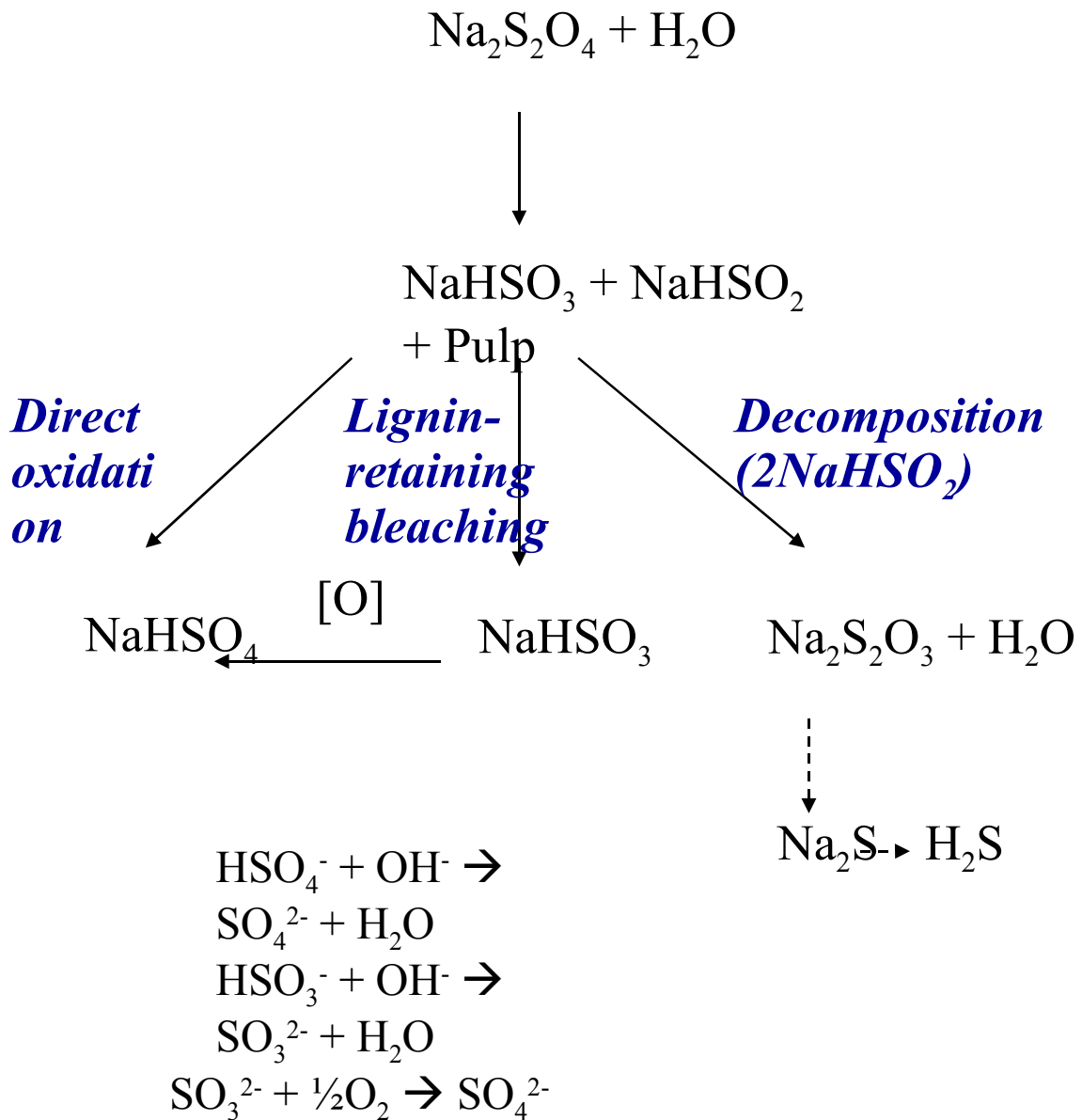
ION EXCHANGE CONSIDERED



Case studies

Simulation of newspaper manufacturing process chemistry

Dithionite (hydrosulphite) bleaching chemistry



Prediction of localised corrosion

- Thiosulphate pitting occurs most readily when

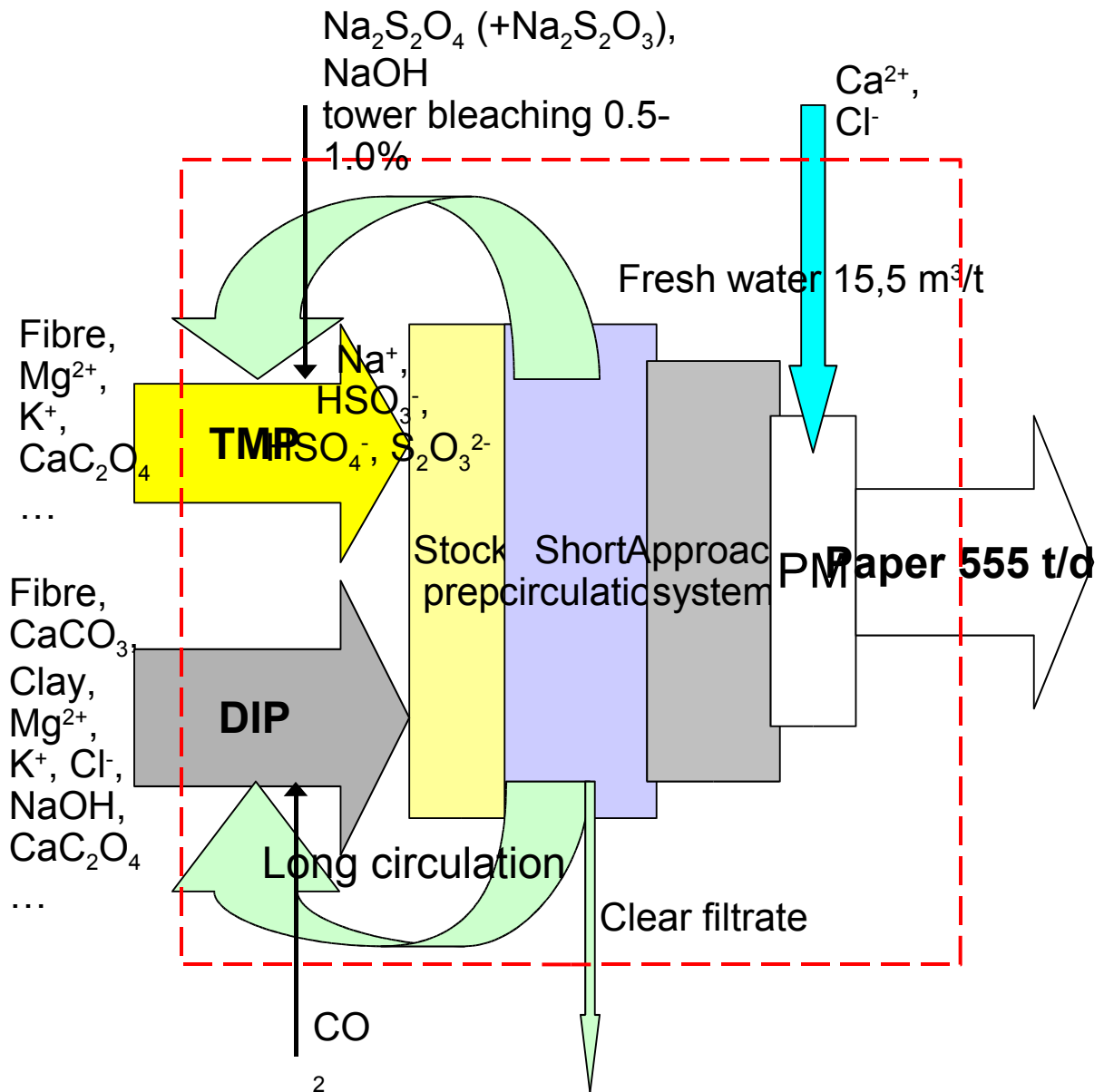
$$([\text{SO}_4^{2-}] + [\text{Cl}^-]) / [\text{S}_2\text{O}_3^{2-}] = 10-30 \quad \text{Newman}$$

