

Analiza simulatora tehnoloških procesa u funkciji projektovanja: Studija slučaja separacije prirodnog gasa

Dimitrije Ž. Stevanović¹, Mića B. Jovanović², Marina A. Mihajlović¹, Jovan M. Jovanović¹,
Željko B. Grbavčić²

¹ Inovacioni centar Tehnološko–metalurškog fakulteta u Beogradu, Univerzitet u Beogradu, Beograd, Srbija

² Tehnološko–metalurški fakultet u Beogradu, Univerzitet u Beogradu, Beograd, Srbija

Izvod

Softveri za modelovanje i simulaciju tehnoloških procesa u poslednjih nekoliko decenija imaju značajnu ulogu u razvoju procesne industrije. Korišćenje procesnih simulatora, u našoj zemlji, za potrebe projektovanja tehnoloških procesa nije široko rasprostranjeno, a literatura je nedovoljna. U ovom radu je dat pregled savremenih procesnih simulatora i prikazane su njihove mogućnosti za projektovanja procesa u zavisnosti od grane hemijske industrije. Prikazna je studija slučaja tehnološkog procesa u više procesnih simulatora koja ispituje rezultate, pouzdanost i upotrebljivost ovih programa prilikom rešavanja konkretnih projektantskih zadataka na primeru postrojenja za separaciju prirodnog gasa. Date su uporedne karakteristike rezultata simuliranja separacije prirodnog gasa za potrebe projektovanja procesa, na osnovu simulacija u softverima različitih složenosti i kvaliteta. Procesni simulatori su pokazali svoju upotrebnu vrednost kao značajan oslonac projektantima, iako rezultati koje su pokazali međusobno imaju značajna odstupanja.

Ključne reči: procesni simulatori, projektovanje u procesnoj industriji, simulacija tretmana prirodnog gasa.

Dostupno na Internetu sa adrese časopisa: <http://www.ache.org.rs/HI/>

Procesni simulatori (u daljem tekstu PS) spadaju u grupu inženjerskih softvera koji daju podršku pri projektovanju novih procesa i proizvoda, bitnih izmena postojećih tehnoloških procesa, proceni alternativa tehničkih rešenja složenih procesa i identifikacije uzroka problema u radu ili optimizaciji postojećih postrojenja, odnosno pri proceni uticaja na životnu sredinu, itd.

Pojava dinamičkih simulacija omogućila je predviđanje i kontrolu realnih procesa u realnom vremenu, a poboljšane mogućnosti softvera našle su primenu i prilikom projektovanja procesa. Kompletni softverski paket koji u užem smislu odgovara na zahteve projektanta i hemijskih inženjera prilikom projektovanja naziva se procesnim simulatorom [1–3].

U svetu je dostupno nekoliko stotina komercijalnih i besplatnih procesnih simulatora, uže ili šire specijalizacije po različitim oblastima hemijske industrije, a svi su definisani kao CAPE (eng. *Computer Aided Process Engineering*) softveri.

Može se reći da je u Srbiji nedovoljno zastupljena njihova primena, a softveri se u projektantskim organizacijama, razvojnim institutima i industriji retko koriste, dok je odgovarajuća literatura slabo prisutna.

Prepiska: D.Ž. Stevanović, Inovacioni centar Tehnološko–metalurškog fakulteta u Beogradu, Karnegijeva 4, 11000 Beograd, Srbija.

E-pošta: dstevanovic@tmf.bg.ac.rs

Rad primljen: 24. april, 2013

Rad prihvaćen: 30. december, 2013

STRUČNI RAD

UDK 519.86/.87:66:662.767

Hem. Ind. 68 (5) 547–558 (2014)

doi: 10.2298/HEMIND130424002S

Cilj ovog rada je da se prikažu mogućnosti savremenih procesnih simulatora, međusobno uporede njihove karakteristike i prikažu brojni aspekti njihove primene prilikom projektovanja realnih industrijskih procesa. Rezultati analize bi trebalo da pomognu projektantima prilikom izbora odgovarajućeg softvera, u zavisnosti od karakteristika tehnološkog procesa i opreme. Poseban deo analize, zasnovan na studiji slučaja realnog postrojenja za separaciju prirodnog gasa, poredi simulacije u različitim aplikacijama, radi ispitivanja njihovih mogućnosti prilikom projektovanja i saglasnosti rezultata.

PROCESNI SIMULATORI I PROJEKTOVANJE PROCESA

Procesni simulatori se zasnivaju na proračunima masenih i energetskih bilansa, simuliranjem jediničnih tehnoloških operacija, ili kinetike procesa sa hemijskom reakcijom, u odgovarajućim uređajima. Osnove za napred opisane aktivnosti su sledeći elementi softvera: a) baze podataka sa fizičko-hemijskim karakteristikama hemijskih elemenata i jedinjenja, kao i industrijskih smeša koje se koriste u tehnološkim procesima, b) baze jediničnih modela i operacija za pojedinačnu tehnološku opremu, c) baze podataka sa termodinamičkim modelima i/ili modelima strujanja fluida i d) baze numeričkih metoda.

Ovi programski paketi su, po pravilu, sekvencijalno modularani – objektno orijentisani programi, uglavnom zasnovani na jednačinama fenomena pre-

nosa. Spadaju u grupu CAD (eng. *Computer Aided Design*) računarskih alata.

Savremeni simulatori uzimaju u obzir brojne faktore koji utiču na jedan proces poput: detaljne geometrije procesnih jedinica, napredne termodinamike fluida, složenih međuzavisnih operacija, interakcija između komponenti sistema, najbolje dostupne baze jedinjenja, te izračunavaju energetske gubitke i, u nekim slučajevima, predviđaju ponašanja nedovoljno definisanih komponenti ili operacija.

Projektovanje predstavlja institucionalni okvir kroz koji se, ili uz čiju pomoć se odvijaju sve razvojne aktivnosti u procesnoj industriji. Posebno izdvojeno **projektovanje procesa** može se definisati kao kreativno i stručno uobličavanje tehnoloških procesa i njegovih elemenata u cilju zadovoljena industrijskih potreba. Glavni cilj projektovanja tehnoloških procesa je uvećanje željenih i smanjivanje neželjenih reakcija i procesa, dobijanje kvalitetnog proizvoda na siguran i lako ponovljiv način u skladu sa zahtevima investitora, po konkurentnoj ceni i uz poštovanje svih zakonskih ograničenja [4–7].

