



Aalto-yliopisto
Kemian tekniikan
korkeakoulu

Kemian tekniikan korkeakoulu
Kemian tekniikan tutkinto-ohjelma

Antti Räisänen

REAALIAIKAISEN LASKENTAOHJELMISTON
ARKKITEHTUURIKEHITYS JA YLEISTYS
MONITUOTETISLAUSKOLONNEILLE

**Diplomityö, joka on jätetty opinnäytteenä tarkastettavaksi diplomi-
insinöörin tutkintoa varten Espoossa 11.2.2014.**

Valvoja

Professori Sirkka-Liisa Jämsä-Jounela

Ohjaajat

DI Veli Vanhamäki, DI Samuli Bergman

Tekijä Antti Räisänen

Työn nimi Reaaliaikaisen laskentaohjelmiston arkkitehtuurikehitys ja yleistys monituotetislauskolonneille

Laitos Biotekniikan ja kemian tekniikan laitos

Professuuri Prosessien ohjaus

Professuurikoodi KE-90

Työn valvoja Professori Sirkka-Liisa Jämsä-Jounela

Työn ohjaaja(t)/Työn tarkastaja(t) DI Veli Vanhamäki, DI Samuli Bergman

Päivämäärä 11.2.2014

Sivumäärä 100 + 10

Kieli Suomi

Tiivistelmä

Prosessiteollisuudessa tärkeä edellytys kilpailukyvyllä on valmistettujen tuotteiden tasainen laatu. Sen vuoksi tuotelaatua kuvaavaa tietoa on oltava jatkuvasti saatavilla, jotta prosesseja voidaan ohjata optimaalisesti ylätasoa säätämien avulla. Tämä diplomityö käsittelee reaaliaikaista laskentaohjelmistoa, joka on tarkoitettu monituotetislauskehoon, operointiin ja reaaliaikaiseen optimointiin vaadittavien laskentojen suorittamiseen. Työn tavoitteena on laatia laskentaohjelmistolle uudistettu arkkitehtuuri, joka mahdollistaa helpomman ja nopeamman laskentojen konfiguroinnin sekä yleistää reaaliaikaiset laskennat erilaisille, toisistaan huomattavan paljon eroaville öljy- ja petrokemian teollisuuden monituotetekolonneille.

Kirjallisuusosassa tarkasteltiin monituotetislauskehoon ilmiöitä sekä yleisten, reaaliaikaisesti määritettävien laskennallisten suureiden ennustamiseen liittyviä sovelluksia. Sen lisäksi esiteltiin ja arvioitiin kaupallisia, tislaukskolonnien laskennallisten suureiden ennustamiseen soveltuvia soft sensor -ohjelmistoja. Kokeellisessa osassa laskentaohjelmistolle suunniteltiin ja toteutettiin uudistettu ohjelmistoarkkitehtuuri sisältäen monituotetekolonnin mallintavan kirjaston, graafisen konfigurointityökalun sekä uudistetun sovelluksen reaaliaikaisten laskentojen suorittamiseen. Lisäksi laskennan algoritmeja uudistettiin siten, että laskenta on yleistetty öljynjalostus- ja petrokemian teollisuuden monituotetekolonneille kolonnin rakenteesta, instrumentaatiosta ja lähtötiedoista riippumatta.

Uudistetun ratkaisun toiminta testattiin kaupallisia prosessisimulaattoreita ja herkkyysanalyysia hyödyntäen. Laskennan konfiguroinnin todettiin olevan helpompaa, nopeampaa ja suoritettavissa lähdekoodia muokkaamatta monimutkaisillekin monituotetekolonneille. Ratkaisu todettiin myös edellistä vikasietoisemmaksi, operaattorille informatiivisemmaksi sekä yhteensopivammaksi modernien automaatio- ja informaatioteknisten järjestelmien kanssa.

Avainsanat Monituotetislaus, reaaliaikainen, laskenta, ohjelmisto, soft sensor

Author Antti Räisänen

Title of thesis Architecture development of a real-time inferential calculation software and generalization for multi-product distillation columns

Department Department of Biotechnology and Chemical Technology

Professorship Process Control

Code of professorship KE-90

Thesis supervisor Professor Sirkka-Liisa Jämsä-Jounela

Thesis advisor(s) / Thesis examiner(s) M.Sc. Veli Vanhamäki, M.Sc. Samuli Bergman

Date 11.2.2014

Number of pages 100 + 10

Language Finnish

Abstract

Uniform quality of products is a fundamental prerequisite for competitiveness in the process industry. Therefore, real-time information concerning product quality must be available for high-level controllers to achieve optimal control of the production process. This thesis examines a software package for performing real-time inferential calculations required in control, operation and real-time optimization of multi-product distillation columns. The aim is to create a new architecture for the software, enabling easier and faster configuration of real-time calculations and generalizing the calculation procedures to be suitable for different, highly versatile multi-product columns in refining and petrochemical industries.

The literature part of this thesis studies the phenomena related to multi-product distillation and industrial applications of predicting real-time inferential key variables. In addition, it presents and evaluates commercial software suitable for developing soft sensors in distillation columns. In the experimental part a new architecture was designed and implemented for the real-time calculation software, including a library module for modeling multi-product columns, a graphical configuration tool and a renewed application for performing the actual real-time calculations. Furthermore, algorithms were redesigned and generalized for multi-product columns in refining and petrochemical industries, regardless of their versatility in column structure, instrumentation and information available.

The functionality of the redesigned solution was tested utilizing commercial process simulator software and sensitivity analysis. The configuration of calculations turned out to be easier, faster and implementable without editing the source code of the software even for complex multi-product columns. The solution was also proven to be more fault-tolerant, informative for the operator and compatible with modern automation and information systems.

Keywords Multi-product distillation, real-time, inferential calculation, software, soft sensor

Esipuhe

Tämä diplomityö on tehty Neste Jacobs Oy:n automaatioteknologian osastolla aikavälillä 27.5.2013 – 24.11.2013.

Aluksi haluan kiittää professori Sirkka-Liisa Jämsä-Jounelaa työn valvomisesta. Lisäksi kiitän Sirkka-Liisaa mahdollisuudesta työskennellä tutkimusapulaisena prosessin ohjauksen ja automaation tutkimusryhmässä 2010 – 2011. Tutkimusryhmässä työskentelyn myötä minuun tarttui aito kiinnostus opintoalastani.

Haluan myös kiittää kollegojani Neste Jacobsilla. Erityisen kiitoksen ansaitsevat rautaisen ammattitaidon omaavat ohjaajat Veli Vanhamäki ja Samuli Bergman erinomaisesta perehdytyksestä, diplomityön kommentoinnista ja neuvojensa jakamisesta aina, kun niitä tarvitsin. Ohjaajien lisäksi kiitokset minua työssä auttaneille Lauri Haapaselle, Martti Ojalalle, Janne Oksaselle, Jussi Koskelalle, Andreas Frejborgille ja Markus Sintoselle. Jyri Lindholmia haluan kiittää mahdollisuudesta diplomityön tekemiseen mitä mielenkiintoisimmassa työpaikassa. Edellä mainittujen lisäksi haluan kiittää koko automaatioteknologian porukkaa hyvästä ilmapiiristä ja virkistävästä kahvitteluhetkestä.

Haluan kiittää vanhempiani suuresti onnellisesta nuoruudesta sekä minun tukemisestani niin opiskeluissa, kuin muillakin elämäni osa-alueilla. Kiitokset kolmelle siskolleni ja ystävilleni hauskaista ja rattoisasta seurasta, jossa työ- ja opiskeluhuolet unohtuivat alta aikayksikön. Lopuksi, suurin kiitos kuuluu rakkaalle tyttöystävälleni Heidille tuesta, uskosta, kannustuksesta ja rakkaudesta kaikkina hetkinä, kaikissa tilanteissa näiden vuosien ajan.

Sisällysluettelo

1 Johdanto	1
1.1 Työn tausta	1
1.2 Työn tavoitteet.....	2
1.3 Työn rakenne	2
1.4 Työn rajaus.....	3
KIRJALLISUUSOSA.....	4
2 Monituotetislauksen teoria	5
2.1 Yleistä.....	5
2.2 Monituotekolonniien konfiguraatiot.....	5
2.3 Monituotekolonniin laskennat	7
2.3.1 Pseudokomponentit ja tislaukikäyrät	7
2.3.2 Hiilivetyseosten perusominaisuudet	8
2.3.3 Taseet ja sisäiset virtaukset	11
2.3.4 Tulvimislaskennat	14
2.3.5 Leikkauspisteet	16
2.3.6 Energiakäytön optimointi	18
3 Tuotelaatujen estimointi monituotekolonneissa	23
3.1 Estimoinnin merkitys tuotelaatujen säädössä.....	23
3.2 Tuotelaatujen estimoinnin menetelmät.....	24
3.2.1 Prosessi-ilmiöihin perustuvat fysikaalis-kemialliset mallit	25
3.2.2 Neuroverkkomallit	27
3.2.3 Tilastolliset mallit	28
3.2.4 Hybridimallit	29

3.3 Yhteenveto.....	30
4 Kaupalliset soft sensor -ohjelmistot	31
4.1 Neste Jacobs NAPCON Indicator.....	32
4.2 Emerson SmartProcess Distillation.....	33
4.3 ExperTune ProcessApex Distillation	34
4.4 AspenTech aspenOne Advanced Process Control	35
4.5 ABB Optimize IT Inferential Modeling Platform	36
4.6 Honeywell Profit SensorPro	37
KOKEELLINEN OSA.....	39
5 Nykyinen ratkaisu.....	40
5.1 Kolonnilaskentojen algoritmit.....	41
5.2 Järjestelmäarkkitehtuuri	44
5.2.1 Kolonnilaskentojen järjestelmäarkkitehtuuri	44
5.2.2 Muiden NAPCON Indicator -laskentojen järjestelmäarkkitehtuuri	45
5.3 Ohjelmistoarkkitehtuuri.....	47
5.3.1 Kolonnilaskentojen ohjelmistoarkkitehtuuri	47
5.3.2 Muiden NAPCON Indicator -laskentojen ohjelmistoarkkitehtuuri	48
5.4 Konfigurointi ja räätälöinti.....	50
5.5 Nykyisen ratkaisun parannuskohteet	51
6 Uudistettu ratkaisu	53
6.1 Järjestelmäarkkitehtuuri	53
6.2 Ohjelmistot ja kirjastot	55
6.2.1 Monituotekolonnin tietomalli	56
6.2.2 Konfigurointityökalun toiminta	58

6.2.3 Reaaliaikainen laskentasovellus	62
6.3 Laskenta-algoritmit	65
6.3.1 Kolonnilaskentojen suoritus	65
6.3.2 Kolonnin taseiden muodostaminen.....	68
6.3.3 Sisäisten virtausten ratkaiseminen.....	71
7 Testaus	74
7.1 Testikolonnin kuvaus	74
7.2 Testiympäristöjen kuvaus	76
7.3 Tulokset.....	77
7.3.1 Taselaskennan testaus stationääritilassa	77
7.3.2 Taselaskennan dynamiikan testaus	79
7.3.3 Numeerisen herkkyyden testaus	82
7.4 Uudistetun ratkaisun hyödyt	85
8 Yhteenveto.....	87
9 Jatkotutkimusehdotukset	90
Lähdeviitteet	92