R.C, et.al., 1989

$$[\text{SO}_4^{2-}] / [\text{S}_2\text{O}_3^{2-}] = 6-23 \quad (1,6-58) \text{ Garner, A., 1985}$$

- Thiosulphate concentration increases with
 - dithionite decomposition during storage
 - decomposition rate is a function of T, pH, $[\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_4]$, $[\text{HSO}_3^-]$, $[\text{SO}_3^{2-}]$
 - poor bleaching practices: overdose of dithionite, poor mixing, insufficient retention time, too low pH

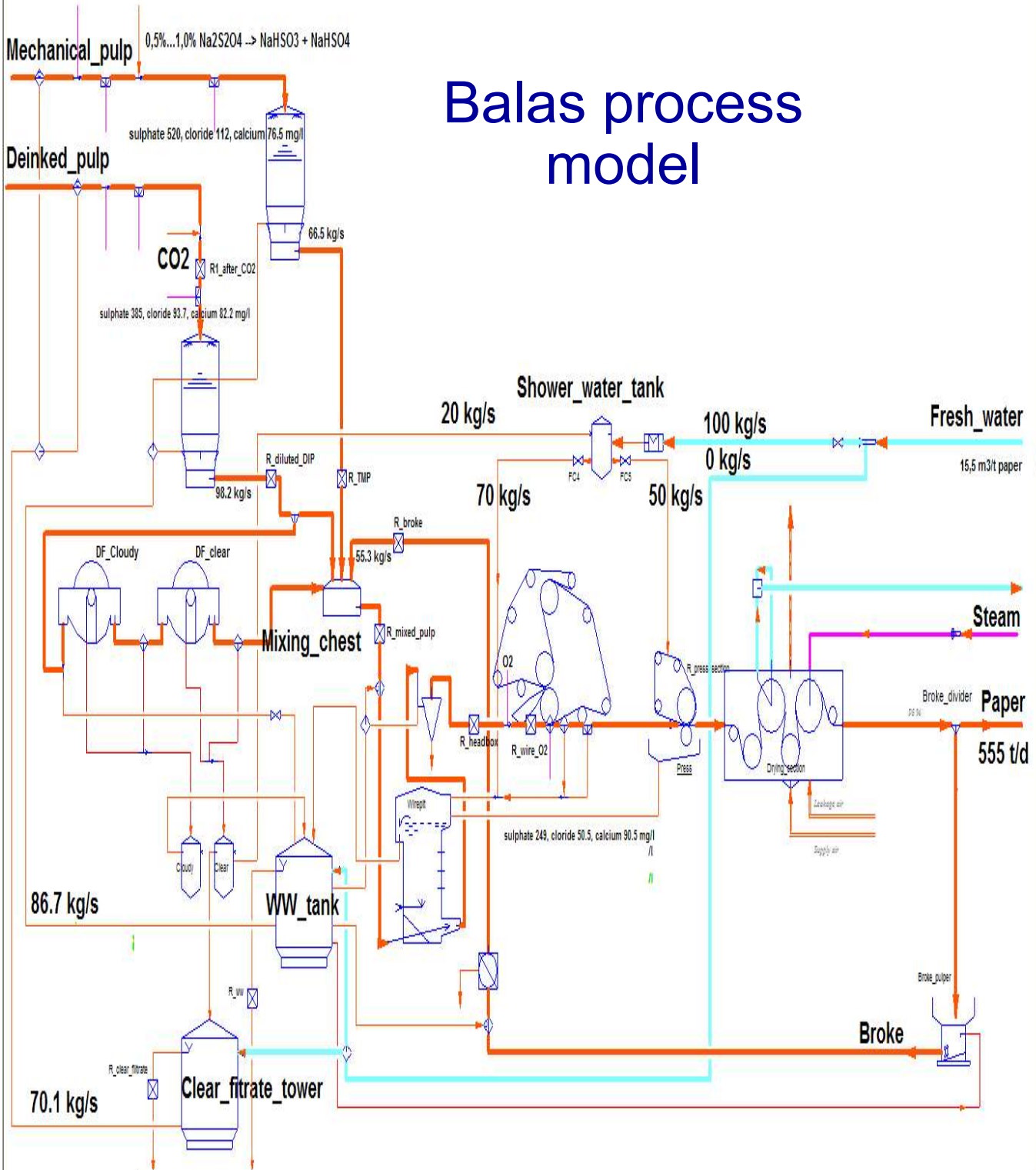
Simplified flowsheet of the process model