Upotreba procesnih simulatora počinje već od ranije faze projektovanja, a često i prilikom razvoja samog procesa. Ovim putem omogućeno je rano otkrivanje slabosti projekta u okviru zadatih ograničenja poput: tehnologije, investicionih troškova, dostupnog prostora, sigurnosti, uticaja na životnu sredinu, proizvodnje otpadnih materija, operativnih troškova i troškova održavanja. Korišćenje simulacija daje smernice u izradi projekta, kako sledi:

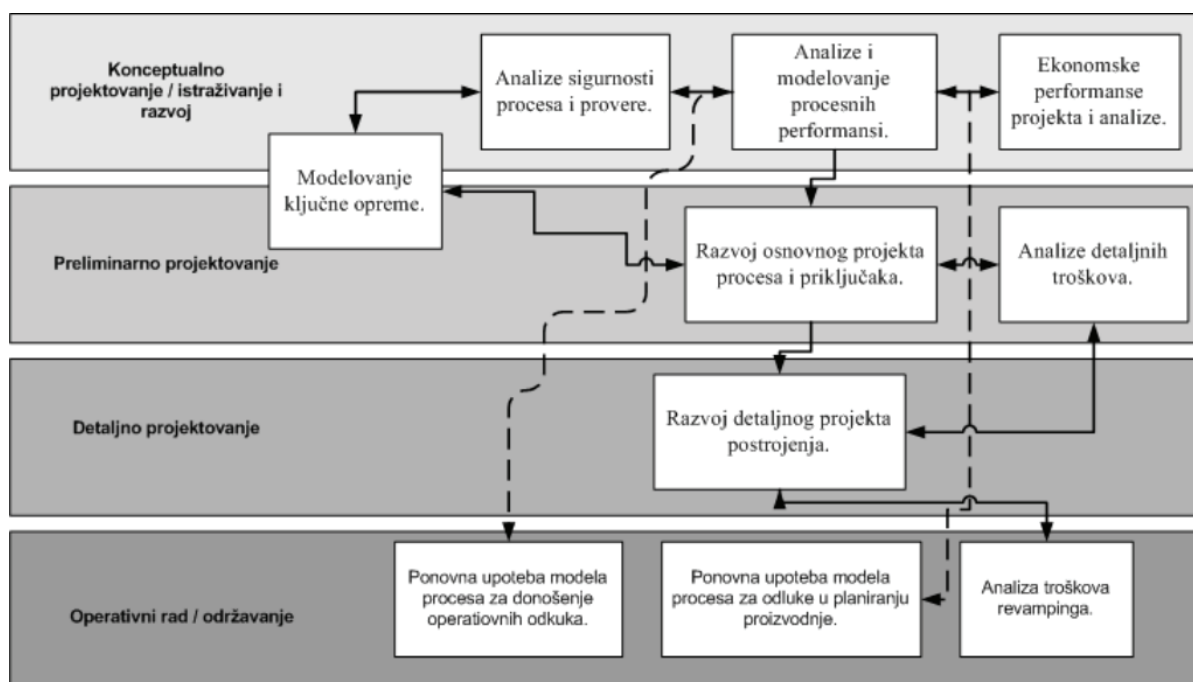
1. Procene opšte izvodljivosti procesa kao celine, kao i procenu njegove fleksibilnosti u radu, pre nego što se pristupi detaljnom tehnološkom projektovanju.

2. Generiše veći broj mogućih tehnoloških alternativa i/ili rešenja, kao valjanu osnovu za dalji izbor projektata/investitora.

3. Mogućnost preliminarnog definisanja ciljeva procesa pre detaljnog dimenzionisanja opreme.

Još jedna prednost procesnih simulatora ogleda se u njihovoj mogućnosti brzog uočavanja problema u ranim fazama razvoja procesa i davanja odgovora na pitanje „šta ako?“. Na slici 1, prikazani su mogući doprinosi softvera za simulaciju u različitim fazama tehnološkog projektovanja ili prilikom operativnog rada postrojenja [8].

Kako su zaštita životne sredine i sigurnost procesa postali značajni deo prilikom projektovanja procesa bitno je ukazati da pojedini PS projektantima istovremeno pružaju pomoć pri proceni emisija zagađujućih materija, identifikuju zone opasnosti, a pomoću njih moguće je izvesti poboljšanje energetske efikasnosti ili optimizacije rada tehnoloških postrojenja. Danas su simulacije procesa postale osnova tehnološkog projektovanja. Primenom simulatora procesa može se predvideti ukupno ponašanje, sastav i osobine svih materijalnih tokova procesa, kao i dimenzije, karakteristike svih uređaja i operativni uslovi. Sve navedeno utiče na skraćanje vremena predviđenog za projektovanje i dozvoljava projektantu da brzo testira različite konfiguracije procesa, pogona, i/ili sistema.



Slika 1. Doprinosi softvera za simulaciju u različitim fazama tehnološkog projektovanja.
Figure 1. Software application in different stages of chemical process design.

PRINCIPI RADA PROCESNIH SIMULATORA

Matematički modeli u procesnim simulatorima mogu se razlikovati prema kompleksnosti, tako da se može simulirati samo odabrani deo procesne opreme, odabrana operacija u uređaju, odnosno kompletna tehnološki proces. Projektovanje i analiza procesa i postrojenja često se vrši pomoću makroskopskih, stacionarnih modela. Korišćenje matematičkih modela uređaja zahteva unos neophodnih parametara, a izbor i kvalitet modela direktno utiču kako na simulaciju, tako i na rezultate koji se dalje koriste u projektovanju.

Dobri modeli koriste se, u velikoj meri, za donošenje odluka o izvodljivosti operacija prilikom projektovanja, a istovremeno mogu da daju neophodne podatke za rešavanje pojedinih operativnih problema. Razvoj kvalitetnih i pouzdanih matematičkih modela je suština unapređenja modelovanja i simulacije za potrebe projektovanja procesa.

Glavne tehnike dostupne za simulaciju modela procesa svrstane su u tri pristupa: sekvencijalno-modularni – najčešće u upotrebi, najbliži je klasičnom ručno-vezanom proračunu na osnovu ulaznih parametara svake tehnološke operacije ili uređaja tehnološkog procesa, zatim simulaciono-modularni pristup sličan prethodnom, sa tim što je više orijentisan na jednačine u cilju linearizacije sistema i na kraju jednačinski-orijentisani koji se zasniva se na predstavljanju procesa nizom nelinearnih i drugih jednačina modela, interkonekcionih jednačina, projektnih uslova, fizičkih i termodinamičkih korelacija, koje se rešavaju simultano za sve nepoznate.

U dosadašnjoj praksi razvoja procesa putem eksperimenta, sam postupak može dovesti do optimalnog rešenja suviše sporo za savremeni način proizvodnje i poslovanja. U slučaju primene softvera poklapanja sa eksperimentalnim podacima u referentnim slučajevima kreću se u rasponu od 92–99% u zavisnosti od procesa [9–11], a sa razvojem u ovoj oblasti mogu se očekivati još bolji rezultati.

Vrhunac upotrebe savremeni PS dostižu povezivanjem sa realnim procesima tokom proizvodnje. Neki od njih imaju mogućnost da prate ključne parametre procesa velikog broja ulaznih promenljivih i automatski, paralelno, kreiraju i dalje za simulaciju koriste nove poboljšane modele. Time se unapred detektuju neželjeni efekti i asistira u sigurnom i ekonomičnom vođenju procesa. Razvojem preciznih modela na osnovu direktnih podataka iz realnih procesa omogućene su pouzdane prediktivne simulacije proizvodnje.

PREGLED SAVREMENIH PROCESNIH SIMULATORA

Većina savremenih procesnih simulatora danas radi na sličnim principima, a svaki ima određene osobitosti, prednosti ili ograničenja u odnosu na ostale. Generalno gledano svi PS se pored pouzdanosti, mogu uporediti i po više kategorija poput: broja termodinamičkih paketa, veličine i pouzdanosti internih baza komponenata, broja modela uređaja, tržišne cene, kvalitetu interfejsa, specijalizaciji za određene grane procesne industrije ili operacije, stepenu poklapanja sa realnim procesom i sl. Svi procesni simulatori mogu se grubo podeliti prema više karakteristika, a neke od podela date su u tabeli 1.