Liitteet

Liite 1. Laskentarutiinien konfigurointiparametrit

Liite 2. Yleisiä lähdekoodin muokkausta vaativia räätälöintimäärittelyjä

Liite 3. NNLS-algoritmi (Lawson & Hanson, 1974)

Liite 4. Sisäisten virtausten laskentatulosten vertailu ProsDS:llä simuloituihin tuloksiin

Liite 5. Herkkyyksianalyysi: mittaus- ja vakioarvojen minimi- ja maksimitestaus

Symboliluettelo

Latinalaiset symbolit

a	Empiirinen termi ominaisentalpian estimoinnissa
A_A	Erotuspohjan aktiivinen pinta-ala
A_D	Paluukaukalon poikkipinta-ala
A_T	Erotuspohjan todellinen pinta-ala
API	API-aste
b	Empiirinen termi ominaisentalpian estimoinnissa
B	Monituotekolonnin pohjatuotteen massavirta
c	Empiirinen termi ominaisentalpian estimoinnissa
C_f	Hiilivetyhöyryn kapasiteettikerroin
c_p	Ominaislämpökapasiteetti
EFV_0	Alkukiehumispiste
f_f	Vaahoamiskerroin
F_i	Syötön massavirta tasealueeseen i
F_J	Tulvimisprosentti
$F_{J,1}$	Tulvimisprosentti menetelmällä 1 laskettuna
$F_{J,2}$	Tulvimisprosentti menetelmällä 2 laskettuna
$F_{J,D}$	Paluukaukalon tulvimisprosentti
h	Ominaisentalpia
H_V	Seoksen höyrystymisentalpia
HK_B	HK-pitoisuus pohjatuotteessa
HK_D	HK-pitoisuus tisleessä
$HK_{D,opt}$	Optimaalinen HK-pitoisuus tisleessä

HKW	Raskaan avainkomponentin massaosuus
i	Tasealuetta tai erotuspohjaa kuvaava indeksi
J	Kustannusfunktio
k	Komponenttia tai pseudokomponenttia kuvaava indeksi
K_{HK}	Konfiguroijan valitsema kerroin mooliosuuden laskennassa
K_i	TBP-korrelaation regressiokerroin tai vakio
l_F	Virtauskanavan pituus
L_i	Poistuva hiilivetynesteiden massavirta tasealueesta i
$L_{k,i}$	Kiertopalautusnestevirta tasealueessa i
L_R	Monituotekolonnin huipun palautuksen massavirta
$L_{R,cond}$	Huipun palautusvirran kondensoiman nesteen massavirta
$L_{vol,i}$	Poistuva hiilivetynesteiden tilavuusvirta tasealueesta i
l_t	Erotuspohjien välimatka
LK_B	LK-pitoisuus pohjatuotteessa
$LK_{B,opt}$	Optimaalinen LK-pitoisuus pohjatuotteessa
LK_D	LK-pitoisuus tisleessä
M	Moolimassa
K_w	Watsonin karakterisointikerroin
p_E	Energian hinta
p_{HK}	Raskaan avainkomponentin arvo
p_{LK}	Kevyen avainkomponentin arvo
P	Paine
P_k	Komponentin k höyrynpaine
\dot{Q}_i	Lämmönvaihtimen tai uunin lämpövirta tasealueeseen i

R	Kaasuvakio
s	Pseudokomponenttikohtainen vakio ominaispainon laskennassa
SF	Erotuskyky
SF_D	Tulvimiseen liittyvä varmuuskerroin
$SG_{60\text{ }^\circ\text{F}}$	Ominaispaine lämpötilassa 60 °F
SG_k	Pseudokomponentin k ominaispaine
SG_f	Syötön ominaispaine
SS_i	Sivu-ulosoton massavirta tasealueesta i
STM_i	Vesihöyryn massavirta tasealueeseen i
$STM_{i,S}$	Strippaushöyryn massavirta tasealueeseen i
$T_{b,avg}$	Keskimääräinen kiehumispiste
T_{CP}	Leikkauspistelämpötila
T_{TBP}	Lämpötila todellisen kiehumispisteen käyrällä
v_D	Virtausnopeus paluukaukalossa
V_i	Hiilivetyhöyryn massavirta tasealueeseen i
\dot{V}_i	Tunnettu tilavuusvirta tasealueeseen i
$V_{vol,i}$	Hiilivetyhöyryn tilavuusvirta tasealueeseen i
x_L	Nestefaasin massaosuus
Y	Saanto massaosuutena
Y_k	Komponentin k mooliosuus

Kreikkalaiset symbolit

β	Kolonnin karakterisointikerroin
ΔP_{tr}	Tislauspohjan painehäviö

ρ_L Nesteen tiheys

ρ_V Höyryn tiheys

Lyhenneluettelo

API	American Petroleum Institute
ASTM	American Society for Testing and Materials
DCS	Distributed Control System, hajautettu automaatiojärjestelmä
DLL	Dynamic-Link Library, dynaamisesti linkitetty kirjasto
DMC	Dynamic Matrix Control
DSS	Dynamic Sub-Space
EFV	Equilibrium Flash Vaporization
FIR	Finite Impulse Response
FPM	First Principles Model
HK	Heavy Key, raskas avainkomponentti
LIMS	Laboratory Information Management System
LK	Light Key, kevyt avainkomponentti
NNLS	Non-Negative Least Squares, ei-negatiivinen PNS-menetelmä
OLE	Object Linking and Embedding
OPC	OLE for Process Control / Open Platform Communications
OPC UA	OPC Unified Architecture
PCR	Principal Component Regression, pääkomponenttiregressio
PLS	Partial Least Squares, osittainen PNS-menetelmä
PNS	Pienimmän neliösumman menetelmä
RMSE	Root Mean Squared Error
RVP	Reid Vapor Pressure, Reidin menetelmän höyrynpaine
SF	Separation Factor, erotuskyky
SG	Specific Gravity, ominaispaino

STM	Vesihöyryvirta
TBP	True Boiling Point, todellinen kiehumispiste
UML	Unified Modeling Language
XML	eXtensible Markup Language

1 Johdanto

1.1 Työn tausta

Prosessiteollisuudessa tärkeä edellytys kilpailukyvyllä on valmistettujen tuotteiden tasainen laatu. Sen vuoksi tuotelaatua kuvaavaa tietoa on oltava jatkuvasti saatavilla, jotta prosesseja voidaan ohjata optimaalisesti ylätason säätimien avulla. Tislausprosesseissa kolonnista saatavien tuotteiden laatua kuvaavat suureet voidaan tyypillisesti määrittää siihen tarkoitettun on-line -analysointilaitteen avulla. Jokaiseen kolonnin tuotevirtaan ei aina kuitenkaan ole mahdollista asentaa analysointilaitteiden korkean hinnan ja hankalan huollettavuuden takia. Lisäksi analysointilaitteen mittausväli saattaa mitattavasta tuotevirrasta riippuen olla esimerkiksi yhden tunnin luokkaa, mistä johtuen pelkän analysointilaitteen avulla ei saada hyväksyttävää säätötulosta. Näissä tapauksissa ainoa keino pitoisuuksien reaaliaikaiseen määrittämiseen on niiden ennustaminen niin kutsuttujen soft sensorien avulla.

Neste Jacobs Oy:llä on kehitetty NAPCON Indicator -ohjelmisto, jonka avulla voidaan räätälöimällä kehittää erilaisia reaaliaikaisia laskentia prosessien operoinnin ja säädön tehostamiseksi. Eräs NAPCON Indicatorin sovellus on monituotetislausprosessit, joille ohjelmisto laskee prosessimittausten, laboratorioanalyysien sekä konfigurointivaiheessa räätälöityjen tietojen perusteella kolonnin säädön ja operoinnin kannalta oleellisia tietoja, kuten kolonnin sisäisiä virtauksia, tulvimisprosentteja, leikkauspisteitä ja optimaalisen energiakäytön kiehutuksessa. Näiden lasketut arvot perustuvat pääosin kolonnin stationääritilan taseisiin ja aiemmassa kemian tekniikan tutkimuksessa hyviksi todettuihin empiirisiin korrelaatioihin. Taselaskelmat riippuvat suuresti kolonnikohtaisista ominaisuuksista, kuten syöttövirtauksista, sivu-ulosotoista, lauhdutuksista sekä saatavilla olevasta instrumentoinnista ja lähtötiedoista, mistä johtuen NAPCON Indicatorin nykyinen ohjelmisto- ja laskenta-arkkitehtuuri vaatii runsaasti algoritmien ja lähdekoodin muokkausta konfigurointi- ja käyttöönottovaiheessa.

Konfigurointi vaatii siten erikoisosaamista tislauksen fysikaalisista ja kemiallisista ilmiöistä, mikä rajoittaa sen käyttöönottoa.

1.2 Työn tavoitteet

Työn tavoitteena on laatia NAPCON Indicator -järjestelmälle uudistettu laskenta- ja ohjelmistoarkkitehtuuri. Uudelta arkkitehtuurilta vaadittavat ominaisuudet ovat:

- 1) Laskennan konfigurointi erilaisille monituotetislauskolonneille on huomattavasti vaivattomampaa, kuin nykyisessä ratkaisussa.
- 2) Laskentamenettelyt on yleistetty erilaisille monituotekolonneille siten, että konfigurointi vaatii mahdollisimman vähän lähdekoodin muokkausta.
- 3) Konfigurointi ei vaadi erikoisosaamista tislauksen fysikaalisista ja kemiallisista ilmiöistä.
- 4) Ohjelmisto toimii ei-ideaalisessa teollisuusympäristössä, joten sen on oltava vikasetoinen. Esimerkiksi puuttuvat tai fysikaalisesti mahdottomat mittausarvot eivät vaadi normaalia tuotantoa häiritseviä toimenpiteitä.

Tehdyt ratkaisut perustetaan ohjelmistosuunnittelun hyviksi todettuihin käytäntöihin, monituotetislauksen ilmiöymmärrykseen sekä muiden vastaavien teollisuussovellusten ja ohjelmistojen ratkaisuihin.

1.3 Työn rakenne

Kirjallisuusosassa tarkastellaan monituotetislauksen laskennan ja säädön teoriaa (luku 2), kartoitetaan tuotelaatujen laskentaan, estimointiin ja säätöön liittyviä tutkimuksia ja teollisia sovelluksia (luku 3) sekä esitellään monituotekolonniin laskentaan ja tuotelaatujen estimointiin soveltuvia kaupallisia ohjelmistoja (luku 4).

Kokeellisessa osassa esitellään NAPCON Indicator -järjestelmän nykyinen arkkitehtuuri ja algoritmit sekä määritetään järjestelmän tärkeimmät parannuskohteet (luku 5). Luvussa 6 esitellään parannuskohteiden perusteella suunnitellut järjestelmäarkkitehtuuri, tärkeimmät ohjelmistot ja kirjastot sekä uudistetun järjestelmän algoritmit. Erityisesti keskitytään luomaan sovellukselle

robusti, vikasietoinen arkkitehtuuri, joka mahdollistaa erilaisten öljynjalostus- ja petrokemian teollisuuden monituotekolonniin vaivattoman konfiguroinnin ilman merkittävää erikoistietämystä tislauksen ilmiöistä. Uudistetun laskentasovelluksen toiminta testataan luvussa 7 ohjelmiston toiminta-alueen äärirajoilla ja laskennan tuloksia verrataan Neste Jacobs Oy:n kehittämän tarkan dynaamisen simulaattorin avulla laskettuihin testiprosessin laskentatuloksiin. Lisäksi luvussa 9 syntetisoidaan ohjelmistolle jatkotutkimusehdotuksia sekä kirjallisen, että kokeellisen osan perusteella.