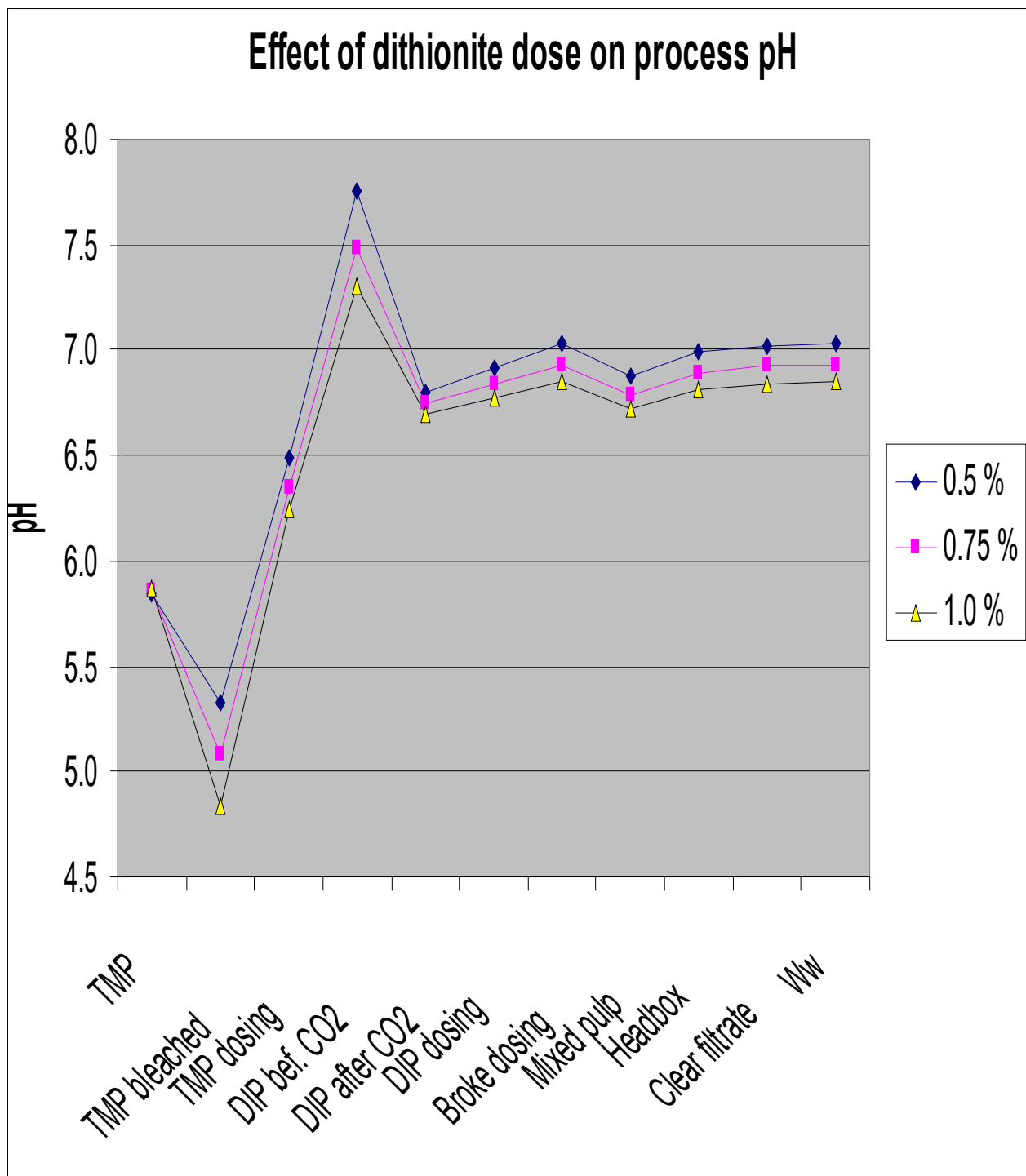


Process Equipment [None]