Tabela 1. Tipovi podela procesnih simulatora
Table 1. Process simulator types

Redni br.	Tip podele	Primer
1.	Primena:	1. Specijalizovani za pojedine industrijske grane (naftna, petrohemijska, hemijska, farmaceutska). 2. Specijalizovani za pojedina industrijska postrojenja (reaktori, kolone, razmenjivači toplote, bioreaktori i separatori).
2.	Dinamika sistema:	1. Stacionarni, 2. Dinamički, 3. Kombinovani.
3.	Operativni sistem:	1. Windows (Aspen Plus), 2. DOS (Kemisimp), 3. iOS (Alph).
4.	Baza podataka:	1. Interna (AspenPlus), 2. Eksterna (COCO).
5.	Povezanost sa procesom u realnom vremenu:	1. Offline (SuperPro Designer), 2. Online (AspenPlus).
6.	Interfejs:	1. Objektno orijentisani, 2. Grafički, 3. Tekstualni, 4. Touch pad.

Pored integrisane baze modela, operacija, termodinamičkih i numeričkih metoda koji se lako uklapaju u modelovanu procesnu šemu, PS koriste pojednostavljeni i intuitivni grafički interfejs za komunikaciju sa korisnikom. Uglavnom se u naprednim PS mogu izabrati različiti režimi rada u zavisnosti od namene (računski, projektantski, simulacioni i sl.), što dodatno olakšava primenu softvera. Na slici 2 prikazan je izbor i povezanost softverskih opcija radi formiranja modela procesa.

Pored procesnih simulatora u užem smislu grupisanih po nameni, za projektovanje procesa mogu se koristiti i rezultati iz dopunskih softvera iz grupe za numeričke analize ili zaštitu životne sredine, kao što je prikazano na slici 3.

Iako se svake godine broj PS za tehnološkog projektovanja uvećava u vodeće spadaju: *Aspen Plus*, *AspenHysys*, *PRO/II*, *SuperPro Designer*, *ChemCad*, *Design II*, *VGPro*, *Unisim*, *ProSim* i drugi softveri navedeni u tabeli 2.

U slučaju da simulator omogućava direktno prikupljanje realnih operativnih podataka iz procesa, gde se ti rezultati koriste za odlučivanje ili predviđanje promena u radu, te se kontrolni parametri optimizuju na osnovu ovih rezultata – takve simulacije se nazivaju *online*. Sa druge strane *offline* procesne simulacije ne uključuju razmenu podataka sa realnim sistemom, a mogu se koristiti za projektovanje, rešavanje problema i optimizaciju ili modifikaciju postrojenja i sl. Pored klasičnih procesnih simulatora, prilikom projektovanja procesa mogu se koristiti i numerički softveri opštije namene poput softvera *Mathlab*, *Cosmol*, *Polymath* ili *EES* [12–16].

Poslednjih godina dostupne su i napredne verzije PS koje nastaju integrisanjem dva ili više srodnih programa, čime nastaje novi značajno poboljšani softverski proizvod. Tako je, na primer, 2004. godine udruživanjem kompanije *AspenTech* i kompanije *Fluent Inc.* (CFD softver *Fluid*) nastao novi složeniji softver *Aspen HYSYS*, koji pored standardnih podataka o materijalnim i energetskim karakteristikama procesa, daje detaljne podatke o dinamici fluida, raspodeli čestica, obliku strujnica i sl. Primarni cilj integracije je bio da se ukombinuju potencijali modelovanja opreme sa širokim mogućnostima modelovanja procesa kako bi se omogućila

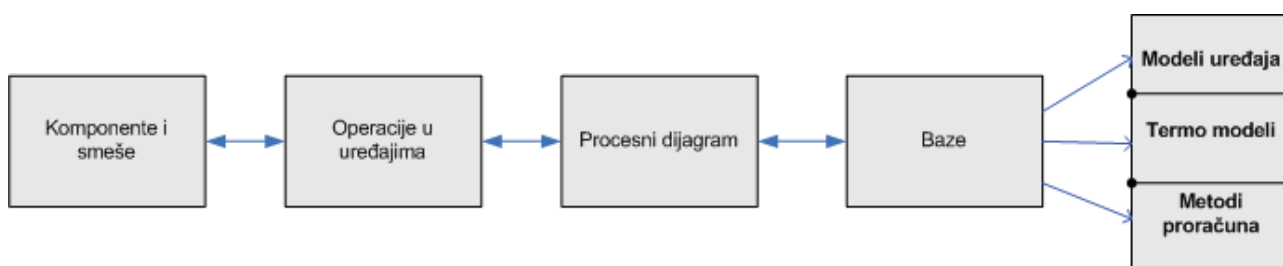
brža procena novih inovativnih postrojenja koja uključuju i jedinstvenu opremu (npr. gorivne ćelije, gasifikatore i složene reaktore). Novi interfejs omogućio je sveobuhvatnu procenu stanja opreme i fluida, tako što su detalji modela mehanike fluida priključeni u zajednički procesni dijagram. Ova uspešna integracija, dve jake kompanije u oblasti procesne simulacije, značajno je unapredila softverske mogućnosti pri projektovanju procesa i doprinela daljem razvoju savremenih procesnih simulatora.



Slika 3. Grupe inženjerskih softvera upotrebljive prilikom tehnološkog projektovanja.

Figure 3. Engineering software groups used for chemical process design.

Dinamička simulacija se, pored primene u industriji, može smatrati korisnim nastavnim alatom za širok spektar kurseva iz oblasti hemijskog inženjerstva. Pored ostalog simulacioni softveri omogućavaju demonstraciju i testiranje drugačije vrste procesa i opreme, upravljačkih algoritama i sigurnosnih procedura procesa. Studije dinamičke simulacije vrše analizu sigurnosti i bolje fokusiranje ka zahtevnim sigurnosnim standardima (HAZOP/HAZID i sl.), poboljšavaju projekat procesa i daju mogućnost izrade plana upravljanja rizicima [17].



Slika 2. Koraci ka formiranju modela procesa.

Figure 2. Creating process model procedure.

Tabela 2. Pregled karakteristika procesnih simulatora i oblasti primene
 Table 2. Process simulator characteristics and application area