1.4 Työn rajaus

NAPCON Indicatorin sovelluskohteena ovat öljynjalostus- ja petrokemian teollisuuden monituotetislaukolonnit. Järjestelmän, ohjelmistojen ja algoritmien uudistuksissa otetaan siten huomioon tislaukolonnit, joissa tislattavat aineet ovat erilaisia hiilivetyseoksia ja kolonnissa on tuotevirtoja kolme tai enemmän (tisle ja pohjatuote mukaan lukien).

Työssä esitellään monituotetislauksen keskeisimmät ilmiöt, mutta ei oteta kantaa NAPCON Indicatorissa käytettävien menetelmien ja algoritmien fysikaaliseen tarkkuuteen. Työn tavoitteiden kannalta laskenta-algoritmien tarkkuuden arviointia ja uudelleensuunnittelua ei siis vaadita, ellei uudelleensuunnittelun tuloksena ohjelmiston konfigurointi helpotu oleellisesti tai ohjelmiston vikasietoisuus parane.

Kaikki työn aikana ilmenneet, mutta työssä toteutumattomat NAPCON Indicatorin parannuskohteet kartoitetaan jatkotutkimusehdotuksiksi, jotka on esitelty luvussa 9.

KIRJALLISUUSOSA

Kirjallisuusosassa tarkastellaan luvussa 2 öljynjalostus- ja petrokemian teollisuuden monituotetislauksen ilmiöitä. Erityisesti tarkastellaan ilmiöitä, jotka liittyvät yleisiin, reaaliaikaisesti määritettäviin laskennallisiin suureisiin ja niiden ennustamiseen monituotekolonniin operointidatasta. Luvussa 3 käsitellään tislaukolonnin tuotelaatujen estimointia, estimoinnin merkitystä kolonnin säädön kannalta, menetelmiä sekä niiden sovelluksia kolonnin tilan seurantaan, operointiin, säätöön ja optimointiin. Luvussa 4 esitellään ja arvioidaan kaupallisia, tislaukolonnien laskennallisten suureiden ennustamiseen soveltuvia soft sensor -ohjelmistoja. Kirjallisuusosan tavoitteena on esitellä reaaliaikaisten, fysikaalis-kemiallisiin malleihin perustuvien laskentojen toteutukselle tarvittava ilmiöymmärrys sekä kartoittaa hyviksi todettuja menetelmiä, algoritmeja ja ohjelmistopaketteja teollisuussovellusten perusteella.

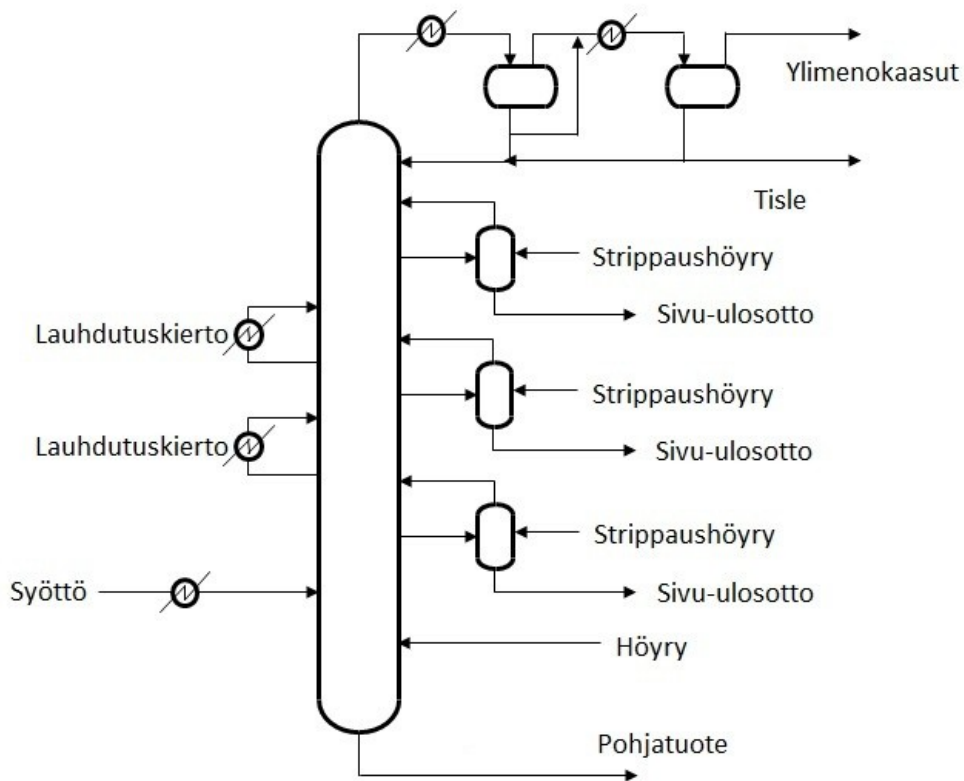
2 Monituotetislauksen teoria

2.1 Yleistä

Teollisissa tislusprosesseissa on yleistä, että kolonnin syöttö koostuu suuremmasta määrästä, kuin kahdesta kemiallisesta komponentista. Esimerkiksi raakaöljy koostuu suurimmaksi osaksi lukuisista erilaisista hiilivedyistä ja heteroatomisista orgaanisista yhdisteistä (Roussel & Boulet, 1995). Monista kemiallisista komponenteista koostuvan seoksen komponenttien erottamista toisistaan tislaamalla kutsutaan monikomponenttislaukseksi. Eräs monikomponenttislauksen toteutustapa on monituotetislauk, missä usean komponentin seos erotetaan yhdessä kolonnissa useiksi tuotevirroiksi. Monituotetislauk on siten olennainen operaatio kemianteollisuudessa ja sen vuoksi otettava binääritislauksen ohella huomioon online-kolonnilaskentasovelluksessa.

2.2 Monituotekolonniin konfiguraatiot

Monituotekolonniin rakenne on konventionaalista binääritislaukolonnista monimutkaisempi ja myös vaihtelee enemmän sovelluskohtaisesti. Esimerkkirakenne monituotekolonniin on esitetty . Esimerkkikolonniin syöttövirtaus erotetaan viideksi tuotevirraksi ja ylimenokaasuvirraksi. Sivu-ulosottojen yhteydessä voidaan nestevirtauksesta stripata kevyet, nesteeseen absorboituneet komponentit höyryvirtaan. Höyryä voidaan lisäksi syöttää kolonnin pohjalta, kuten esimerkkikolonniin. Höyrystrippaus laskee stripattujen kevyiden komponenttien osapaineita kaasufaasissa, jolloin kevyistä komponenteista saadaan suurempi osa talteen (Shinskey, 1977). Lauhdutuskierron sivu-ulosottojen yhteydessä vähentävät huipun lauhdutusenergian tarvetta, lisäävät nestevirtausta niiden alapuolella ja lisäksi vaikuttavat sivu-ulosottovirtausten pitoisuuksiin.



Kuva 1. Esimerkki monituotekolonnin rakenteesta. Kolonnin syöttövirta erotetaan viideksi eri tuotteeksi.

Monituotekolonnin reaaliaikaisessa laskennassa on kolonnieiden suuren vaihtelevuuden vuoksi huomioitava kolonnieiden rakenteelliset erot. Edellä mainittujen rakenneseikkojen lisäksi on huomioitava, että erilaiset lämpöintegraatiot ja kierrätysvirrat ovat suunnittelussa mahdollisia. Esimerkiksi spesifikaatiot täyttämätön tuotevirta voidaan syöttää kolonniin takaisin, jolloin kyseistä virtaa on käsiteltävä myös erillisenä syöttönä. Lämpöintegraatiot ovat mahdollisia sekä useiden prosessien kesken, että yksittäisen kolonnieen virtausten välillä. Esimerkki kolonnieen sisäisestä lämpöintegraatiosta on raakaöljyn tislaukukolonne, jossa kolonnieen syöttöä lämmitetään saman kolonnieen huipun lauhduttimella, kiertopalautusvirroilla sekä erillisellä uunilla.

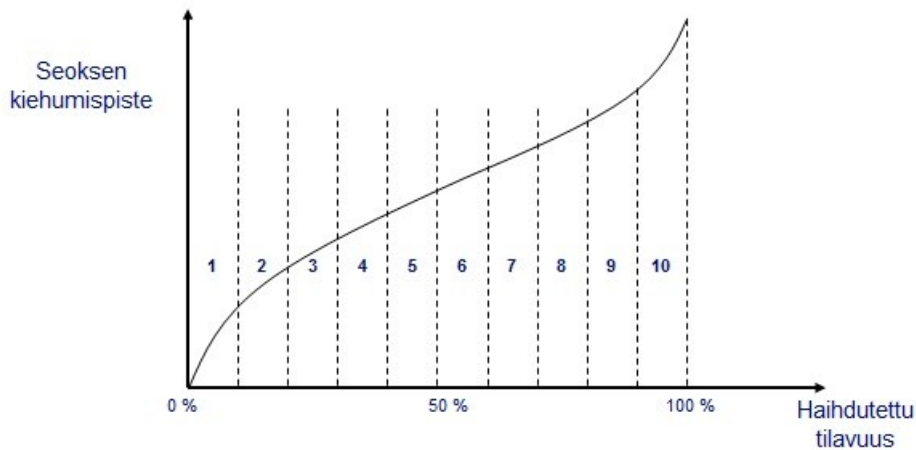
2.3 Monituotekolonnin laskennat

Monituotekolonnin operaattorille ja kolonnin ylätasen säätimille on tärkeää saada reaaliaikaista tietoa suorien prosessimittausten lisäksi useista ei-mitattavissa olevista suureista. Yleisiä operoinnin kannalta tärkeitä suureita ovat muuttuvat aineominaisuudet, kolonnin sisäiset virtaukset sekä tuotelaatua, häiriötilanteita ja operoinnin optimaalisuutta kuvaavat suureet.

2.3.1 Pseudokomponentit ja tislauskäyrät

Syötön tai tuotevirtojen koostuessa useasta kemiallisesta komponentista tislauksen laskentaa ei useimmiten kannata suorittaa kullekin kemialliselle komponentille erikseen. Tämän sijaan määritetään niin kutsutut pseudokomponentit, eli useiden komponenttien seokset, jotka erotetaan toisistaan tuotevirroiksi. Pseudokomponentteihin perustuva laskenta voidaan siten käsitellä kuten binääritislauksen teoriassa, eli niin kutsuttuna pseudobinäärisenä tislauksena.

TBP (engl. True Boiling Point) -tislauskäyrät kuvaavat monikomponenttiseoksen kiehumispistettä standardiolosuhteissa haihdutetun tilavuusprosentin funktiona. Monikomponenttiseoksen TBP-käyrä voidaan approksimatiivisesti määrittää mittaamalla laboratoriossa tai on-line -analysointorilla seoksen lämpötila eri tilavuusosuuksien pisteissä. TBP-käyrän merkitys monituotekolonnin laskennoissa on hyvin keskeinen, sillä monet kemian tekniikan tutkimuksessa kehitetyt hiilivetyseosten aineominaisuuskorrelaatiot perustuvat seoksen TBP-käyrän pisteisiin. Lisäksi TBP-käyrällä tai siitä lasketuilla suureilla (kuten leikkauspisteillä) voidaan kuvata hiilivetyseostuotteen laatua. on luonnosteltu 10:stä, keskenään saman tilavuusosuuden kattavasta pseudokomponentista koostuvan seoksen TBP-tislauskäyrä.