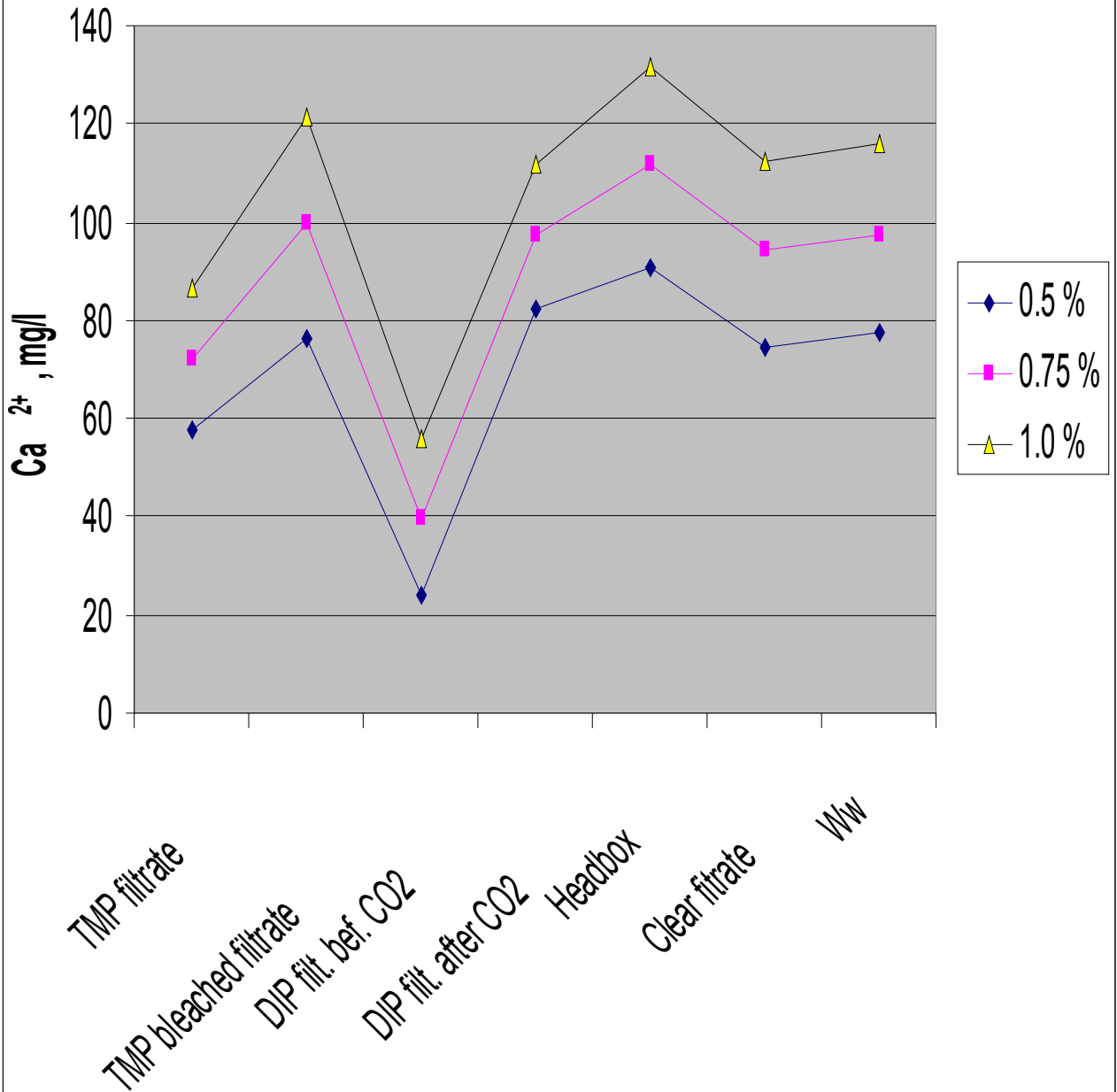
Balancing process model



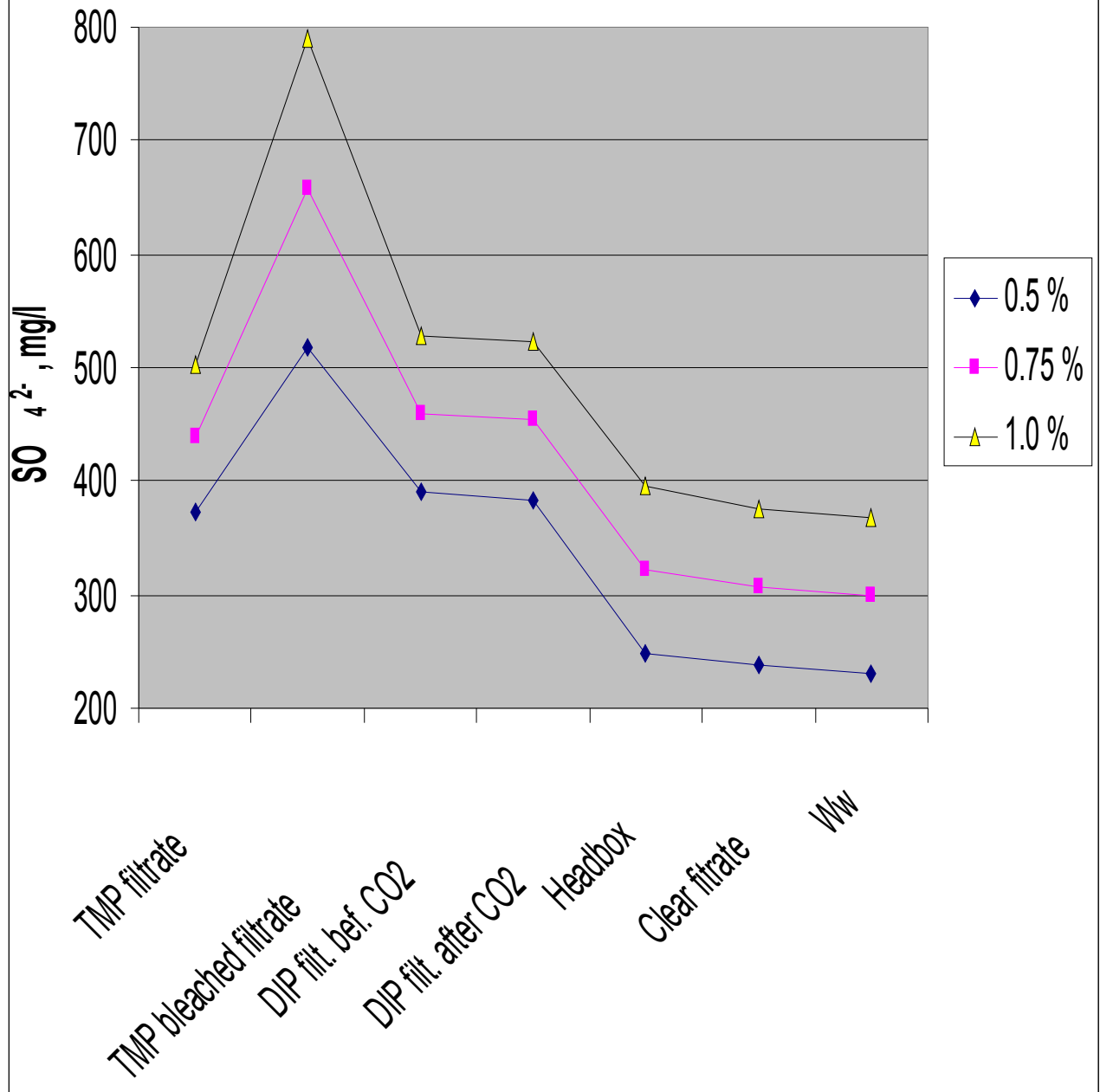
Effects of increasing dithionite dose in TMP tower bleaching on...