Naziv softvera	Karakteristike	Oblast primene
AspenPlus	Najkompletniji komercijalni softver, sa najboljim karakteristikama, velikim brojem gotovih modela, najvećom i najpotpunijom bazom komponenti, koje uključuju i izomere jedinjenja, elektrolite i sl. Sadrži napredne termodinamičke i fluidne pakete, sa mogućnostima procene ponašanja komponenti. Softver ima mogućnost za dodatna poboljšavanja uslova reakcije, reaktanata i delova opreme. Online opcije procesa. Predviđa performanse procesa. Tržišni lider, visoka cena.	Široka oblast primene u različitim sferama rafinerijske, petrohemijske i ostale hemijske industrije. Često se koristi za simulacije prilikom proizvodnje nafte i prirodnog gasa, termodinamičkih sistema, za modelovanje gorivnih ćelija, u proizvodnji vodonika, proizvodnji pare u termoelektranama, za ekonomske procene, optimizacije, usklađivanje proizvodnje i zaliha.
Hysys	Pouzdan softver, spada u tržišne lidere. Sada je deo Aspen paketa. Simulira u oba režima. Posедуje detaljno razrađene modele destilacionih kolona i dobru bazu termodinamičkih paketa. Za razliku od ostalih softvera HYSYS po svakoj izmeni simulacije automatski daje nove rezultate.	Dinamika fluida u sistemima, industrija nafte i gasa, separacija gasova, rafinerijska prerada i slično.
SuperPro Designer	Preko 140 gotovih modela i operacija u uređajima, velika baza komponenti. Najbolje rezultate daje za šaržne procese. Proračun karakteristika materijalnih tokova nije detaljan.	Jedan od retkih softvera koji simulira i hemijske reaktore. Pouzdan u oblasti biotehnologije, prehrambene industrije, farmacije, zaštite životne sredine.
ChemCad	Nova poboljšana verzija ovog softvera nudi mogućnosti i ostalih savremenih procesnih simulatora. Pored nove proširene baze komponenti ovaj softver sada sadrži i savremeno radno okruženje i veći izbor gotovih modela uređaja.	ChemCad se uspešno koristi za projektovanje i simulaciju velikog broja procesa u oblasti hemijske industrije od kojih se posebno izdvaja: rafinerijska proizvodnja i proizvodnja finih hemikalija.
ProSim	Komercijalni simulator stacionarnih režima zasnovan na sekvencijalnom proračunu. Integrisan u Autocad koji je potreban za pokretanje Prosim-a.	Naftna industrija, reaktorski procesi, trofazni procesi, proizvodnja uglja i gasa, prehrambena industrija, zaštita ŽS.
Pro II	Radi u stacionarnom stanju. Ovaj komercijalni softver ima veće tržišno učešće u oblastima projektovanja za petrohemijsku, naftnu, gasnu i ostalu hemijsku industriju. Od mogućnosti razdvajanje nafte i gasa, pa do reaktivne destilacije. PRO/II kombinuje obimne podatke velikog broja hemijskih komponenti iz svoje baze i termodinamičke metode za procenu osobina komponenti kao i napredne prilagodljive jedinične tehnoloških operacija.	Procesni inženjeri koriste ovaj softver za obavljanje obimnih proračuna bilansa energije potrebnih za modelovanje većine stabilnih stanja procesa u preradi nafte, prirodnog gasa i industriji polimera.
Design II	Nova verzija softvera 11.0 donosi mogućnost simuliranja dinamičkih modela. Jedini poseduje pored klasičnog i tekstualno bazirani interfejs. Zasniva se na fortranskoj osnovi te se pripremljeni modeli lako mogu prepraviti u posebnom editoru, što zahteva znanje programskog jezika Fortran. Njegova baza poseduje tipične karakteristike čak 38 vrsta sirove nafte.	Pre svega softver je namenjen korišćenju u naftnoj i gasnoj industriji, ima veći izbor modela uređaja za separaciju i rektifikaciju, a pogodan je i za određivanje termodinamike tokova.
ProTreat	Savremeni komercijalni simulator, uže specijalizovan za pojedine procese u oblasti hemijske industrije.	Simuliranje procesa izdvajanja H ₂ S, CO ₂ , merkaptana i drugih komponenti iz različitih gasova niskog i visokog pritiska absorpcijom u termalno regenerabilnom vodenom rastvoru koji sadrži jedan ili više amina.
K-Spice	Simulator dinamičkih procesa firme Kongsberg. Softver novije generacije koji integriše njihova tri postojeća softvera.	Naftna i gasna industrija.
Coco Simul.	Koristi bazu CAPE <i>Open</i> i predstavlja softver nešto slabijih mogućnosti i užeg izbora opreme, ali je pogodan za simuliranje pojedinih separacionih tehnika. Pogodan za preliminarne procene pri projektovanju osnovnih procesnih tehnika.	Najčešće se koristi za simulacije destilacionih kolona, uređaja za separaciju tečnosti i gasova ili razdvajanje komponenti smeše.

Tabela 2. Nastavak
Table 2. Continued

Naziv softvera	Karakteristike	Oblast primene
VMGSim	Neki od programera softvera HYSYS, nakon prodaje licence AspenTech-u, nastavili su razvoj novog softvera u okviru kompanije VMG. Softver je još u razvojnoj fazi.	Rafinerijska i petrohemijska industrija.
Alph	Radi na operativnom sistemu iOS, pogodan za korišćenje na tablet računarima. Ima mogućnost simulacije većeg broja jedinica i procesa u okviru hemijske industrije. Sadrži manji broj modela.	Savremen softver namenjen korišćenju na mobilnim hardverima poput iPad-a. Omogućava simulacije direktno na pogonu.
Kemsimp	Radi na operativnom sistemu MS DOS. Besplatan je.	Skromna primena za statičke simulacije i podešavanja procesa.
DWSIM	Ovaj softver je „open source“ pisan je u Visual Basicu. Kompatibilan je sa CAPE-open bazom, ima moderan grafički interfejs i napredne termodinamičke pakete. Ima podrška za hemijske reakcije i reaktore. Složeniji za upotrebu.	Proračuni VLE/VLLE jednačine stanja, koeficijenta aktivnosti i Chao-Seader modele, rigorozne destilacione/apsorpcione kolone. Karakterizacija naftnih frakcija.
Toxchem	Trenutno je aktuelna četvrta verzija. Na tržištu oko 10 godina. Projektovanje postrojenja za tretman otpadnih voda.	Tretman otpadnih, industrijskih i komunalnih voda i procena emisija. Proračun emisija iz navedenih sistema i određivanje zona opasnosti.
Water9	Besplatan softver iz EPA-e koji može da se koristi za procenu emisije u vazduh i vode iz procesa prerade industrijskih otpadnih voda, kao i iz ostalih postrojenja. Velika baza sa lako isparljivim organskim supstancama.	Zaštita životne sredine. Procena uticaja na životnu sredinu. Projektovanje postrojenja za tretman otpadnih voda.
Einstein	Besplatan program za projektovanje i optimizaciju energetske mreže pogona, upotrebe toplotne energije. Projektovanje energetski efikasnog snabdevanja sistema.	Energetska efikasnosti optimizacija toplotnih tokova. Primenljiv i u malim privrednim subjektima.
EMSO	Korisnik može da modeluje kompleksne dinamičke ili stacionarne procesa. Pored toga, korisnik može da razvije nove modele pomoću „Portraits“ jezika ili da koristi gotove modele iz svoje skromne baze.	Dinamičke simulacije separacionih procesa kompleksnih smeša, destilacione kolone, CSTR, PFR i neidealni reaktori, kao i parni sistemi u petrohemijskoj industriji i termoelektranama.
Dymola	Besplatan varijanta, open source. Jedini simulacioni alat koji je trenutno na raspolaganju simulacionom jeziku Modelica, koji je zasnovan na objektno orijentisanom modelovanju.	Tek u razvoju, značajan za dinamičke simulacije procesa.
Gproms	Moguća i simulacija gorivnih ćelija.	Reaktori, separacija, kristalizacija, biotehnologija.
Mathlab	Iako je MATLAB prvenstveno namenjen za numeričko računarstvo i kreiranju grafika, opcioni blokovi koje sadrži omogućavaju pristup i grafičkim mogućnostima programiranja, koje mogu biti korišćenje u oblasti hemijskog inženjerstva. Softver široke primene koji može da se koristi kao dopunski alat prilikom projektovanja procesa.	Koristi se za rešavanje, sistema nelinearnih jednačina, složenih jednačina iz termodinamike ili automatskog upravljanja procesima, a u upotrebi je i paket Simulink za modelovanje, simulaciju i analizu multidomenskih dinamičkih sistema.
EES	Eng. Engineering Equation Solver je uglavnom namenjen simulaciji stacionarnih režima rada. Besplatan za edukativne svrhe.	Rešavanje opštih bilansnih jednačina procesa.