Kuva 2. TBP-tislauskäyrä 10 pseudokomponentin seokselle. Komponentti 1 on kevyin pseudokomponentti, 10 raskain.

katkoviivat kuvastavat pseudokomponenttien välisiä rajoja. Esimerkiksi katkoviiva pseudokomponenttien 1 ja 2 välillä merkitsee, että komponentti 1 on kokonaan haihdutettu ja komponentista 2 ei yhtään.

Muita monikomponenttisia hiilivetyseoksia kuvaavia tislauskäyriä ovat esimerkiksi ASTM (engl. American Society of Testing and Materials) -käyrä sekä EFV (engl. Equilibrium Flash Vaporization) -käyrä.

2.3.2 Hiilivetyseosten perusominaisuudet

Reaaliaikaisessa kolonnilaskennassa on useimmiten määritettävä syötölle ja tuotevirroille erilaisia perusaineominaisuuksia, jotta kolonnin taseet sekä ylemmän tason säädössä ja optimoinnissa tarvittavat suureet voidaan laskea. Näitä perusaineominaisuuksia ovat esimerkiksi ominaispaine, tiheys, Watsonin karakterisointikerroin, moolimassa ja ominaisentalpia. Haasteena määrittämisessä on, että on-line -operoinnissa syöttöjen ja tuotevirtojen koostumukset harvoin tunnetaan tarkasti. Monikomponenttisille hiilivetyseoksille, joiden koostumusta ei tunneta, on kemian tekniikan tutkimuksessa vuosikymmenten ajan kehitetty erilaisia korrelaatioita, joiden avulla nämä ominaisuudet voidaan määrittää niitä suoraan mittaamatta. Reaaliaikaisissa sovelluksissa määrittäminen on luonnollisesti

perustuttava yleisesti saatavilla oleviin tai yksinkertaisten muunnosten kautta laskettaviin suureisiin, kuten lämpötiloihin, paineisiin ja tislauskäyrien pisteisiin.

Nestefaasissa olevien hiilivetyseosten ominaispainojen ja tiheyksien määrittäminen, kun mittauksia ei ole saatavilla, perustuu usein tilanyhtälömalleihin tai tietyissä olosuhteissa päteviin tarkkoihin empiirisiin korrelaatioihin (Aalto, et al., 1996). Yksinkertaisetkin tilanyhtälömallit, kuten Riazin ja Mansoorin (1993) esittämä yksinkertaistettu tilanyhtälö vaativat kuitenkin useimmiten huomattavasti enemmän laskettavalle seokselle ominaisia parametreja, kuin ominaispainon estimoinnin korrelaatiot, minkä vuoksi reaaliaikaisessa laskennassa empiiriset korrelaatiot ovat käyttökelpoisempia. Riazi ja Daubert (1986) esittivät nestefaasissa olevien hiilivetyjakeiden ominaispainon laskentaan yksinkertaisen korrelaation, joka perustuu TBP-tislauskäyrän lämpötiloihin ja syötön ominaispainoon:

$$SG_k = 0,08571(T_{TBP10})_k^{0,1255}(T_{TBP50})_k^{0,20862}(SG_f)^s \quad (1)$$

missä SG_k on pseudokomponentin k ominaispaino, T_{TBP10} ja T_{TBP50} ovat tuoteseoksen TBP-tislauskäyrän lämpötilapisteitä Rankine-asteikossa, SG_f syötön ominaispaino sekä eksponentti s pseudokomponentille ominainen vakio. Menetelmä soveltuu yksinkertaisuutensa vuoksi reaaliaikaiseen käyttöön ja sen tuottamat tulokset ovat yhdenmukaisia ominaispainon graafisten määrittämenetelmien kanssa (Riazi & Daubert, 1986). Tiheyden ja ominaispainon välillä vallitsee seuraava yhteys:

$$\rho = SG * \rho_W \quad (2)$$

missä seoksen tiheys ρ , veden tiheys ρ_W ja ominaispaino SG on määritetty lämpötilassa 60 °F. Siten, jos ominaisuuksista toinen tunnetaan, voidaan toinenkin estimoida yksinkertaisella muunnoksella.

Höyryfaasissa olevan hiilivetyseoksen ominaispainolle ja tiheydelle on kehitetty huomattavasti vähemmän empiirisiä korrelaatioita kuin nestefaasin seoksille. Höyryfaasissa näille ominaisuuksille on kuitenkin mahdollista estimoida karkeat

tilanyhtälöperusteiset ennusteet olettamalla hiilivetyhöyry ideaalikaasuksi tai käyttämällä Van der Waalsin yhtälöä.

Watsonin karakterisointikerroin on suure, joka kuvaa hiilivetyseoksen parafiinipitoisuutta. Karakterisointikerroin määritetään seuraavasti:

$$K_w = \frac{(T_{b,avg})^{1/3}}{SG} \quad (3)$$

missä keskimääräinen kiehumispiste $T_{b,avg}$ voidaan määrittää tislaukkyrän avulla ja ominaispaine SG on määritetty lämpötilassa 60 °F. (Watson & Nelson, 1933)

Watsonin karakterisointikerroin on yleinen prediktorimuuttuja hiilivetyseosten aineominaisuuksien estimoinnissa. Perry ja White (1985) totesivat Watsonin karakterisointikerrointa käytettävän muun muassa moolimassojen, lämpökapasiteettien, vetyosuuksien, kinemaattisten viskositeettien sekä kriittisten lämpötilojen ennustamiseen hiilivetyseoksissa.

Riazi ja Daubert (1980) esittivät empiirisen korrelaation hiilivetyseoksen moolimassalle ominaispainon ja Watsonin karakterisointikertoimen funktiona. Sievennettyinä korrelaatio on:

$$M = 4,5673 * 10^{-5} (K_w)^{6,5886} * SG^{5,5722} \quad (4)$$

Schneider (1998) vertaili hiilivetyseosten moolimassojen estimointiin yleisesti käytettyjä korrelaatioita ja totesi kaavan korrelaation olevan yksinkertaisin vertailussa olleista 10 korrelaatioista. Vertailun perusteella menetelmä tuottaa raskaille hiilivetyseoksille hieman pienempiä moolimassoja kuin muut menetelmät. Yksinkertaisuutensa vuoksi menetelmä on kuitenkin soveltuva reaaliaikaiseen laskentaan.

Kesler ja Lee (1976) esittivät nestefaasissa olevan hiilivetyseoksen ominaislämpökapasiteetille lämpötilasta, ominaispainosta ja Watsonin karakterisointikertoimesta riippuvan lausekkeen. Lauseke voidaan integroida

ominaisentalpian nollapisteen lämpötilasta (-200 °F) haluttuun lämpötilaan, jolloin jakeen ominaisentalpia voidaan estimoida:

$$\begin{aligned}
 h(T, SG, K_w) &= \int_{-200}^{T_0} c_p(T) dT \\
 &= (0,35 + 0,055K_w) \left(a + bT + \frac{c}{2} T^2 \right)
 \end{aligned}
 \tag{5}$$

$$a, b, c = f(SG)$$

Korrelaatio on yksi suosituimmista prosessisimulointiin käytetyistä menetelmistä hiilivetyneesteille (Moharam, et al., 1998) ja yksinkertainen implementoida reaaliaikaiseen laskentaan seoksille, joiden tarkkaa koostumusta ei tunneta.

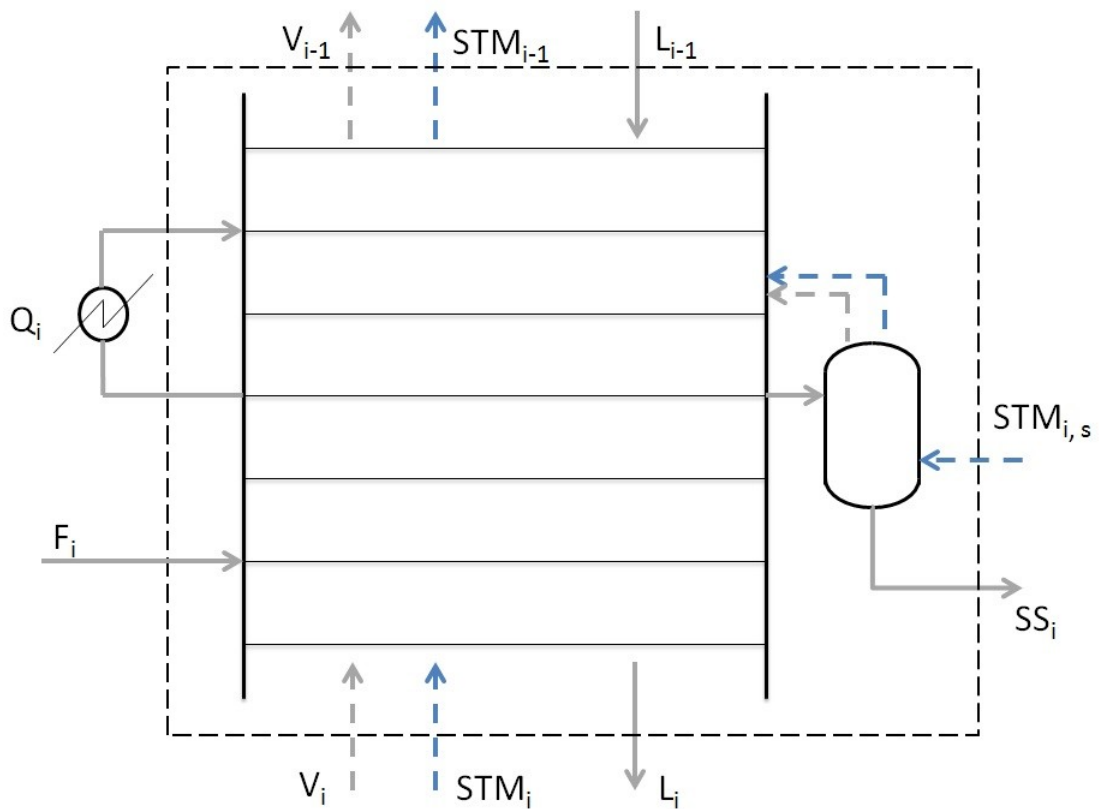
Höyryfaasissa olevan hiilivetyjakeen ominaisentalpia on nestefaasin vastaavissa olosuhteissa olevan jakeen ominaisentalpiaa suurempi. Höyryfaasin jakeiden ominaisentalpia estimoidaan usein lämpötilan, paineen, ominaispainon sekä Watsonin karakterisointikertoimen avulla yksinkertaisissa korrelaatioissa. Moharam et al. (1998) kehittivät yksinkertaisen, mutta tarkan korrelaation, jossa ominaisentalpia höyryfaasissa estimoidaan lämpötilan, paineen ja Watsonin karakterisointikertoimen avulla. API (engl. American Petroleum Institute) -menetelmässä suositellaan kaasulle käytettävän lämpötilan suhteen polynomista funktiota (American Petroleum Institute, 2006).