Effect of dithionite dose on CaCO_3 dissolution

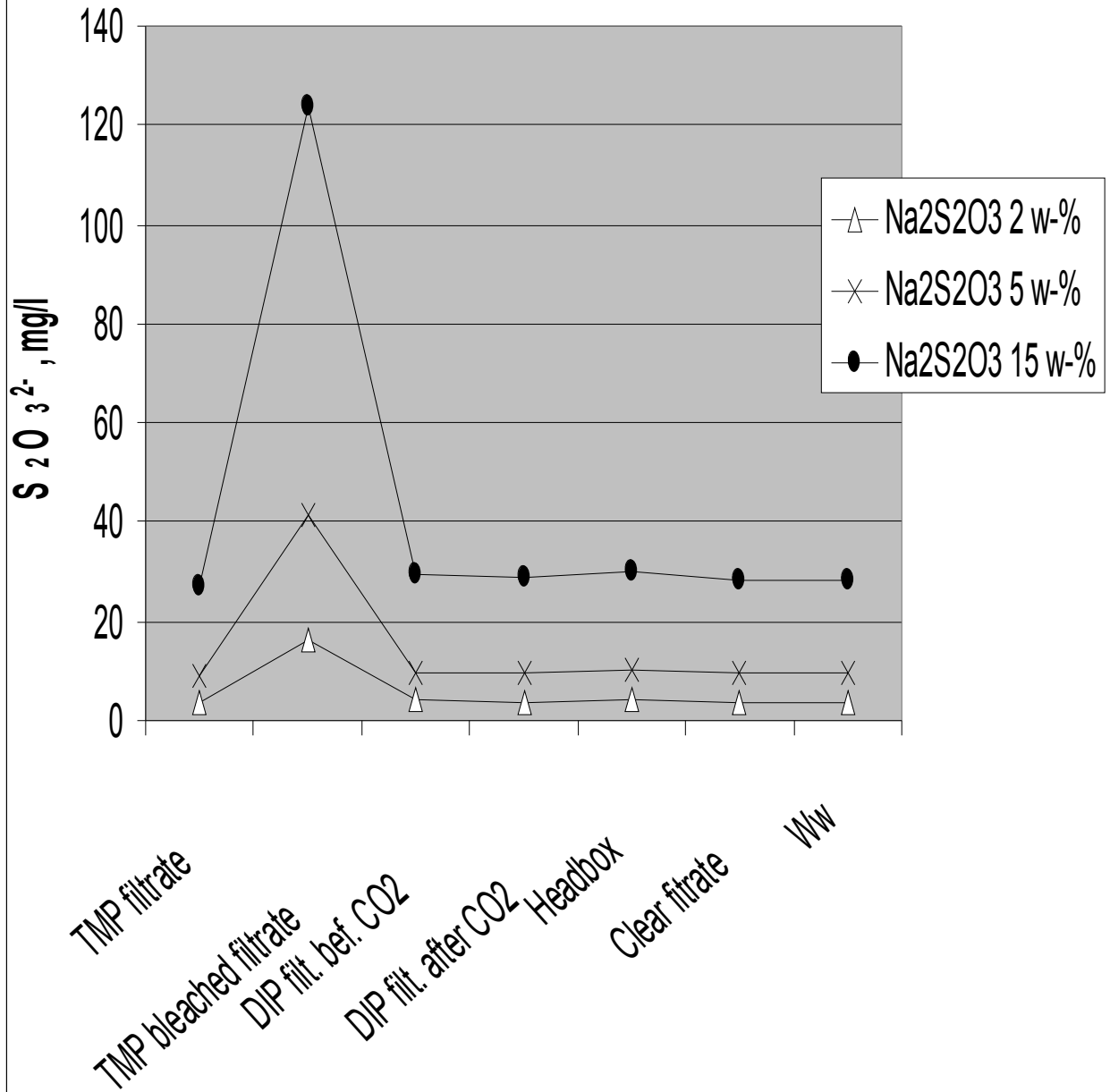


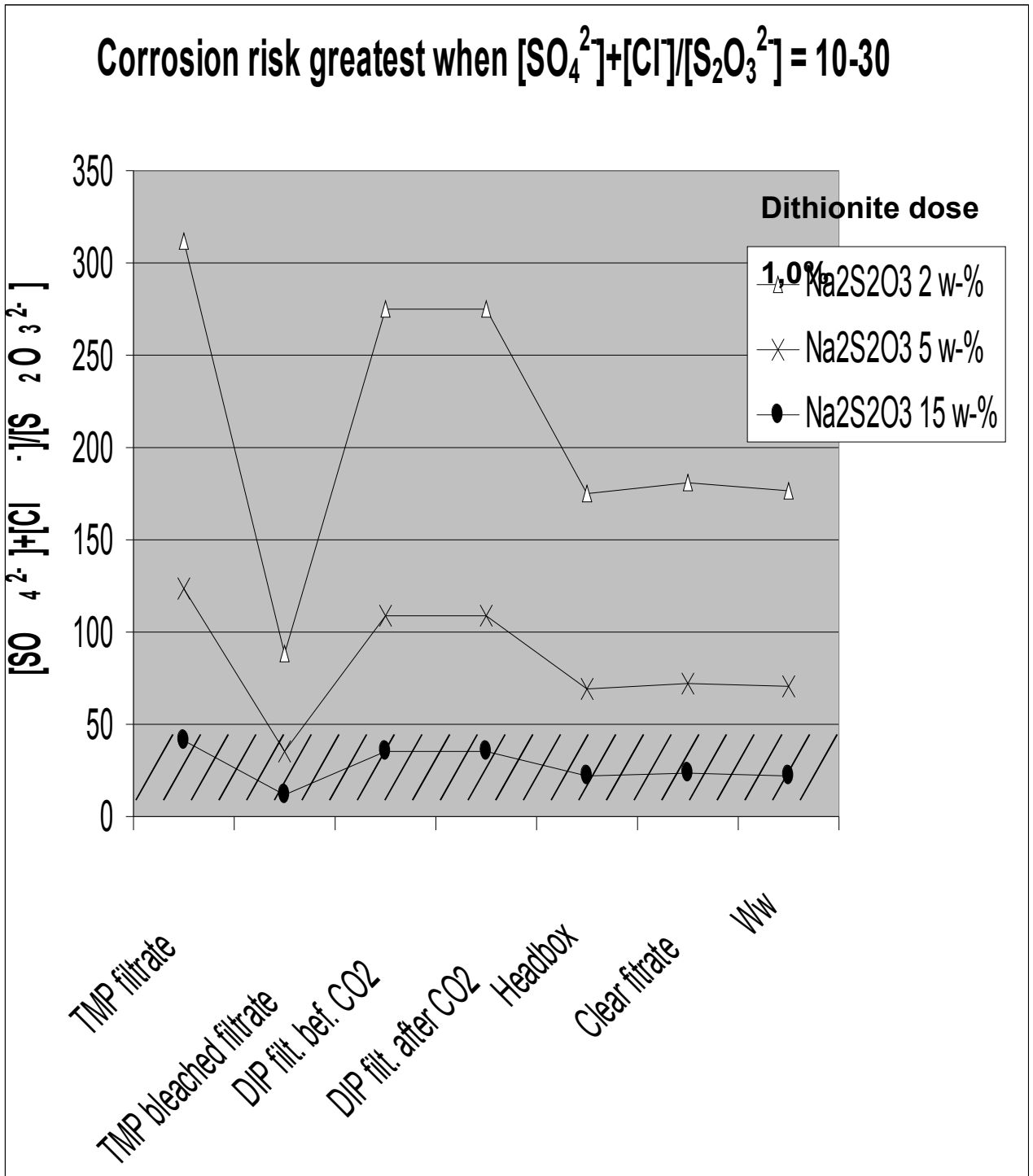
Effect of dithionite dose on sulphate concentration



Effect of dithionite decomposition on tiosulphate concentration

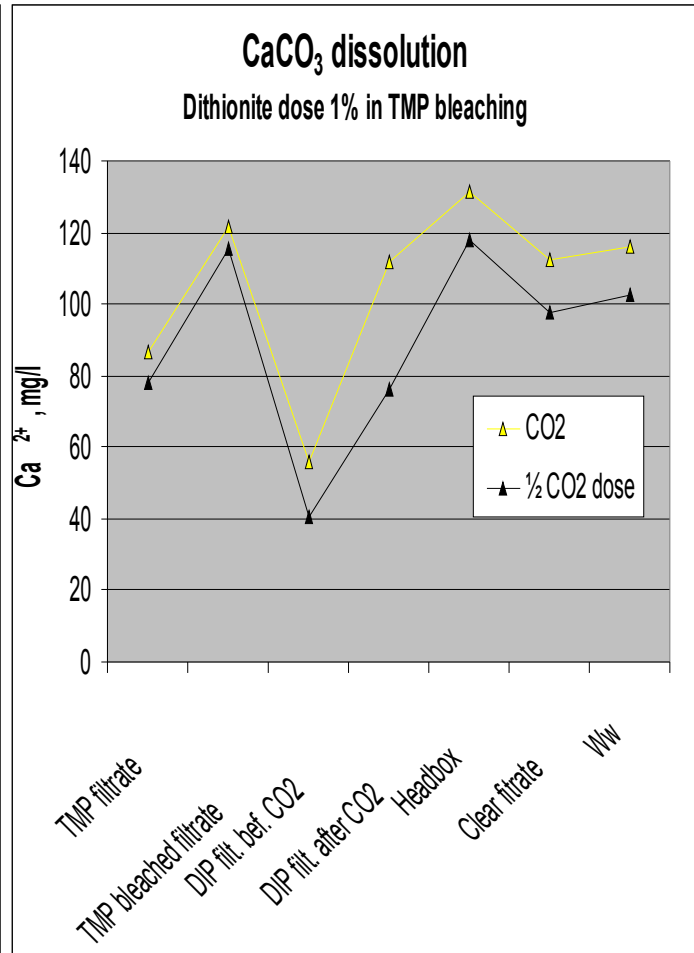
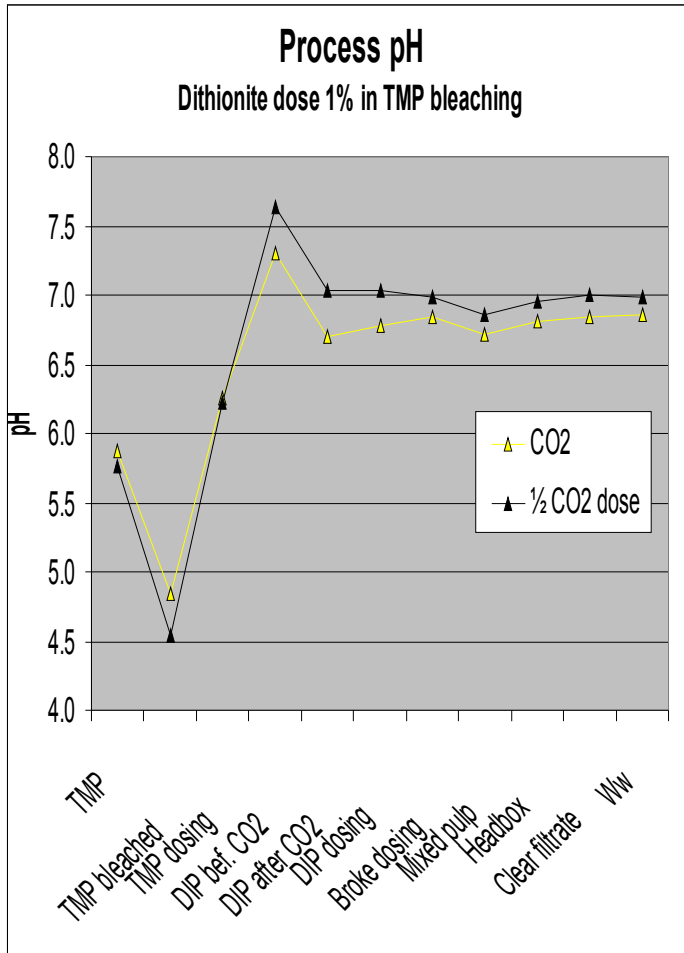
Dithionite dose 1,0%; $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$ formation 2, 5, 15 weight-%