ANALIZA KARAKTERISTIKA PROCESNIH SIMULATORA

U ovom poglavlju analizirane su izdvojene karakteristike odabranih procesnih simulatora, radi lakšeg upoređivanja (cena, broj modela uređaja, broj termodinamičkih modela, operativne mogućnosti i veličina baze hemijskih komponenti). Osim nekoliko besplatnih verzija, relativno ograničenog dometa, ovi softveri su

dostupni na tržištu. U tabeli 3 je dat trenutni pregled besplatnih i komercijalnih procesnih simulatora.

U tabeli 4 nalazi se detaljniji opis mogućnosti operativnih karakteristika vodećih procesnih simulatora.

Zajedničko za sve softvere iz ove grupe je da imaju više desetina modela opreme za simulaciju razvrstanih u nekoliko uobičajnih podgrupa: reaktori, razmenjivači toplote, kolone, separatori i ostala oprema. Najveći broj modela ima SuperPro Designer, a najdetaljnija

Tabela 3. Pregled besplatnih i komercijalnih procesnih simulatora
Table 3. Review of free and comercial process simulators

Naziv softvera	Dostupnost	Naziv softvera	Cena
PRO II	Komercijalan	Toxchem	Komercijalan
ProSim	Komercijalan	EcoSim	Komercijalan
Alph	Komercijalan	EES	Komercijalan
AspenPlus	Komercijalan	Kemisimp	Besplatan
SuperPro Designer	Komercijalan	Coco Simulator	Besplatan
Hysys	Komercijalan	DWSIM	Besplatan

Tabela 4. Pregled tehničkih mogućnosti i karakteristika procesnih simulatora
Table 4. Review of process simulators abilities and characteristics

Kategorija	DESIGN II	ASPEN Plus	HYSYS	PRO/ II	ProMax	Chem Cad	SuperPro Designer
Opšte karakteristike	Baze podataka	x	x	x	x	x	x
	Termodinamika	x	x	x	x	x	x
	Konvergencija recikla	x	x	x	x	x	x
	Šaržni režim rada		x				x
	Procesiranje gasa	x	x	x	x	x	x
	Šaržne simulacije		x	x		x	x
	Dinamičke simulacije	x	x	x	x	x	x
	Mreže razmenjivača	x	x	x	x	x	
	Elektroliti		x	x	x	x	
	Mreže cevovoda		x	x		x	
Modeli uređaja	Destilacione kolone	x	x	x	x	x	x
	Šaržne kolone	x	x		x		x
	Razmenjivači toplote	x	x	x	x	x	x
	Flash separator	x	x	x	x	x	x
	Reaktori	x	x	x	x	x	x
	Pumpe i kompresori	x	x	x	x	x	x
	Tankovi i rezervoari	x		x			x
	Separatori čvrsto- tečno	x		x			
Separator gas – tečno	x	x	x	x	x	x	

podešavanja modela uređaja i operacija imaju softveri AspenPlus i Hysys. U većini programa omogućeno je kreiranje novih ili prepravljene postojećih elemenata opreme. U tabeli 5 dat je broj modela procesnih jedinica (modela uređaja) koje su dostupne u osnovnim verzijama softvera.

Poznato je da više od 75% koda u procesnim simulatorima posvećeno proceni fizičkih osobina, proračunu

i predviđanju ponašanja hemijskih komponenti, stoga se baze podataka koje sadrže fizičko-hemijske karakteristike čistih komponenti i parametre binarnih interakcija za izračunavanje fazne ravnoteže, intenzivno koriste i kontinuirano dopunjavaju u savremenim procesnim simulatorima [18,19]. U tabeli 6 dat je pregled opširnosti baza komponenata odabranih procesnih simulatora.

Tabela 5. Broj modela tehnoloških operacija
Table 5. Number of unit operations

AspenPlus	Hysys	Unisim	SuperPro	ChemCAD	PRO/II	Design II
95	90	80	140	70	86	78

Tabela 6. Broj komponenti koje sadrže baze PS
Table 6. Number of components in data base

AspenPlus	Hysys	Unisim	SuperPro	ChemCAD	PRO/II	Design II
Od 15–24000	1800 + Aspen baza	1500	600 + 1700	2000	1750	900

Korisnik u najvećem broju slučajeva ima mogućnost dodavanja novih komponenti i to delimičnim prepravkama postojećih ili upisom ključnih fiziko-hemijskih parametara i formiranjem novih komponenata. Važno je napomenuti da pored broja komponenata u bazi podataka, značaj ima i broj fizičkih, hemijskih, bioloških, sigurnosnih ili ekonomskih parametara kojima su definirane komponente baze. Takođe, od velikog značaja je pouzdanost baza, a prilikom nekih detaljnih simulacija uočljivu razliku može napraviti i broj značajnih cifara sa kojima su parametri komponente upisani u bazu.

Pored kvalitetnih baza podataka napredni procesni simulatori koriste i detaljne termodinamičke pakete koji se mogu prilagoditi korišćenim fluidima, smešama i drugim sistemima sirovina/reaktanta, te uslovima procesa, radi dobijanja što vernijih rezultata simulacije. Mnoge baze mogu da sadrže i dopunske podatke poput bioloških osobina komponenata ili cena opreme, pomoćnih fluida i sl. Što je veći broj i pouzdanost komponenata u bazi, veća je i univerzalna primena simulatora, tabela 7.

Tabela 7. Broj termodinamičkih paketa u okviru PS
Table 7. Number of thermodynamic packages in process simulators

AspenPlus	Hysys	Unisim	SuperPro	ChemCAD	PRO II	Design II
80	30	32	28	20	38	35

Na osnovu iskustva i iznetih podataka u prethodnim pasusima po ukupnim performansama i karakteristikama prednjači softver AspenPlus, koji danas obuhvata nekoliko desetina specijalizovanih podopcija, iscrpnu bazu komponenata i modela uređaja, brojne termodinamičke pakete i detaljne opcije podešavanja opreme. Međutim, u zavisnosti od zahteva projekta i neki drugi manje složeni softveri, u nekim slučajevima besplatni, mogu da pruže zadovoljavajuće odgovore na pojedine zahteve projektnih zadataka u oblasti tehnološkog projektovanja.

STUDIJA SLUČAJA SEPARACIJE PRIRODNOG GASA

Kako bi se utvrdila upotrebljivosti i pouzdanost PS prilikom projektovanja realnog procesa napravljena je studija slučaja simuliranja postojećeg procesa u više inženjerskih programa za projektovanje. Na osnovu dostupnih podataka za simulaciju je odabran je jedan relativno jednostavan proces, deo primarnog tretmana prirodnog gasa, separacija. Ovaj proces odvija se u više koraka. Svi podaci odabranog procesa dobijeni su u saradnji sa distributerom prirodnog gasa i zaštićeni su poslovnim tajnom. Ovaj proces je odabran kako bi rezultati simulacije mogli da budu upoređeni sa dostupnim realnim parametrima procesa, odakle se više može zaključiti o upotrebljivosti procesnih simulatora prilikom tehnološkog projektovanja. Navedeni proces

simuliran je u 7 različitih PS na osnovu zadatka u nastavku, a rezultati su upoređeni sa dostupnim podacima iz referentnog postrojenja.