2.3.3 Taseet ja sisäiset virtaukset

Sisäiset neste- ja höyryvirtaukset ovat reaaliaikaisessa kolonnilaskennassa usein kiinnostuksen kohteena, sillä ne vaikuttavat kolonnista saatavien tuotteiden laatuun ja saantomääriin. Lisäksi niiden avulla voidaan selittää joidenkin yleisten häiriötilanteiden mekanismit ja ennustaa näiden häiriötilanteiden ilmenemistä kolonnissa. Sisäisiä virtauksia voidaan harvoin mitata luotettavasti, minkä vuoksi niiden yleisin määrittäytapa on stationääritilan taseiden avulla. Kun virtojen koostumukset ovat monimutkaisia ja mahdollisesti tuntemattoman koostumuksen hiilivetyseoksia, on komponentteihin perustuvien taseiden muodostus lähes

mahdotonta. Tyypillisimmät monituotekolonnille muodostettavat taseet ovat siten kokonaisuudessa-, energia- ja tilavuustaseita.

Monituotekolonne voidaan jakaa useaksi eri tasealueeksi syöttö- tuote- ja kiertopalautusvirtojen perusteella. Kolonnin huipun ja pohjan tasealueet lukuun ottamatta voidaan kukin monituotekolonnin tasealue esittää mukaisen rakenteen avulla.



Kuva 3. Tyypillisen monituotekolonnin tasealueen mahdolliset massa- ja energiavirrat. Virtausten määrä kussakin tasealueessa vaihtelee monituotekolonnin rakenteen ja tasealueen rajauksen mukaan.

tasealueeseen tulee yksi syöttövirta ja tasealueesta otetaan tuotevirta ulos sivustripperin jälkeen. Lisäksi ulosoton yhteydessä on tasealueeseen kuuluva kiertopalautus. Näiden ulkoisten virtausten määrä luonnollisesti vaihtelee monituotekolonnin rakenteen ja tasealueen rajauksen mukaan. Kuhunkin kolonnin huippu- ja pohjatasealueen välissä olevaan tasealueeseen liittyvät sisäiset hiilivety- ja vesihöyryvirtaukset.

Yleistettynä tasealueen massatase on siten:

$$\sum F_i + V_i + L_{i-1} + STM_i + \sum STM_{i,s} = V_{i-1} + L_i + \sum SS_i + STM_{i-1} \quad (6)$$

missä $\sum F$ merkitsee syöttövirtausten summaa, V sisäistä höyryvirtausta, L sisäistä nestevirtausta, STM vesihöyryvirtausta ja $\sum SS$ sivu-ulosottovirtausten summaa. Indeksillä i viitataan tasealueen järjestyslukuun kolonnin yläosasta alkaen.

Massataseet voidaan myös kirjoittaa hiilivedyille ja vesihöyrylle erikseen:

$$\sum F_i + V_i + L_{i-1} = V_{i-1} + L_i + \sum SS_i \quad (7)$$

$$STM_i + \sum STM_{i,s} = STM_{i-1} \quad (8)$$

Kolonneen syötettävä vesihöyry nostaa kolonnin kokonaispainetta, joten vesihöyryn syöttömäärälle on rajoituksena, että se ei saa paineen nousun vaikutuksesta alkaa tiivistymään kolonnissa. Vesihöyryä alkaa tiivistyä nesteeksi silloin, kun kolonnin paine saavuttaa arvon, jossa kolonnin lämpötila on sama, kuin höyryn kastepistelämpötila.

Yleistetty tasealueen energiatase voidaan ilmaista:

$$\begin{aligned} \sum F_i h_{F,i} + V_i h_{V,i} + L_{i-1} h_{L,i-1} + STM_i h_{stm,i} + \sum STM_{i,s} h_{stm,s,i} + \sum \dot{Q}_i \\ = V_{i-1} h_{V,i-1} + L_i h_{L,i} + \sum SS_i h_{SS,i} + STM_{i-1} h_{stm,i-1} \end{aligned} \quad (9)$$

missä h viittaa virtauksen ominaisentalpiaan ja indeksi kyseiseen virtaukseen. \dot{Q} merkitsee lämmönvaihtimen tai uunin tasealueeseen tuomaa energiavirtausta.

Tilavuustase hiilivedyille saadaan, kun oletetaan tasealueeseen tulevien ja siitä poistuvien virtojen tilavuuden muutoksen olevan merkityksetön:

$$\sum \frac{F_i}{SG_{F,i}} + \frac{V_i}{SG_{V,i}} + \frac{L_{i-1}}{SG_{L,i-1}} = \frac{V_{i-1}}{SG_{V,i-1}} + \frac{L_i}{SG_{L,i}} + \sum \frac{SS_i}{SG_{SS,i}} \quad (10)$$

2.3.4 Tulvimislaskennat

Tulviminen tislauksessa tarkoittaa kolonnin erotuspohjilla vallitsevaa häiriötilannetta, jonka syynä on liian suuri höyryvirran määrä ja nopeus erotuspohjan geometria ja nestevirta huomioon ottaen. Liian suuresta höyryvirrasta voi aiheutua kahdenlaisia tulvimismekanismeja (Mitra, 2013):

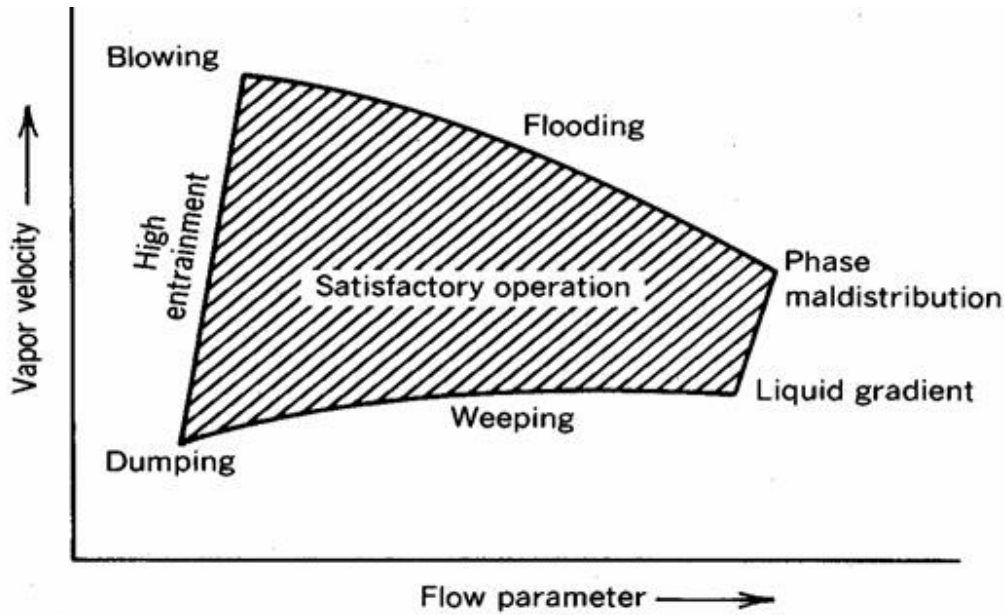
1. Höyryvirta kuljettaa erotuspohjalla olevat nestepisarot ylemmälle pohjalle sen sijaan, että neste valuisi paluukaukaloa pitkin alemmalle erotuspohjalle.
2. Höyryvirta saa erotuspohjan vaahtopatsaan nousemaan niin korkeaksi, että patsas koskettaa ylempää erotuspohjaa.

Tulvimisen seurauksia ovat nesteen kerääntyminen tulvimispohjalle ja sitä ylemmille erotuspohjille, kolonnin paine-eron nousu sekä erotuspohjien tehokkuuden merkittävä heikkeneminen.

Vastaavasti paluukaukalon tulviminen johtuu liian suuresta nestevirran määrästä. Paluukaukalon tulviminen voi tapahtua niin ikään kahdella eri mekanismilla (Mitra, 2013):

1. Neste ajautuu takaisin ylempään paluukaukaloon suuresta paine-erosta, paluukaukalon kitkasta ja erotuspohjan korkeasta nestepinnasta johtuen.
2. Paluukaukalossa olevan nesteen nopeus kasvaa suureksi, mikä lisää kitkasta johtuvaa painehäviötä. Kaukalossa oleva seos vaahtoo, eikä neste pääse valumaan alemmalle erotuspohjalle.

on esitetty tislaukspohjan tehokas toiminta-alue ja tyypilliset virtausmääristä johtuvat häiriötilanteet (Fair, 1987).



Kuva 4. Tislauspohjan tehokas toiminta-alue ja häiriötilanteet (Fair, 1987). Tulviminen johtuu liian suuresta höyryvirran nopeudesta tislauspohjan geometria huomioon ottaen.

Vaikka tulvimista indikoivaa paine-eroa on yleisesti mahdollista mitata kolonneissa, on reagoiminen tulvimiseen usein liian myöhäistä, kun paine-ero on jo kasvanut huomattavasti. Lisäksi tulvivan pohjan paikantaminen on vaikeaa, jos paine-eroa mitataan koko kolonnin läpi. Tulvimista indikoi paine-eron lisäksi niin kutsuttu tulvimisprosentti, joka voidaan määrittää empiiristen korrelaatioiden avulla. Tulvimisen monimutkaisten mekanismien vuoksi korrelaatiot riippuvat useasta aineominaisuuksiin ja välipohjan geometriaan liittyvästä parametrasta. Eräs tapa tulvimisprosentin laskentaan on määrittäminen hiilivetyhöyryn kapasiteettikertoimen avulla. Kapasiteettikerroin taas määritetään empiirisillä korrelaatioilla (Neste Jacobs Oy, 2013a):

$$C_f = f(f_f, \rho_v, l_t) \quad (11)$$

missä C_f on kapasiteettikerroin, f_f vaahtoamiskerroin, ρ_v hiilivetyhöyryn tiheys ja l_t erotuspohjien väli.

Glitsch & Sons Inc. (1974) esittivät tulvimisprosentin laskentaan kapasiteettikertoimen avulla seuraavanlaisen korrelaation:

$$F_J = \max (F_{J,1}, F_{J,2}) \quad (12)$$

$$F_{J,1} = f(V, \rho_V, \rho_L, L, l_F, A_A, C_f) \quad (13)$$

$$F_{J,2} = f(V, \rho_V, \rho_L, A_T, C_f) \quad (14)$$

missä A_A on erotuspohjan aktiivinen pinta-ala, A_T todellinen pinta-ala ja l_F virtauskanavan pituus.

