

# TOOL FOR MODELLING AND SIMULATION OF TECHNOLOGICAL PROCESSES

**Libor Skydánek**

Master Degree Programme(2), FIT VUT

E-mail: xskyda00@stud.fit.vutbr.cz

Supervised by: Radek Kočí

E-mail: koci@fit.vutbr.cz

## ABSTRACT

This work focuses on design of a tool for technological process modelling and simulation. At first we discuss the problems connected with chemical-technological process modelling and simulation in general. Later on we show some of the important problems and their solution during the development of the simulation tool called W2E (Waste to Energy).

## 1 ÚVOD

V mnoha odvětvích lidské činnosti je z různých důvodů prakticky nemožné provádět veškeré pokusy přímo v reálném světě. Často je výhodnější výsledek určitého děje vypočítat, jinými slovy provést jeho simulaci. Hlavním problémem simulace fyzikálních dějů, byly vždy nároky na výpočetní systém, které rapidně rostou s požadavky na přesnost a složitost simulačního systému. Rostoucí možnosti počítačových systémů umožnily v posledních letech vývoj velmi komplexních simulačních nástrojů, bohužel jde však většinou o komerční aplikace, které si koncový uživatel nemůže nijak upravit pro své vlastní potřeby.

Na Fakultě strojního inženýrství při VUT v Brně vznikla potřeba nástroje pro modelování a simulaci chemicko-technologických procesů, konkrétně pro odvětví zpracování biomasy. Jelikož žádný z komerčních nástrojů plně nevyhovoval stanoveným nárokům, bylo nutné vyvinout nástroj vlastní. Projekt byl nazván „Waste to Energy“ (původně pod zkratkou WTE, současně W2E) a probíhá ve spolupráci FSI a FIT VUT. Hlavním cílem projektu a zároveň i mé diplomové práce je navrhnout velmi rozšiřitelný grafický nástroj pro simulaci obecně libovolných technologických procesů a následně provést jeho implementaci pro využití v odvětví zpracování biomasy. Ze strany FIT se na projektu dále podílí Ing. Jiří Krajíček, který je zodpovědný za implementaci některých součástí simulátoru, za FSI jsou to pak Ing. Martin Pavlas, Ph.D. a Ing. Michal Touš, jež ve formě konzultací i různých úprav výpočetního systému dohlížejí na korektnost průběhu a výsledků simulace a udávají směr, kterým se vývoj nástroje ubírá.

## 2 ROZBOR

Nástroj pro modelování a simulaci technologických procesů musí řešit dva vzájemně propojené problémy: způsob modelování reálného systému a metodiku simulace technologických procesů.

## 2.1 MODELOVÁNÍ

Ve fázi modelování se zabýváme otázkou, které součásti reálného světa jsou důležité pro průběh procesů. Důkladná analýza reálného systému je základním krokem k získání dostatečně přesného modelu. Podle [2] jsou ve fázi modelování nejpodstatnější hlavně tyto aspekty systému:

- **Jednotkové operace:** Pojem jednotkové operace je relativní – vymezení jednotkových operací v systému je velmi důležité, ale podřízené účelu simulace. Jako jednotkové operace zpravidla označujeme pro proces významné výpočetně oddělitelné bloky. V simulačních programech existuje obvykle množina jednotkových modulů, které představují jednotlivé jednotkové operace a umožňují výběr i na různých vrstvách abstrakce.
- **Topologie systému:** Dalším krokem je propojení bloků vymezených v předchozím kroku. Prozkoumáním vzájemných vztahů mezi jednotkovými operacemi získáme technologické proudy těchto typů: materiálové proudy (hmotnostní toky různého složení a rozličných fyzikálních parametrů), tepelné či energetické proudy a proudy představující konanou práci.
- **Chemické složky:** Každá chemická výroba je spojena s určitým spektrem chemických složek vystupujících v technologii jako suroviny, produkty, meziproducty nebo pomocné látky. Při analýze je klíčová detekce prvků, které jsou pro simulaci podstatné.

Modelem procesu je tedy slabě souvislý orientovaný graf: jednotkové operace odpovídají uzlům grafu, technologické proudy zase hranám. Uzly mají přiřazené své množiny parametrů, hrany reprezentují pouze přesuny hmoty, energie, tepla, či práce mezi uzly.

## 2.2 SIMULACE

Existují dva základní způsoby řešení simulačních výpočtů chemicko-technologických procesů (viz [1] a [2]): jsou to sekvenčně modulární a rovnicově orientované metody. Kvůli výpočetní, paměťové i implementační náročnosti rovnicově orientovaných metod jsme zvolili řešení simulace pomocí sekvenčně modulárních metod. Tyto metody jsou tou nejjednodušší odpovědí na otázku počítačového řešení simulace procesů. Používají osvědčenou filozofii: Pokud je problém příliš složitý, dekomponuj ho i za cenu vzniku iterační smyčky.