Zadatak simulacije

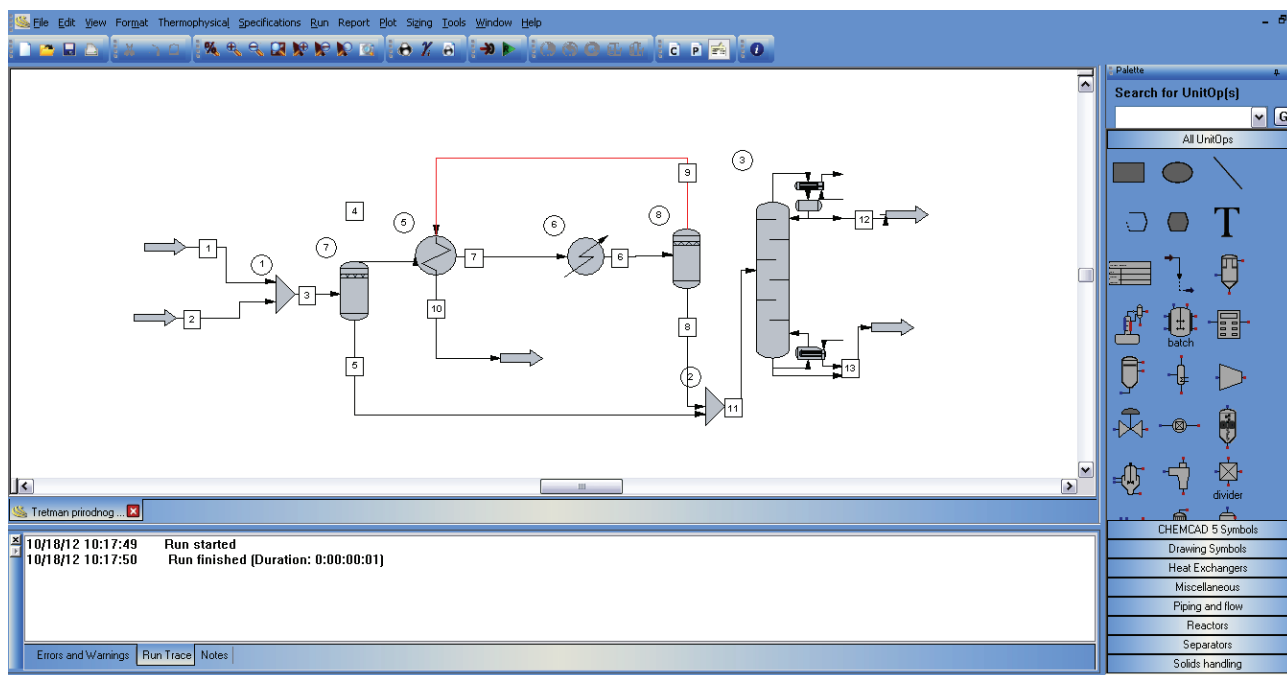
Dva materijalna toka prirodnog gasa 1 i 2, definisana u tabeli 8, nakon spajanja u mešaču (MIX-100), tretiraju se u separatoru (InletSep) za gas-tečno. Gasni tok 4 iz separatora se dalje hladi prvo u razmenjivaču toplote (razmenjivač toplote), zatim u električnom hladnjaku (Chiller), pre nego što uđe u sledeći separator (LTS) za gas-tečno. Gasna faza iz drugog separatora (tok 9) se koristi za rashlađivanje u razmenjivaču odakle izlazi tok 10 koji sadrži izlazni gas, čija je karakteristika povećan sadržaj metana. Tečna faza, tok 5, iz prvog separatora (InletSep) i drugog separatora (Sep2), tok 8, se spajaju u jedan tok koji se nakon mešanja u mešaču (MIX-200) dalje upućuje u destilacionu kolonu – Depropanizer, slika 4. Iz kolone izlaze lakša i teža frakcija tokovi 12 i 13.

Tabela 8. Karakteristike ulaznih struja procesa
Table 8. Inlet flow data

Materijalni tok 1 (molski udeo)		Materijalni tok 2 (maseni udeo)	
N ₂	0,01	N ₂	0,02
CO ₂	0,01	CO ₂	0,00
Metan	0,60	Metan	0,40
Etan	0,20	Etan	0,20
Propan	0,10	Propan	0,20
i-Butan	0,04	i-Butan	0,10
n-Butan	0,04	n-Butan	0,08

Za shemu toka prikazanu na slici 4 poznati su sledeći radni parametri: sastav, temperatura i protok ulaznih materijalnih tokova, pad pritiska u svim uređajima, zadata temperatura na izlazu iz hladnjaka. Za potrebe projektovanja neophodno je odrediti: sastav svih materijalnih tokova, dimenzionisati opremu, odrediti zahteve za grejanje i hlađenje, neophodnu površinu za toplotnu razmenu, temperaturu i sastav prodajnog gasa nakon razmenjivača.

Na osnovu dostupnih informacija protok materijalnog toka 1 iznosi 7597,7 kg/h, dok je protok toka 2: 4989,5 kg/h. U oba slučaja: $T = 15,5 \text{ }^\circ\text{C}$ ($60 \text{ }^\circ\text{F}$), $p = 41,4 \text{ bar}$ (600 psi). Pad pritiska u svim mešačima je 0 bar, u razmenjivaču po 0,7 bar u omotaču i cevi (broj prolaza fluida u cevi i omotaču: 1), dok je za oba separatora pad



Slika 4. Procesna šema iz radnog okruženja simulatora Chem Cad.
Figure 4. Flow diagram form ChemCad interface.

pritiska po 0,7 bar, kondenzatora i rebojlera 0 bar, kolone 0 bar. Izlazna struja iz električnog hladnjaka je na temperaturi od $-17,8$ °C. Minimalna razlika temperatura u razmjnjivaču je 10 °F. Destilaciona kolona ima 10 teorijskih podova. Pritisak u rebojleru je 14,1 bar, a temperatura 93,3 °C. Pritisak u kondenzatoru iznosi 13,8 bar, a temperatura 4,44 °C. Refluksni odnos je 1, a udeo gasne faze koja se vraća je 2. Ukoliko je dostupna, korišćena je Peng-Robinsonova jednačina.

U cilju demonstracije mogućnosti softvera u oblasti projektovanja obuhvatiti: dimenzioniranje opreme, procenu efikasnosti procesa i odrediti energetske zahteve električnih uređaja, proveriti koncepta procesa, i uraditi materijalni i energetski bilans. Sve simulacije se izvode pri istim uslovima, u sledećim procesnim simulatorima: Aspen Hysys (2.9), AspenPlus (7.1), DWSim, Design II (11.8), Super Pro Designer (5.1) i ChemCAD (6.0), Coco Simulator (2.05).

REZULTATI I DIKUSIJA

U ovom poglavlju dati su uporedni rezultati simuliranog procesa po ključnim parametrima primarne separacije prirodnog gasa iz prethodno definisanog zadatka, a nastali nakon obavljanja više simulacija i provera u navedenim softverima, tabela 9.

Prilikom simulacije u svim navedenim softverima korišćeni su sledeći modeli uređaja: mešač (dvofazni, sa dva ulaza), separator (sa ciljem razdvajanja gasne i tečne faze ili flash bez operacije dogrevanja), razmenjivač toplote (sa cevnom snopom i omotačem,

unakrsni, suprotnostrujni), hladnjak (električni, bez pomoćnog fluida), destilaciona kolona sa podovima (sa parcijalnim kondenzatorom i rebojlerom).