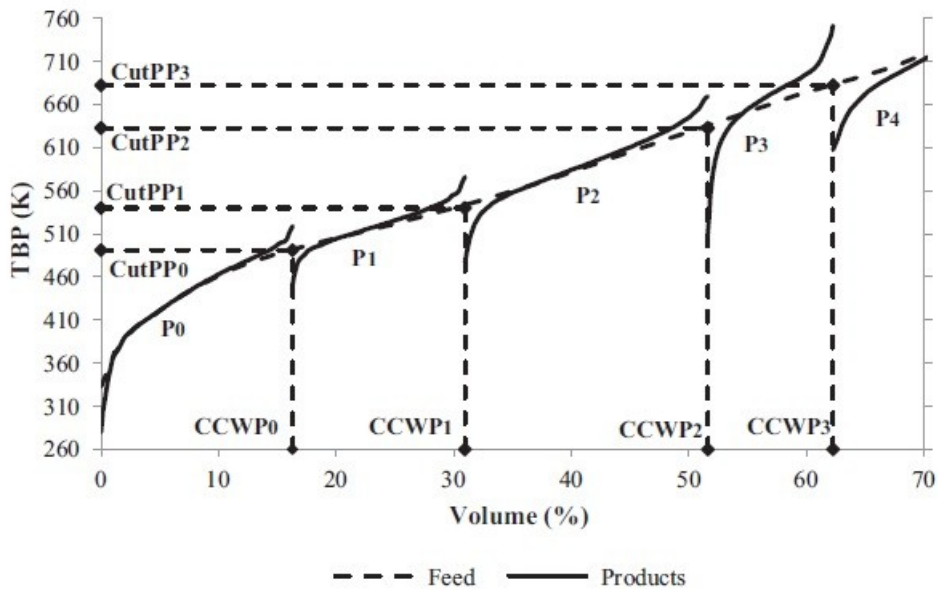
Paluukaukalon tulvimisen mekanismit ovat myös monimutkaisia ja sitä indikoivat korrelaatiot moniparametrisia. Paluukaukalon tulvimisprosentti voidaan laskea esimerkiksi seuraavanlaisella korrelaatiolla (Neste Jacobs Oy, 2013a):

$$F_{J,D} = f(\rho_V, \rho_L, l_t, C_f, l_F, f_f, A_A, A_D, V, L, v_D, SF_D) \quad (15)$$

missä A_D on paluukaukalon poikkipinta-ala, v_D suunniteltu virtausnopeus paluukaukalossa ja SF_D tulvimiseen liittyvä varmuuskerroin. Varmuuskerrointa käytetään kolonneissa, joissa korrelaatiot tuottavat systemaattisesti liian optimistisia arvioita tulvimisesta (Kister, et al., 2008).

2.3.5 Leikkauspisteet

Leikkauspisteet kuvaavat syöttövirran jakautumista tuotteiksi monimutkaisissa tislaukukolonneissa (Mahalec & Sanchez, 2012). Leikkauspistelämpötilalla tarkoitetaan lämpötilaa syötön TBP-käyrällä, jolla saavutetaan tarkasteltavan tuotteen (pseudokomponentin) määrätty saanto tilavuusprosentteina. Kuvassa 5 on esitetty syötön tislaukukäyrä 70 tilavuusprosenttiin asti sekä syötön viiden keveimmän pseudokomponenttituotteen tislaukukäyrät. Leikkauspistelämpötilat on merkitty horisontaalisilla katkoviivoilla.



Kuva 5. Esimerkki syötön ja pseudokomponenttien TBP-tislauskäyristä ja leikkauspisteistä (Mahalec & Sanchez, 2012). Kiinteät käyrät kuvaavat viiden eri tuotevirran tislauskäyriä ja suorat katkoviivat leikkauspisteitä vierekkäisten tuotteiden välillä.

Loppupistelämpötilalla tarkoitetaan yksittäisen pseudokomponentin tislauskäyrältä määritettyä lämpötilaa, jossa koko nestetilavuus haihtuu. Alkukiehumispiste yksittäiselle pseudokomponentille on taas lämpötila, jossa pseudokomponenttineeste alkaa kiehua. Huomion arvoista on, että keveämmän tuotteen suhteen 100 % leikkauspistelämpötila kahden pseudokomponentin välillä on käytännössä aina pienempi, kuin kevyemmän tuotteen loppupistelämpötila ja suurempi kuin raskaamman tuotteen alkukiehumispiste erotuksen epätäydellisyydestä johtuen.

Leikkauspisteitä on ehdotettu käytettäväksi tuotelaadun mittareina (Horn, 1980), vaikkakin niiden käyttöä on myös kritisoitu syötön laadun vaihdellessa (Chatterjee & Saraf, 2004) ja siten syötön todellisen tislauskäyrän muuttuessa. Syötön ominaisuuksien reaaliaikaisesta estimoinnista tuotelaatusäädön parantamiseksi on kuitenkin tehty useita tutkimuksia (Friedman, 1985), (Friedman, 1994), (Martin, et al., 2000), (Chatterjee & Saraf, 2004), (Dave, et al., 2003) tämän vaikutuksen eliminoimiseksi.

Analysaattorimittausten mittausvälit ovat pitkiä, minkä vuoksi leikkauspisteiden ja tuotelaatujen säätö on vaikeaa pelkkien mittausten perusteella (Martin, 1997). Reaaliaikaisissa sovelluksissa leikkauspistelämpötilojen määrittäminen perustuu niiden ennustamiseen mallien avulla sen sijaan, että ne määritettäisiin mitatuista tislaukikäyristä pitkällä mittausvälillä. Useissa sovelluksissa (Dave, et al., 2003), (Chatterjee & Saraf, 2004), (Mahalec & Sanchez, 2012), (Adnan, et al., 2004), (Martin, et al., 2000), (Friedman, 1997), (Friedman, 1994) ja (Friedman, 1985) TBP-käyrien pisteiden estimointiin käytetään prosessimittauksista laskettua alkukiehumispistettä, joka muunnetaan korrelaatiolausekkeen avulla TBP-pisteeksi.

Alkukiehumispisteen laskenta perustuu useimmiten tilayhtälöihin, kuten Clausius-Clapeyronin tai Antoineen yhtälöön (Pan, et al., 2013). Tilayhtälöt kuvaavat höyrynpaineen ja lämpötilan riippuvuutta ja tarvitsevat useimmiten yhden tai useampia komponenttikohtaisia parametreja. Parametreja on hyvin saatavilla puhtaille komponenteille, mutta seosten tapauksessa tilayhtälöiden käyttöä on kritisoitu niiden epätarkkuuden vuoksi (King, 2004).

Alkukiehumispisteen lisäksi lämpötilat, paineet ja kolonnin sisäiset palautussuhteet on todettu hyviksi ennustaviksi muuttujiksi leikkauspisteiden estimoinnissa (Friedman, 2011).

2.3.6 Energiakäytön optimointi tislusprosesseissa

Tislusprosessien on arvioitu kattavan jopa 3 % koko maailman energiakulutuksesta (Engelien & Skogestad, 2004). Energian hinnan kallistuessa ja päästörajojen tiukentuessa on siten tislusprosessien optimaalisessa operoinnissa otettava tuotehävikin lisäksi huomioon energiakäyttö.

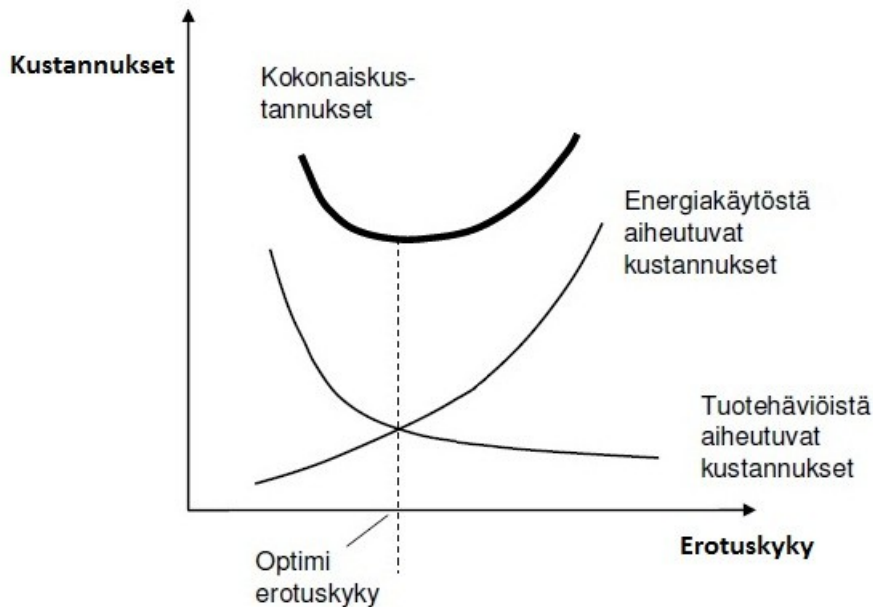
Tislauksen kokonaiskustannusfunktio voidaan siis karkeasti esittää:

$$J = \sum Tuotehäviöt + \sum Energiakäyttö \quad (16)$$

missä tuotehäviöt ovat energiakäytön suhteen riippuvaisia siten, että häviöt pienenevät energiakäytön kasvaessa. Erotuksen hyvyttä, eli tuotehäviöiden vähäisyyttä kuvaava suure binääritislauksessa on erotuskyky:

$$SF = \frac{LK_D HK_B}{LK_B HK_D} \quad (17)$$

missä LK ja HK viittaavat kevyen ja raskaan avainkomponentin pitoisuuksiin (engl. Light Key, Heavy Key) ja alaindeksit D ja B tisleeseen ja pohjatuotteeseen. Kuva 6 kuvaa erotuskyvyn, energiakäytön ja kokonaiskustannusten suhdetta.



Kuva 6. Binääritislaukolonnin kustannukset ja optimaalinen erotuskyky.

Binääritislaukolonnille on siis olemassa optimaalinen energiakäytön määrä, joka minimoi energian hinnasta ja tuotehäviöistä koostuvat kokonaiskustannukset.

Shinskey (1977) johti binääritislaukolonnille optimaalisen kiehtusmäärän minimoimalla tuotehävikin ja energiakulutuksen kustannuksista koostuvan funktion. Jos kevyt avainkomponentti on raskasta avainkomponenttia arvokkaampi, on Shinskeyn (1977) esittämä kustannusfunktio:

$$\frac{J}{F} = (p_{LK} - p_{HK}) \frac{B * LK_B}{F} + p_E H_V \frac{V}{F} \quad (18)$$

missä termi $(p_{LK} - p_{HK}) \frac{B * LK_B}{F}$ kuvaa arvokkaamman avainkomponentin hävikkiä vähemmän arvokkaaseen tuotevirtaan ja $p_E H_V \frac{V}{F}$ kiehutuksen ja lauhdutuksen kustannuksia. Koska arvokkaamman tuotteen pitoisuus pohjatuotteessa (LK_B) ja kiehutuksen määrää kuvaava $\frac{V}{F}$ ovat toisistaan riippuvia, voidaan toinen muuttujista sijoittaa erotusyhtälöä käyttäen:

$$\frac{V}{F} = \beta \ln \frac{(1 - LK_B)LK_D}{(1 - LK_D)LK_B} \quad (19)$$

missä β on kolonnispesifinen erotustehokkuutta kuvaava karakterisointikerroin. Shinskeyn (1977) mukaan karakterisointikertoimen ja höyrystymislämmön tulo riippuu useimmiten lineaarisesti paineesta. Kiehutusmäärän lisäksi pohjatuotevirran ja syöttövirran suhde voidaan korvata pitoisuuksia kuvaavalla termillä kolonnin massa- ja komponenttitaseen perusteella:

$$\frac{B}{F} = \frac{LK_D - LK_F}{LK_D - LK_B} \quad (20)$$

Sijoittamalla lausekkeet 19 ja 20 kaavaan 18 saadaan kustannusfunktiksi:

$$\begin{aligned} \frac{J}{F} = (p_{LK} - p_{HK}) \frac{(LK_D - LK_F)LK_B}{LK_D - LK_B} \\ + p_E H_V \beta \left(\ln \frac{LK_D}{1 - LK_D} + \ln \frac{1 - LK_B}{LK_B} \right) \end{aligned} \quad (21)$$