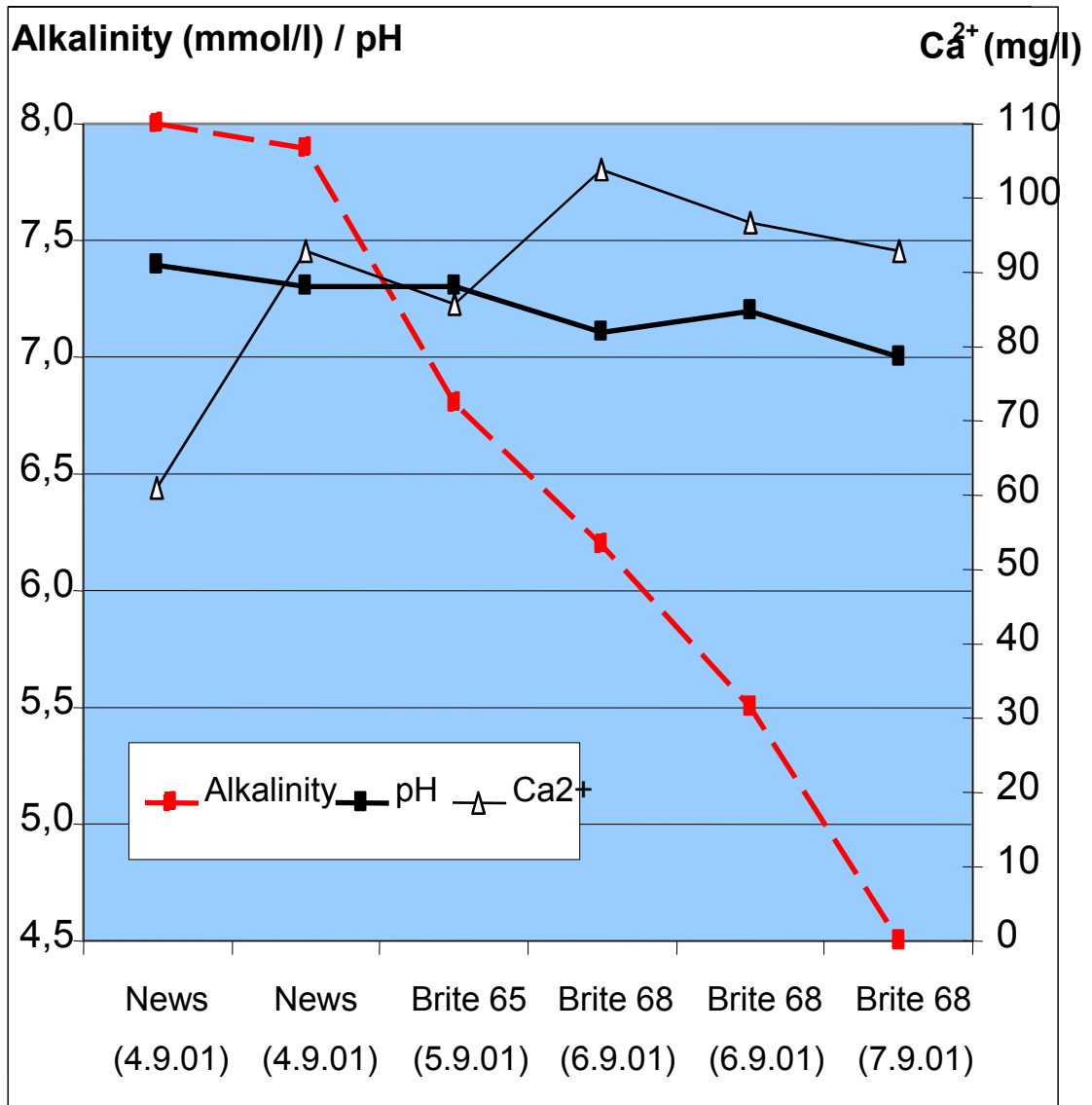
Evaporative concentration makes the splash zone much more corrosive; critical thiosulphate concentration ~ 10 ppm

Effect of DIP CO₂ acidification on process pH and soluble Calcium



Measured values:

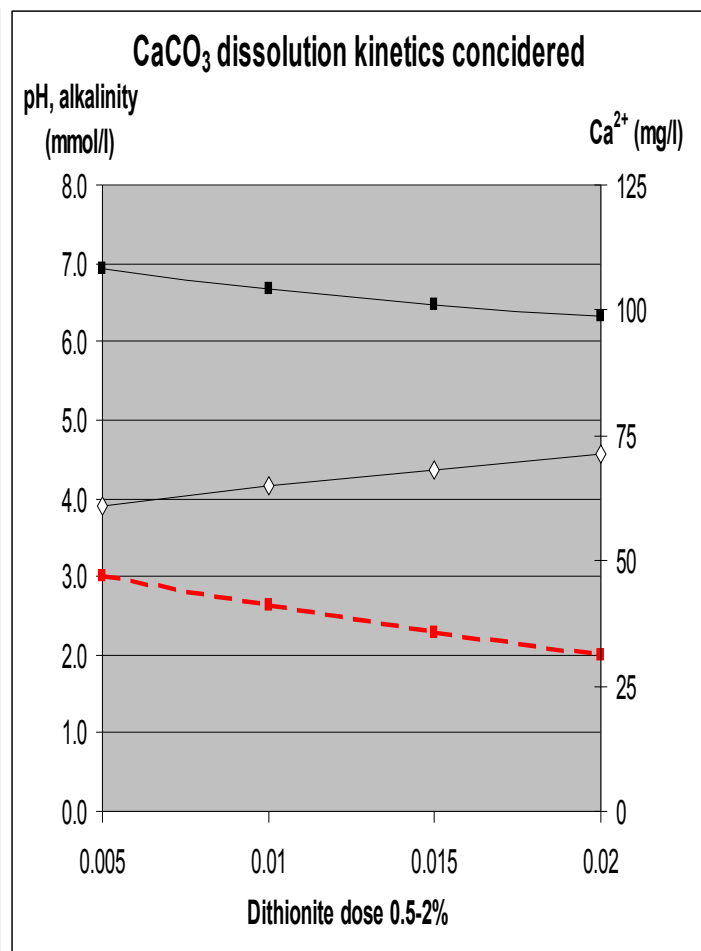
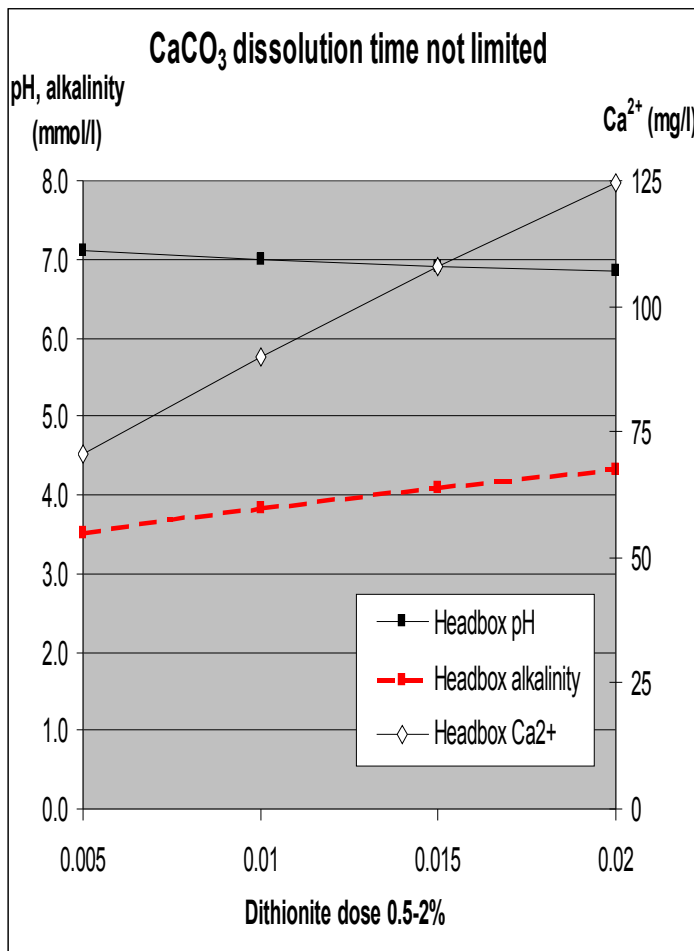
Alkalinity, pH and Ca²⁺ in PM head box vs. brightness target of paper



PM uses 100% DIP; dithionite bleaching, CO₂ acidification

Simulation:

Alkalinity, pH and Ca^{2+} in PM head box vs. dithionite dose



Summary

- Applications of Balas process chemistry simulation
 - pH calculation
 - inorganic precipitation/dissolution
 - behaviour of metal ions in washing stages
 - chelation
 - conductivity (soon usable feature)
- Under work / Coming soon
 - extension of chemical component library
 - combination with chemical (bleaching) kinetics
 - new user interface (Microsoft Visio)
- Multiphase chemistry calculation (ChemApp) can be embedded into any other process simulation platform such as Balas[®]

References

- Friman, L., Logenius, L., Agnemo, R., Högberg, H-E, Comparison of metal profiles in thermomechanical pulping processes in which either hydrogen peroxide or dithionite bleaching is used, *Paper and Timber*, vol 85 no 6, 334-339, 2003.
- Terelius, H., Nilsson, M., Blomberg, T., Calcium oxalate in mechanical pulp, *Proceedings, International Mechanical Pulping Conference*, 125-132, 2001.
- Yu, L., Rae, M., Ni, Y., Formation of oxalate from the $Mg(OH)_2$ -based peroxide bleaching of mechanical pulps, *Annual Meeting - Technical Section, Canadian Pulp and Paper Association, Preprints, Vol. A, 90th Annual Meeting - Pulp and Paper Technical Association of Canada (PAPTAC), Preprint*, 211-215, 2004,.
- Zhang J.X., Yu, L., Ni, Y., Calcium oxalate related scaling in a BCTMP line, *Proceedings, PAPTAC Annual Meeting, Montreal, January, 2003*.
- J. Sundholm, *Papermaking Science and Technology, Book 5, Mechanical pulping*, Gummerus Printing, Jyväskylä, 1999.
- Malkavaara, P. et. al., Dithionite bleaching of thermomechanical pulp: factors having effects on bleaching efficiency, *J. Chemometrics*, Vol. 14, 693-698, 2000.
- Garner, A., Thiosulphate corrosion in paper machine white water, *Corrosion Vol. 41*, 587-591, 1985.
- Newman, R.C. et. al., Pitting of stainless steel by thiosulphate ions, *Corrosion Vol. 45*, 282-287, 1989.
- Thompson, C.B., Garner, A., Paper machine corrosion and progressive closure of the white water system, *Pulp and Paper Industry Corrosion problems*, May 16-19, Stockholm, Swedish Corrosion Institute, 207-216(Vol.8), 1995.
- Laitinen, T., Thiosulphate pitting corrosion of stainless steels in paper machine environment, dissertation, VTT Technical Research Centre of Finland, 1999.
- Garner, A., Sources of thiosulphate in papermachine white water, Part I – Decomposition of stored sodium hydrosulphite, *Pulp & Paper Canada Vol. 83(10)*, 20-28, 1982.
- Garner, A., Sources of thiosulphate in papermachine white water, Part II – Thiosulphate formation during sodium hydrosulphite brightening, *Journal of Pulp and Paper Science*, J51-J57, May 1984.
- Kalliola, A., Pakarinen, H., Experiences of pH buffering and calcium chemistry control in neutral papermaking, *15th PTS Symposium: Chemical Technology of Papermaking*, September 17-19., Munich, 2002.
- <http://www.vtt.fi/pro/balas/>
- <http://www.chemsheet.com>



Solvers

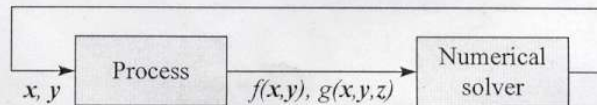
Sakari Kaijaluoto
VTT Processes

Balas solvers

Balas-course 1.-2.10.2002 (1)

Mathematical background

A flowsheet that contains recycles and/or design (equality) constraints can be schematically represented as follows:



where x is the vector of torn iteration variables
 y is the vector of design variables
 $z(x,y)$ is the vector of calculated process variables present in design constraints
 $f(x,y)$ is the vector of calculated torn iteration variables
 $g(x,y,z)$ is the vector of design (equality) constraints.

The condition for steady-state is

$$v(x,y) = 0 \dots\dots\dots (1)$$

$$g(x,y,z) = 0 \dots\dots\dots (2)$$

$$h(x,y) \geq 0, \dots\dots\dots (3)$$

where $v(x,y) = x - f(x,y)$ is the vector of error functions for torn iteration variables

$h(x,y)$ is the vector non-negativity conditions for flow-rates, limits for design constraints, etc.