Svi softveri su u svojim bazama podataka imali odgovarajuće ili približne modele ovih uređaja. Najveća prepreka u simuliranju ovog problema bila je u prvom koraku separacije, jer nisu svi simulatori uspeali da, bez dodatnih podešavanja, odvoje gasnu od tečne faze, što je dalje uticalo na razlike u materijalnom i energetskom bilansu. Slučajne greške poput odabira masenog umesto molskog protoka, imale su značajan uticaj na preciznost rezultata.

Svi korišćeni modeli separatora (*flash* uređaja), u svim PS, imaju kao osnovnu mogućnost dogrevanja smeše radi boljeg razdvajanja faza ili mogućnost promene pritiska, koja u ovom slučaju nije korišćena. Neki su zasnovani na osnovnim jednačinama ravnoteže paratečnost dok drugi daju mogućnost korisniku da odabere odgovarajuće jednačine stanja među nekoliko ponuđenih opcija. Najdetaljniji model separatora nalazi se u okviru softvera Hysys.

Prilikom simuliranja električnog hladnjaka u svim PS jednostavno se dolazi do podešavanja ovog uređaja, a rezultati se kreću u širem opsegu od 173 do čak 480 kW. Ove vrednosti direktno su zavisne od prethodno dobijenih vrednosti protoka i temperature ulaznog toka, a ti parametri su varirali od slučaja do slučaja.

Potrebno je obratiti pažnju na rezultate koje softveri daju prilikom simulacije hladnjaka, jer se negde rezultat odnosi na preporučenu instalisanu snagu aparata, negde na realnu snagu ili se daje veći broj jedinica

Tabela 9. Prikaz rezultata uporedne simulacije u više različitih softvera
Table 9. Results form side by side process simlaton in different softwares

Rezultat	Jedinica	Viši cenovni rang		Srednji cenovni rang			Besplatni softveri		Srednja vrednost
		HYSYS	AspenPlus	SuperPro Designer	ChemCAD	Design II	Coco Simulator	DWSIM	
Temperatura toka 10	°C	9,9	2,9	5,0	10,0	5,6	15,6	–	11,3
Površina za toplotnu razmenu	m ²	5,1	6,5	6,9	4,1	37,8	–	–	13,1
Snaga hladnjaka	kW	315,0	378,3	245,4	481,5	380,0	173,0	–	328,7
Protok na ulazu u kolonu	kg/h	5270,7	5344,2	5589,1	5453,0	5236,2	3802,0	–	5115,8
Sadržaj metana u „izlaznom gasu“	mas.%	59,8	76	60,9	79,9	64,7	62,5	–	67,3
Sadržaj butana u težoj frakciji kolone	mas.%	98,0	71	91,9	98,7	99,1	–	–	91,7

manje snage. Zbog toga je značajano napraviti uvid u teorijske osnove na kojima su izrađeni modeli korišćenih uređaja.

S obzirom na to da nemaju svi softveri rigorozan proračun razmenjivača toplote, koji obuhvata i detaljnu geometriju, izbor materijala i sl., u softverima Hysys i AspenPlus su korišćeni pojednostavljeni modeli ovog uređaja.

Svaki procesni simulator ima drugačiji metod proračuna razmenjivača toplote i on se kreće od najjednostavnijeg – izborom minimalne razlike temperatura, najčešće korišćenog prilikom ove simulacije, do detaljnog izbora geometrije, metode, materijala ili rasporeda i broja cevi u omotaču.

Dobijeni rezultati za temperaturu po ključnim parametrima su u relativno malom odstupanju od obračunate srednje vrednosti, a u okviru granica parametara realnog procesa. Najveći broj rezultata poklapa se u opsegu od ± 5 °C za traženu temperaturu, ili u opsegu od $\pm 10\%$ u odnosu na sastav toka po odabranoj komponenti ili površini za toplotnu razmenu, te bi mogli da budu prihvatljivi u početnim fazama projektovanja procesa.

Očekivano najteži deo za podešavanje modela uređaja u svih sedam simulatora, bilo je podešavanje destilacione kolone. Rezultati u svim softverima bili su u okviru realno očekivanog opsega. Očekivani minimalni zbirni sadržaj i-butana i n-butana od preko 90% u težoj frakciji iz Depropanizera ostvaren je u 4 od 5 softvera, izuzev kod AspenPlus-a (71%).

Obzirom da je primer procesa dat je iz prakse jednog domaćeg distributera prirodnog gasa, a prema tim podacima prirodni gas nakon postupka separacije, u zavisnosti od sastava ulaznog gasa, najčešće sadrži preko 98–99 mas.% obe frakcije butana, što je ostvareno u 3 od 6 prikazanih softvera za simulaciju. Najzahtevnije je bilo podesiti kolonu u AspenPlus-u i SuperPro Designer-u.

Važno je napomenuti da su noviji softveri lakši za učenje, a kako je pokazano u ovom slučaju, to da li je softver besplatan ili komercijalan ne mora presudno da utiče na njegovu pouzdanost. Međutim softveri u čiji razvoj je uloženo više novca mogu po očekivanju imati bolje razrađene modele uređaja, detaljnije razrađene operacije ili kvalitetnije i obuhvatnije baze podataka.

Besplatni ili jeftiniji PS mogli bi da posluže za obuku i edukaciju studenata, a pri tom pružaju dobre osnove za korišćenje skupljih i naprednijih softvera u ovoj oblasti. U odabranom softveru DWSIM nije bilo moguće izvršiti simulaciju tretmana prirodnog gasa, jer razmenjivač toplote ne konvergira, a ovakav rezultat je očekivan obzirom da se radi o novom softveru koji se još uvek nalazi u fazi razvoja.

Svim procesnim simulatorima, navedenim u okviru ovog poglavlja, se intuitivno rukuje, iako se njihova radna okruženja zasnivaju na različitim načinima unosa podataka.

Većina dostupnih softvera omogućava bar najosnovnije operacije u procesima sinteze i prerade hemijskih proizvoda, razmene toplote, tretmana otpadnih voda i separacije. Mogućnosti softvera mogu se poboljšati dodatnom razradom otvorenih modela i dopunom baza podataka.

Najveći broj PS primenljiv je u industriji nafte i gasa. Ekspanzija industrije nafte i gasa u poslednjih nekoliko decenija uslovlila je primarni razvoj softvera u ovom pravcu, te danas većina softvera omogućava precizne simulacije.

U poslednje vreme primetan je trend uže specijalizacije simulatora te oni sada sadrže podprograme prilagođene za rigoroznu simulaciju određenih postrojenja ili uređaja (hidrokreking, hidrotroting, bioreaktora, baklji i mreže razmenjivača toplote).

Mane savremenih softvera, mogu biti zatvorenost pojedinih modela za izmene, nedostatak pojedinih operacija, nedovoljno precizna podešavanja uređaja, male i

nekompletne baze komponenti i slično, lako mnogi od softvera ostavljaju slobodne opcije da korisnik sam programira ili kreira modele novih uređaja ili tehnoloških operacija, osnovana je pretpostavka da veliki broj korisnika u industrijskim uslovima, bez pomoći neke razvojno-istraživačke institucije, neće biti u prilici da napravi i razvije kvalitetne modele.