Kustannusfunktion minimoiva kevyen avainkomponentin pitoisuus pohjatuotteessa saadaan lausekkeen 21 derivaatasta pitoisuuden suhteen:

$$\frac{d\left(\frac{J}{F}\right)}{dLK_B} = (p_{LK} - p_{HK})LK_D \frac{LK_D - LK_F}{(LK_D - LK_B)^2} - \frac{p_E H_V \beta}{LK_B(1 - LK_B)} \quad (22)$$

Asettamalla derivaatta nolaksi saadaan lauseke kevyen avainkomponentin optimipitoisuudelle pohjatuotteessa:

$$\frac{LK_{B,opt}(1 - LK_{B,opt})}{(LK_D - LK_{B,opt})^2} = \frac{p_E H_V \beta}{(p_{LK} - p_{HK})(LK_D - LK_F)LK_D} \quad (23)$$

Lausekkeesta 23 kevyen avainkomponentin optimipitoisuus pohjatuotteessa voidaan määrittää iteratiivisesti. Kolonnin operoinnin kannalta on hyödyllistä tietää tätä pitoisuutta vastaava kiehtuksen (kiertopalautuksen paluupohjan yläpuolisen hiilivetyhöyryvirran) määrä. Optimaalinen hiilivetyhöyryvirta voidaan laskea erotusyhtälön (19) avulla:

$$V_{opt} = F\beta \ln \frac{(1 - LK_{B,opt})LK_D}{(1 - LK_D)LK_{B,opt}} \quad (24)$$

Jos taas raskas avainkomponentti on kevyttä arvokkaampaa, on alkuperäinen kustannusfunktio:

$$\frac{J}{F} = (p_{HK} - p_{LK}) \frac{B * HK_D}{F} + p_E H_V \frac{V}{F} \quad (25)$$

ja kustannusfunktion minimoiva raskaan avainkomponentin pitoisuus tisleessä:

$$\frac{HK_{D,opt}(1 - HK_{D,opt})}{(HK_B - HK_{D,opt})^2} = \frac{p_E H_V \beta}{(p_{HK} - p_{LK})(HK_B - HK_F)HK_B} \quad (26)$$

Tällöin optimaalinen höyryvirtaus on:

$$V_{opt} = F\beta \ln \frac{(1 - HK_{D,opt})HK_B}{(1 - HK_B)HK_{D,opt}} \quad (27)$$

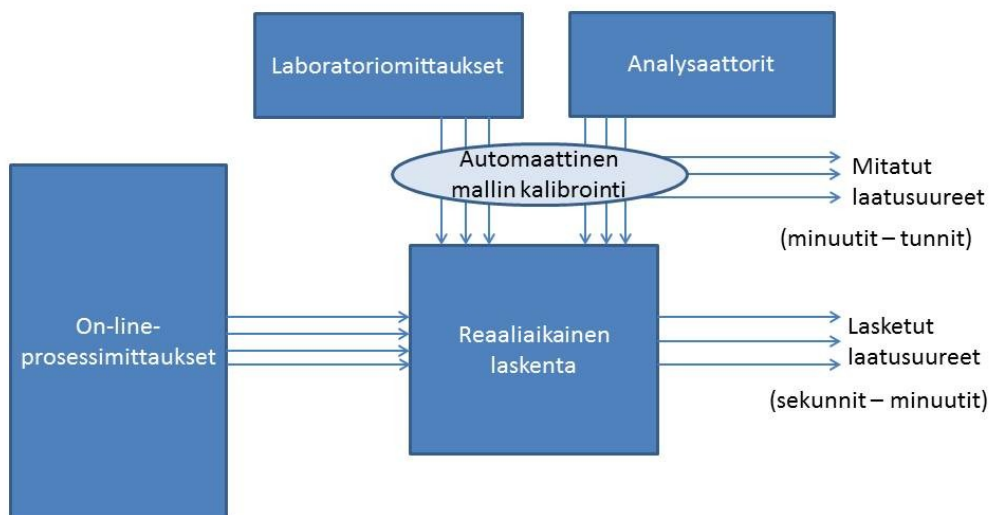
Myös monituotekolonneille on kehitetty energiakäytön huomioivia kustannusoptimointimenetelmiä. Bartfeld et al. (2003) tutkivat tislauksyksiköiden suunnittelunaikaista optimointia ottaen huomioon muun muassa kolonnin rakennekonfiguraation ja energiakäytön. More et al. (2010) optimoivat raakaöljyn tislauksyksikön suunnittelunaikaisesti usean eri muuttujan suhteen käyttäen

kaupallista simulaattorihjelmistoa. Suunnittelunaikaisen optimoinnin lisäksi monimutkaisille kolonneille on kehitetty reaaliaikaisia optimointialgoritmeja. Jones et al. (1999) minimoivat useiden eri jalostusyksiköiden yhteistä kustannusfunktiota reaaliaikaisella hajautetulla kvadraattisella optimoinnilla ja fysikaalisiin malleihin perustuvilla laskennoilla. Hou (2001) käytti raakaöljyn tislauskolonnin reaaliaikaiseen optimointiin stationääritilan fysikaalisia malleja ottaen myös huomioon prosessimittausten, kuten virtausten, lämpötilojen ja paineiden stokastisuuden.

3 Tuotelaatujen estimointi monituotekolonneissa

3.1 Estimoinnin merkitys tuotelaatujen säädössä

Onnistuneen säätötuloksen kannalta on monituotekolonniin säädössä saatava reaaliaikaista tuotelaatua kuvaavaa tietoa. Monia laatua kuvaavia suureita voidaan jopa monikomponenttisille seoksille mitata analysaattoreilla tai laboratorioissa, mutta tällöinkin mittausväli on usein liian pitkä hyväksyttävän säätötuloksen saavuttamiseksi (Martin, 1997). Mallipohjaisella tuotelaatujen estimoinnilla on mahdollista saada reaaliaikaisia ennusteita tuotelaatuja kuvaavista suureista. Monissa sovelluksissa käytetään laboratorio- ja analysaattoridataa mallin automaattiseen kalibrointiin (ABB, 2007), (Ansari & Al-Otaibi, 2007), (Honeywell, 2011), (Chatterjee & Saraf, 2004), (Tran, et al., 2005), (Aspen Technology, 2011). Automaattista kalibrointia on kuitenkin kritisoitu sillä perusteella, että virheelliset laboratorioanalyysit huonontavat mallin ennustuskykyä (King, 2004). Tyypillisen tuotelaatuestimaattorin toimintaperiaate on esitetty kaaviona kuvassa 7.



Kuva 7. Tyypillisen tuotelaatuestimaattorin toimintaperiaate. Reaaliaikainen laskenta tuottaa laatusuureista ennusteita huomattavasti tiheämmällä aikavälillä, kuin analysaattori- ja laboratoriomittaukset.

Tuotelaatuestimaattorien käytöllä voidaan saavuttaa huomattavia parannuksia säätötulokseen. Eräs ilmeinen estimaattoreiden käytöstä saatu hyöty pelkkiin analysaattorimittauksiin verraten on kuolleen ajan vaikutuksen eliminointi säätöpiirissä. Pitkä kuollut aika mittausten välillä tunnetusti huonontaa säätötulosta. Erityisesti erilaisten kaskadisäätökonfiguraatioiden käytön yhdessä laatusuure-ennusteiden kanssa on todettu parantavan hitaiden ja pitkäviiveisten tislaukskolonnien säätötulosta (Kano, et al., 2000), (Patke, et al., 1982). Lisäksi analysaattorin hankinta, asennus ja huolto aiheuttavat merkittävästi enemmän kustannuksia tuotelaatuestimaattorin käyttöönottoon ja ylläpitoon verraten (Ansari & Al-Otaibi, 2007).

Kemianteollisuudessa tuotevirtojen koostumuksia pidetään yleisesti tuotelaadun mittarina. Öljynjalostuksen monituotekolonneissa suorien koostumusmittausten toteutus on kuitenkin usein epäkäytännöllistä raaka-aineiden ja tuotevirtojen koostuessa lukuisista kemiallisista komponenteista. Suorien pitoisuuksien sijaan käytetäänkin tyypillisesti pitoisuutta kuvaavaa, mitattavissa tai estimoitavissa olevaa suuretta. Horn (1980) ehdotti leikkauspistelämpötilojen käyttöä tuotelaatujen mittarina. Rogina et al. (2011) käyttivät laatua kuvaavana suureena Reidin menetelmän mukaista höyrynpainetta (engl. Reid Vapor Pressure, RVP). Chatterjee ja Saraf (2004) käyttivät tuotelaatujen mittareina tiheyksiä, leimahduspisteitä, RVP-paineita, jäätymispisteitä ja jähmepisteitä. Myös tislaukskäyrät, kuten TBP- ja ASTM-käyrä määrittävät hiilivetyseoksen koostumuksen ja ovat sen vuoksi hyviä laatua kuvaavia indikaattoreita.

3.2 Tuotelaatujen estimoinnin menetelmät

Kadlec et al. (2009) esittävät soft sensoreille karkean luokittelun mallipohjaisiin ja datapohjaisiin soft sensoreihin. Malleihin perustuvat menetelmät nojaavat soveltajan tietämykseen prosessin fysikaalisista ja kemiallisista ilmiöistä, kun taas täysin datapohjaisissa menetelmissä rakennettu malli ei sisällä tietoa näistä ilmiöistä. Täysin datapohjaisia menetelmiä kutsutaankin yleisesti "black-box" -

menetelmiksi. Molempien menetelmien piirteitä yhdistävät mallit ovat yleisiä, esimerkiksi pääosin prosessitietämykseen perustuvat fysikaaliset mallit, joissa vaikeasti mallinnettaviin osiin on sovellettu datapohjaisia menetelmiä. (Kadlec, et al., 2009)

Tislauskolonnien tuotelaatujen estimoinnissa soft sensorit perustuvat useimmiten seuraaviin mallinnusmenetelmiin:

- Prosessi-ilmiöihin perustuvat fysikaalis-kemialliset mallit
- Neurooverkkomallit
- Tilastolliset, useimmiten monimuuttujamenetelmiin perustuvat mallit
- Hybridimallit

Kemian tekniikan tutkimuksessa kehitettyjen empiiristen korrelaatioiden käyttö on myös suosittua mallinnuksen yhteydessä menetelmästä riippumatta. Empiirisiä korrelaatioita ei kuitenkaan luokitella omaksi kategoriakseen, koska niiden käyttö useimmiten nojaa muihin mallinnusmenetelmiin. Vaikka kullakin mallinnustavalla on omat vahvuutensa ja heikkoutensa, on yleisesti todettu, että tarkkojen ja yksityiskohtaisten teoreettisten mallien suosio on lisääntynyt tuoteominaisuuksien ennustamisessa (Tran, et al., 2005).