Simulace probíhá následovně (viz [2]): Výpočty se provádějí v uzlech grafu, hrany pouze přenášejí hodnoty mezi uzly (ve směru své orientace). Jeden krok simulace odpovídá provedení výpočtů nad jedním blokem. Průchod simulace znamená provedení právě jednoho kroku v každém uzlu schématu. Po spuštění simulace dochází k postupnému zpracování uzlů tak, že z množiny v dané iteraci nezpracovaných uzlů vybereme vždy jeden z těch, jež mají dostupné všechny vstupní hodnoty, a zpracujeme tento uzel. V praxi se tedy začíná zpravidla od uzlů, jejichž všechny vstupní proudy přicházejí z okolí procesu (tzv. nástřiky do procesu).

Základní nevýhodou sekvenčně modulárních metod je jejich orientování na základní simulační úlohu (viz [2]). Výpočty u jednotkových operací musejí být zadány explicitně, tedy ve formě  $Y = F(X, P)$ , kde  $X$  je vektor vstupů,  $Y$  je vektor výstupů a  $P$  je vektor parametrů jednotkové operace. Pokud není zadání explicitní, je nutné převést jej na tzv. semiexplicitní model pomocí iterace. Základní simulační výpočet je pak schopen na základě všech vstupů a parametrů jednotkových operací vypočítat všechny výstupy, není však možné počítat libovolně zvolené neznámé (dopočítávat vstupy na základě výstupů apod.).

### 3 ŘEŠENÍ

Aby byla implementace skutečně co nejrozšiřitelnější, založili jsme architekturu aplikace W2E na architektuře Model-View-Controller. Tím se kód aplikace rozdělil do tří relativně samostatných sekcí: implementace simulačního nástroje (model), grafické uživatelské rozhraní (view) a propojení modelu s rozhraním (controller). Přestože nejvíc úsilí stál právě vývoj rozhraní, nemá smysl jej na tomto místě rozebírat, jelikož veškeré problémy spojené s modelováním a simulací se řeší výhradně v modelu.

Rozeberu zde hlavně dva největší implementační problémy, které bylo nutno vyřešit. Prvním je potřeba vysoké obecnosti jednotkových operací a proudů tak, aby bylo možné systém implementovat v libovolném odvětví procesního inženýrství. Proto je v návrhu aplikace obsažena pouze abstraktní definice obecné jednotkové operace (bloku) a abstraktní definice obecného technologického proudu. V konkrétní implementaci simulátoru s orientací na zpracování biomasy pak byla vytvořena sada konkrétních bloků (spalování pevných látek, spalování plynů, směšovač, turbína, atd.), které rozšiřují předdefinované metody pro výpočet výstupních proudů podle svých potřeb. Stejně tak byly navrženy speciální třídy pro často používané typy proudů s předdefinovaným obsahem (směs plynů, tuhé palivo, voda/pára atp.).

Druhým problémem bylo řešení recyklových proudů. Za recyklový proud je označován proud (jeden z proudů), který způsobuje výpočetní smyčku (cyklus v grafu). Při použití sekvenčně modulárních metod není možné s recyklem pracovat přímo, protože výpočet postrádá u všech bloků v cyklu kompletní sadu hodnot parametrů vstupních proudů. Recykl se tedy řeší tak, že se jeden z bloků v cyklu zvolí jako počáteční a v něm zvolíme počáteční hodnoty toho vstupního proudu, který je součástí cyklu – tyto hodnoty by měly být co nejlepším odhadem skutečných hodnot proudu během simulace. Pokud jsou inicializační hodnoty vhodně zvolené, budou hodnoty v cyklu postupně konvergovat ke správným hodnotám.

### 4 ZÁVĚR

Simulační nástroj W2E je v současnosti nadále vyvíjen ve spolupráci FIT a FSI. Aktuální verze obsahuje velmi pokročilé multilinguální grafické uživatelské rozhraní, které umožňuje snadné sestavení modelu a sledování průběhu simulace pomocí přehledných tabulek. Aplikace nemá problém s výpočtem recyklů, v budoucnosti se navíc počítá s vylepšením systému do té míry, aby byl schopen řešit i návrhovou úlohu (výpočet nezadaných vstupních hodnot a parametrů bloků). Na tuto práci bude pravděpodobně navazovat má budoucí diz. práce, jejímž tématem bude simulace, automatizované výpočty a optimalizace technologických procesů.

### REFERENCE

- [1] Richard M. Felder, Ronald W. Rousseau: *Elementary principles of chemical processes*. John Wiley & Sons, Inc., third edition, 2000. ISBN 0-471-53478-1.
- [2] Jaroslav Poživil, Tomáš Vaněk, Bohumil Bernauer: *Procesní systémové inženýrství*. Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Praha, 1997. ISBN 80-7080-311-8.