ZAKLJUČAK

U ovom radu dat je pregled više od 20 savremenih procesnih simulatora ili srodnih programa, od kojih su neki detaljnije opisani ili upotrebljeni u studiji slučaja separacije prirodnog gasa. Date su preporuke za njihovu primenu u zavisnosti od njihove bliže namene ili mogućnosti po oblastima hemijske industrije, sa posebnim osvrtom na značaj koji imaju prilikom projektovanja procesa. Procesni simulatori su razdvojeni na procesne simulatore u užem smislu i pomoćne programe prilikom projektovanja. Svi su klasifikovani prema mogućnostima primene i osnovnim parametrima.

Date su uporedne karakteristike rezultata simuliranja separacije prirodnog gasa za potrebe projektovanja procesa, na osnovu simulacija u softverima različitih složenosti i kvaliteta. PS su pokazali svoju upotrebnu vrednost kao značajan oslonac projektantima, iako su rezultati koje su dali pokazali međusobno značajna odstupanja. Ipak, uporedne simulacije separacije prirodnog gasa u najskupljim softverima dale su približne rezultate, što potvrđuje da su savremeni procesni simulatori na visokom nivou pouzdanosti, bez obzira što su zasnovani na različitim modelima, jednačinama, metodama operacija, interfejsima ili različitim bazama podataka.

Procesni simulatori utiču na skraćivanje predprojektivnih faza poput istraživanja i razvoja, time dovode do brže komercijalizacije industrijskih ideja. Pored svih navedenih prednosti važno je napomenuti da je za kvalitetno projektovanje procesa i dalje je neophodno dosta vremena, a da su sami simulatori samo oruđe u rukama projektanata, koji ipak sve rezultate moraju potvrditi i na sve druge načine.

Zahvalnica

Istraživanja u ovom radu izvršena su u okviru aktivnosti na projektu TR 34009 koji finansira Ministarstvo prosvete, nauke i tehnološkog razvoja Republike Srbije.

LITERATURA

[1] R. Gani, E.N. Pistikopoulos, Property Modelling and Simulation for Product and Process Design, *Fluid Phase Equilib.* **194–197** (2002) 43–59.

- [2] M. Kellner, R. Madachy, D. Raffo, Software Process Modeling and Simulation: Why, What, How, *J. Sys. Software* **46** (1999) 91–105.
- [3] T.B. Thompson, Chemical Industry of the Future: Technology Roadmap for Computational Chemistry, Council for Chemical Research, http://www1.eere.energy.gov/manufacturing/resources/chemicals/pdfs/compchemis try_roadmap.pdf, septembar 2012.
- [4] M. Jovanović, Osnovi projektovanja I deo: Teorija projektovanja, Tehnološki fakultet, Leskovac, 1994, str. 164.
- [5] M. Jovanović, Osnovi tehnološkog projektovanja, SHTS, Beograd, 2004.
- [6] M. Jovanović, Z. Popović, Razvoj procesa: Procesna ekonomika sa studijama slučaja hemijske tehnologije, SHTS, Beograd, 2003.
- [7] R. Omorjan, Modelovanje i simulacija procesa, Tehnološki fakultet, Univerzitet u Novom Sadu, http://www.tf.uns.ac.rs/omorjan/radovan_omorjan_003_hip/1uvod.pdf, oktobar 2012.
- [8] http://www.aspentech.com/solutions/industry_solution_s/epc/index.aspx, septembar 2012.
- [9] Q. Smejkal, M. Šoóš, Comparison of computer simulation of reactive distillation using Aspen Plus and Hysys software, *Chem. Eng. Process.* **41** (2002) 413–418.
- [10] M. Nikooa, N. Manhinpey, Simulation of biomass gasification in fluidized bed reactor using Aspenplus, *Biomass Bioenerg.* **32** (2008) 1245–1254.
- [11] M. Tasić, O. Stamenković, V. Veljković, Simulacija metanolize suncokretovog ulja u Aspen Plus i Hysys softveru, VIII Simpozijum savremene tehnologije i privredni razvoj, Zbornik izvoda radova, Leskovac, oktobar 2009, str. 166.
- [12] WinSim Co., Advanced Process Simulation Solutions, www.winsim.com/ourbrochure, novembar 2012.
- [13] D. Živković, „Software for the simulation processes in CHP plants“, MF Niš, http://simterm.masfak.ni.ac.rs/proceedings/13-2007/papers/sessions/5_Matematicko_modeliranje_i_numericka_simulacija/5-4/GZivkovic_MFNis.pdf, PROCESING'12, Beograd, jun 2012.
- [14] J. Sadeq, H. Duarte, R. Serth, Anomalous results from process simulators, *Chem. Eng. Educ.* **31** (1997) 46–51.
- [15] H. Zhang, B. Kitchenham, D. Pfahl, „Software Process Simulation Modeling: Facts, Trends and Directions“, 15th Asia-Pacific Software Engineering Conference, Peking, China, 3–5 december, 2008.
- [16] N. Nishida, G. Stephanopoulos, A. Westerberg, A Review of Process Synthesis AIChE, *J.* **27** (2004) 321–352.
- [17] T.M. Komulainen, R. Enemark-Rasmussen, G. Sin, J.P. Fletcher, D. Cameron, Experiences on dynamic simulation software in chemical engineering education, *Education for Chemical Engineers* **7** (2012) e153–e162.
- [18] M. Fermeglia, S. Pricl, and G. Longo, Molecular Modeling and Process Simulation: Real Possibilities and Challenges, *Chem. Biochem. Eng. Q.* **17** (2003) 19–29.
- [19] L. Castillo, C.A. Dorao, Decision-making in the oil and gas projects based on game theory: Conceptual process design, *Energy Convers. Manage.* **66** (2013) 48–55.

SUMMARY

Application of process simulators in chemical engineering PROCESS design –natural gas separation plant case study

Dimitrije Ž. Stevanović¹, Mića B. Jovanović², Marina A. Mihajlović¹, Jovan M. Jovanović¹, Željko B. Grbavčić²

¹*Innovation Center, Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Belgrade, Serbia*

²*Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Belgrade, Serbia*

(Professional paper)

Software for chemical processes modeling and simulation, in the past few decades, plays an important role in the development of chemical-process industry with its growing capabilities and wide range of application. Usage of process simulators in Serbia for the process design is very limited. This paper gives a brief overview of the numerous process simulators that are used in the chemical-process industry today. The conceptual design is responsible for most of the investment costs in chemical process industry. Importance of precise design on preliminary level is obvious. Wrong decisions made at the conceptual level could be carried out throughout the chain in process design to the detailed design procedures and procurement of equipment. Although preliminary design phase comprises only about 2% of the total cost of the project, it contributes significantly to the reduction of cost of the project by more than 30%. Therefore process simulators play important role in elimination of unnecessary errors in basic process design. Here is also shown a case study of parallel process simulated in different process simulators which tests the results, the reliability and usefulness of these programs in solving specific engineering tasks. Comparison of given simulation results confirm that the modern process simulators are at high level of confidence, no matter they are based on different models, equations, methods, operations, interfaces or data bases. Usage of software speeds up the arrival of optimized solution during the design and the operational procedures. Therefore software has significant impact on reducing time of pre-project phase such as research, conceptual design, and proving project abilities. Its development leads to the faster commercialization of industrial ideas.

Keywords: Process simulators • Chemical engineering process design • Natural gas treatment plant simulation