Balas solvers

Balas-course 1.-2.10.2002 (2)

Design constraints

- ◆ Design constraints are used to set up design problems where feed streams or unit parameters are adjusted to meet given specifications for product streams or for some other process parameters
- ◆ Design constraints are functions written in such a way that the function value equals zero when the specified condition has been met
- ◆ The following functions can be used in the expressions: abs, tan, atan, sin, asin, cos, acos, exp, log10, ln (equivalent to log), sqrt, and ** or ^
 - The calculations will be done using the unit system that has been specified for the stream in question
 - A reference to a component means the mass or mole fraction of the component in question
- ◆ The constraint equations should be scaled in such a way that their values in or around the region from -1 to 1
- ◆ The number of design variables must be equal to that of design constraints
 - Design variables can be either unit input parameters or feed stream parameters (total flow, temperature or pressure)

Balaz solvers

Balaz-course 1.-2.10.2002 (3)

Calculation of residual

The progress of iteration during a simulation run can be followed from the residual values displayed in the Simulator messages -window. The residual S is calculated using the following formula

$$S = \left(\frac{100}{\varepsilon} \right)^2 \left(\frac{1}{n+m} \right) \left(\sum_{j=1}^n (v_j/x_j)^2 + \sum_{j=1}^m g_j^2 \right), \quad (4)$$

where

- n is the number of torn iteration variables
- m is the number of design constraints
- ε is the specified error tolerance in %.

The solution is regarded as converged when S has been less than unity on two subsequent iterations. The run cannot, however, be terminated immediately after this condition has been satisfied. A final flowsheet evaluation is needed to complete the run

Balaz solvers

Balaz-course 1.-2.10.2002 (4)

Direct substitution

- ◆ If there are no design constraints present the easiest way to solve an iterative problem is to use direct substitution

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{v}^{(k)} \text{ or, after substituting } \mathbf{v}^{(k)}$$

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{f}(\mathbf{x}^{(k)})$$

- ◆ The convergence of direct substitution method may be very slow. On the other hand, the method can also start diverging for certain types of processes. In such cases a relaxation factor can be introduced to accelerate or damp the convergence. The iteration formula obtained is

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} - \omega \mathbf{v}^{(k)} \text{ or, after substituting } \mathbf{v}^{(k)}$$

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} - \omega [\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{f}(\mathbf{x}^{(k)})]$$

- ◆ The iteration is accelerated for $\omega > 1$ and stabilised for $\omega < 1$

Balas solvers

Balas-course 1.-2.10.2002 (5)

Secant method

- ◆ Secant method is a relaxation method where separate relaxation factors are applied to each iteration variable

$$x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} - \omega_i [x_i^{(k)} - f_i(\mathbf{x}^{(k)})], \text{ or}$$

$$x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} - \omega_i \mathbf{v}^{(k)}$$

The relaxation factors are calculated from:

$$\omega_i = 1/(1-s_i),$$

where s_i is the slope of the secant

$$s_i = \frac{f_i(x^{(k)}) - f_i(x^{(k-1)})}{x_i^{(k)} - x_i^{(k-1)}}$$

- ◆ To avoid instability, it is advisable to perform a number of direct substitutions between convergence acceleration steps. For the same reason it is necessary to prevent ω_i from getting too large values

Balas solvers

Balas-course 1.-2.10.2002 (6)

Balas Secant solver

- ◆ The secant algorithm used in the Balas-programme is written in the form

$$x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} - [x_i^{(k)} - f_i(\mathbf{x}^{(k)})]/a_i,$$

where $a_i = 1/\omega_i$

- ◆ Three parameters; Delay, Lower bound and Upper bound
 - Delay can be used to set the number of direct substitution steps between secant acceleration steps
 - The last two parameters can be used to set bounds for the a_i coefficient

Quasi-Newton method

- ◆ The main drawback of the first order methods is that they do not allow for an efficient solution of design problems
 - cannot take into account couplings between different variables
- ◆ In the Newton-Raphson method the Secant iteration formula is written in a more general form

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{J}^{(k)-1} \mathbf{v}^{(k)},$$

where $\mathbf{J}^{(k)}$ is the Jacobian matrix evaluated at the current point $\mathbf{x}^{(k)}$.

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} \partial v_1 / \partial x_1 & \cdots & \partial v_1 / \partial x_n \\ \vdots & & \vdots \\ \partial v_n / \partial x_1 & \cdots & \partial v_n / \partial x_n \end{bmatrix}$$

- ◆ The overall computational efficiency of the method depends on the effort required for the calculation of the Jacobian matrix

Calculation of the Jacobian matrix

- ◆ The calculation of the Jacobian requires as many flowsheet evaluations as there are independent variables in the iteration streams.
- ◆ The heavy computational cost associated with the calculation of the partial derivatives can be avoided by quasi-Newton (QN) methods
- ◆ In the QN approach, instead of evaluating the true Jacobian matrix on each iteration, an update procedure is used to revise the approximate Jacobian from the previous iteration
- ◆ An identity matrix can be used as an initial estimate, or the matrix can be calculated numerically using finite differences. If the identity matrix is used, the first step will be a direct substitution step.
- ◆ Both Newton-Raphson and quasi-Newton methods are only locally convergent and can fail to converge if the initial approximation of the solution vector is far from the true solution

Balas solvers

Balas-course 1.-2.10.2002 (9)

Balas QN-solver

- ◆ Parameters: Method, Maximum relative step size and Perturbation step
- ◆ The Method-parameter can be used to specify how the initial Jacobian is estimated. 1 means initialisation using finite differences and 2 the use of identity matrix as the first estimate
- ◆ The Maximum relative step size parameter can be used to stabilise the algorithm when the starting point is far from the solution
- ◆ limits the Euclidian norm of the step taken to a given fraction of the Euclidian norm of the starting point
- ◆ Perturbation step gives the size of the perturbation step used when calculating the partial derivatives as percentage of the variable in question

Balas solvers

Balas-course 1.-2.10.2002 (10)

QN, Method = 2

- ◆ In normal simulation cases it is usually best to use the identity matrix as the first estimate. Direct substitution cannot be applied to design constraints and therefore the Jacobian is calculated for design cases and Method 2 as follows

$$J = \begin{bmatrix} A_1 & A_2 \\ A_3 & A_4 \end{bmatrix},$$

where

$$A_1 = I, \quad A_3 = 0,$$

$$A_2 = \begin{bmatrix} \partial v_1 / \partial y_1 & \cdots & \partial v_1 / \partial y_m \\ \vdots & & \vdots \\ \partial v_n / \partial y_1 & \cdots & \partial v_n / \partial y_m \end{bmatrix} \text{ and}$$

$$A_4 = \begin{bmatrix} \partial g_1 / \partial y_1 & \cdots & \partial g_1 / \partial y_m \\ \vdots & & \vdots \\ \partial g_m / \partial y_1 & \cdots & \partial g_m / \partial y_m \end{bmatrix},$$

Solving non-linear systems of equations Quasi-Newton

- ◆ Linearisation can be performed in two ways
 - Numerical computation (slow!!) **Method = 1**
 - Numerical computation (fast!!) **Method = 3**
 - experimental
 - may generate errors but they do not seem to affect solution
 - Approximation (fast) **Method = 2**
 - cannot be used for solving design-problems

Check-list for solving problems

- ◆ Direct substitution (secant+delay 100)
- ◆ Secant (secant+delay 4)
- ◆ If secant is slow, try Quasi-Newton (mode 2)
- ◆ If QN converges slowly, stop and re-start
- ◆ If you have design constraints, QN (mode 1 tai mode 3)