3.2.1 Prosessi-ilmiöihin perustuvat fysikaalis-kemialliset mallit

Prosessi-ilmiöihin perustuvia teoreettisia FPM (engl. First Principles Model) -malleja on käytetty kemianteollisuudessa reaaliaikaisesti tuotannon tukena jo yli 40 vuoden ajan (Pantelides & Renfro, 2013). Friedmanin (2006) mukaan FPM-mallien käytön etuina ovat muun muassa vähäinen mittausdatan ja identifioitavien parametrien vaadittu määrä, mallin helppo ylläpidettävyys prosessin muuttuessa sekä instrumentaatiovirheiden huomaaminen mallin avulla. Pantelides ja Renfro (2013) arvioivat FPM-mallien käytön suureksi haasteeksi mallien kehittämiseen vaatiman ajan, kustannukset ja ilmiötietämyksen. Heidän mukaansa FPM-mallinnustyössä käytetyt työkaluohjelmistot eivät ole yhtä korkealla tasolla datapohjaisten mallien kehitystyökalujen kanssa arkkitehtuuriensa ja algoritmiensa osalta (Pantelides & Renfro, 2013).

Friedman (1985) on kehittänyt raakaöljyn tislauskolonnin ohjaukseen sovelluksen, joka ennustaa raakaöljyn ominaisuuksia syötön koostumuksen vaihdellessa. Ennustetut ominaisuudet syötetään myötäkytkentänä sivuvirtojen ulosottosäätimille syötön vaihteluiden kompensoimiseksi ja tuotelaatujen pitämiseksi vakioina. Sovellus muodostaa kolonnille yksinkertaistetun energiataseen, jonka avulla voidaan määrittää haihtuneen syötön osuus syöttöpohjalla. Syötön TBP-käyrä voidaan siten estimoida kolonnin lämpötilat ja osapaineet huomioiden. Sivuvirtojen säätimet käyttävät syötön TBP-käyrän kulmakerrointa myötäkytkentäsignaalina. Sovelluksen on todettu parantavan tuotelaatujen vaihtelua monissa teollisissa tislauskolonneissa. (Friedman, 1994), (Friedman, 1997), (Adnan, et al., 2004)

Chatterjee ja Saraf (2004) kehittivät menetelmän erilaisten laatua kuvaavien suureiden reaaliaikaiseen ennustamiseen käyttäen syötön todellisen kiehumispisteen (engl. True Boiling Point, TBP) käyrää ja yksinkertaisia stationääritilan prosessimalleja. TBP-käyrä määritettiin laboratorioanalyysillä ja täsmättiin prosessimittausten avulla. Tuoteominaisuudet, kuten tiheydet, leimahduspisteet, RVP-paineet, jäätymispisteet ja jähmepisteet laskettiin täsmätystä TBP-käyrästä empiirisillä korrelaatioilla.

Tran et al. (2005) käyttivät stationääritilan massa- ja energiataselaskentoja sekä epäideaalisia termodynaamisia ja faasitasapainolakeja epälineaarisen, tislauspohjakohtaisen mallin kehittämiseen. Mallin avulla määritettiin kunkin mielekkään tulo- lähtö -muuttujaparin herkkyydet muuttamalla stationäärinen suhde dynaamiseksi. Herkkyyksiä käytettiin DMC (engl. Dynamic Matrix Control) -säätimen sisältävissä malleissa stationääritilan vahvistuksina. Vahvistuksia ylläpidettiin täsmämällä mallit automaattisesti laboratorioanalyysien kanssa.

Oisiovici ja Cruz (2001) ennustivat monikomponenttiseoksen panostislauskolonnissa tuotteiden pitoisuuksia käyttämällä laajennettua Kalman-suodinta. Suotimen tulomuuttujina käytettiin mitattuja kolonnin lämpötiloja ja sen antamaa estimaattia käytettiin hyväksi globaalisti linearisoivan säätöalgoritmin kanssa.

Ansari ja Al-Otaibi (2007) kehittivät mallipohjaisen tuotelaatujen ennustusmenetelmän, jossa jatkuvasti saatavilla olevien perusmittausten ja Kalman-suodatuksen avulla lasketaan kolonnissa painekompensoituja lämpötiloja. Lämpötiloja käytettiin prediktoreina empiirisissä korrelaatioissa, joiden parametreja päivitettiin analysaattori- ja laboratoriomittausten perusteella.

3.2.2 Neuroverkkomallit

Neuroverkot ovat black-box -malleja, jotka ovat monilla teollisuusaloilla käytössä erilaisina soft sensoreina. Neuroverkkojen vahvuuksia ovat ennen kaikkea epälineaaristen jatkuvien funktioiden tarkka approksimointi ja helppokäyttöisyys. Black-box -malleina neuroverkkojen käyttö vaatii FPM-malleja huomattavasti vähemmän tietämystä prosessin fysikaalisista ja kemiallisista ilmiöistä. Qin (1997) kartoitti neuroverkkojen käytön suurimmiksi haasteiksi multikollineaaristen tulomuuttujien käsittelyn, huonolaatuisen koulutusdatan, sopivien muuttujien valinnan ja teollisuuden käyttöön sopivien ohjelmistopakettien puutteen. Näiden lisäksi neuroverkko vaatii ajoittain uudelleen kouluttamista ja on yleensä validi ainoastaan yhdelle prosessille tietyissä operointiolosuhteissa.

Bolf et al. (2008) käyttivät neuroverkkoa raakaöljyn tislaukolonnin kerosiinijakeen jäätympisteen ja tislauksen loppupisteen estimointiin. Neuroverkon tulomuuttujat olivat usein mitattavia virtausten määriä ja lämpötiloja, jotka valittiin prosessitietämyksen perusteella. Neuroverkon todettiin ennustavan laatuominaisuuksia hyvin, mutta ennustusvoiman heikkenevän ominaisuuksien raja-arvojen lähellä.

Rogina et al. (2011) käyttivät raakaöljyn kevyen naftajakeen laatua kuvaavana suureena Reidin menetelmän mukaista höyrynpainetta (engl. Reid Vapor Pressure, RVP), jota estimoitiin prosessimittauksista neuroverkkoa käyttäen. Neuroverkon ennustavina muuttujina käytettiin lämpötila-, paine- ja virtausmittauksia. Tutkimuksen perusteella kuitenkin todettiin neuroverkon olevan sellaisenaan epäsopiva RVP-paineen estimointiin.

3.2.3 Tilastolliset mallit

Tilastolliset monimuuttujaregression menetelmät, kuten pääkomponenttiregressio (engl. Principal Component Regression, PCR) ja osittainen pienimmän neliösumman menetelmä (engl. Partial Least Squares, PLS) käyttävät hyväkseen alkuperäisten muuttujien lineaarikombinaatioita, jotka ovat keskenään ortogonaalisia. Lineaarikombinaatioita muodostamalla vähennetään muuttujien kokonaismäärää ja pystytään muodostamaan regressiomallit ennustettaville muuttujille multikollineaarisia selittäjiä käyttäen. Näin saadaan useimmiten parempia ennusteita, kuin perinteistä regressiomallia käyttäen (Warne, et al., 2004). PCR:n ja PLS:n puutetta ennustaa epälineaarisia ja dynaamisia suhteita muuttujien välillä pyritään korjaamaan muuttujamuunnosten avulla niin kutsutuissa menetelmien laajennoksissa (Kadlec, et al., 2009).

Kano et al. (2000) ennustivat binäärisen monikomponenttikolonin tuotepitoisuuksia dynaamisen PLS:n avulla. Prosessimittausten ja yksinkertaisten laskentojen avulla ennustettuja pitoisuusestimaatteja käytettiin kaskadisäätöstrategiassa ylemmän tason säätösilmukoissa mittauksina, kun taas alemman tason silmukoissa säädettiin huipun ja pohjan lämpötiloja. He totesivat myös, että viivästettyjen selittäjämuuttujien käyttö paransi ennustetta PLS-regression tapauksessa.

Komulainen et al. (2004) käyttivät aromaattien poistoprosessin analysaattorien vikadiagnostiikkaan ja analysaattorisuureiden reaaliaikaiseen ennustamiseen dynaamista PLS-regressiomallia. Viivästettyjen selittäjämuuttujien lisäksi mallissa käytettiin monia yksinkertaisten laskentojen avulla rakennettuja muuttujia, joilla todettiin olevan huomattava ennusteita parantava vaikutus. Ennustetut analysaattorisuureet olivat leimahduspisteitä ja tislauskyriä pisteitä. Ennusteiden todettiin soveltuvan analysaattoreiden vikatilanteiden havaitsemiseen erittäin hyvin.

Kim et al. (2013) käyttivät lokaalisti painotettua PLS-regressiomallia uudella etäisyysmitalla kolmituotteisen monikomponenttikolonin aromaattipitoisuuden

ennustamiseen. Menetelmän avulla saatiin aromaattipitoisuudesta tarkka reaaliaikainen ennuste vain kahdeksaa prosessimittausta käyttäen. He totesivat kehittämänsä etäisyysmitan avulla rakennetun PLS-mallin olevan kelvollinen prosessin epälineaaristen suhteiden ennustamiseen, verraten tuloksia muun muassa tavallisten euklidisen ja Mahalanobis-etäisyyden avulla rakennettuihin PLS-malleihin.

3.2.4 Hybridimallit

Hybridimallit, eli niin kutsutut "grey-box" -mallit yhdistävät teoreettisten, prosessi-ilmiöihin perustuvien ja black-box -mallien käytön. Hybridimallien käytön hyödyt tulevat esille erityisesti seuraavanlaisissa mallinnustilanteissa (Estrada-Flores, et al., 2006):

- Mallinnettavan prosessin jostakin ilmiöstä puuttuu olennaista tietoa
- Validointidataa on heikosti saatavilla
- Teoreettisen mallin rakennetta halutaan yksinkertaistaa

Hybridimallien puutteet riippuvat luonnollisesti malliin yhdistetyistä menetelmistä ja prosessi-ilmiöistä, joihin menetelmiä sovelletaan.

Mahalec ja Sanchez (2012) estimoivat tuotelaatua (tuotteiden TBP-käyriä) raakaöljyn tislaukskolonnissa käyttäen kaksiosaista hybridimallia, jossa prosessi-ilmiöihin perustuvia leikkauspistelämpötiloja, kolonnin sisäisiä palautussuhteita sekä syötön ominaisuuksia käytettiin prediktoreina PLS-mallissa. Mallin toinen osa oli myös PLS-regressiomalli, jonka prediktoreina olivat kolonnin pohjien lämpötilat.

Martin et al. (2000) ennustivat raakaöljyn tislaukskolonnin syötön tislaukskäyrän muutoksia käyttäen stationääritilan energiataseeseen, korrelaatioihin ja termodynaamisiin lausekkeisiin perustuvaa hybridimallia. Mallin parametrien estimointiin ja reaaliaikaiseen korjaukseen laboratoriomittausten perusteella käytettiin neuroverkkoihin perustuvaa estimointia. Estimoitujen tislaukskäyrän muutosten syöttämisen malliprediktiiviselle säätimelle todettiin lyhentävän raakaöljyalaadun vaihdosta aiheutuvan häiriöajan 6–8 tunnista 1,5–2 tuntiin.

Pan et al. (2013) kehittivät teoreettiseen höyrynpaine-lämpötila -tilayhtälöön ja PLS-regressioon perustuvan hybridimenetelmän hiilivetyseosten höyrynpaineen ja Reidin höyrynpaineen estimointiin. Mallin todettiin tuottavan tarkkoja estimaatteja ja tarvitsevan vain yhden kokeellisen, komponenttikohtaisen parametrin perusmittausten lisäksi.

3.3 Yhteenveto

Kappaleessa 3.2 kartoitettujen tutkimusten ja sovellusten perusteella onnistuneimmat teollisuussovellukset monimutkaisten monituotekolonnioiden laskennassa on saavutettu pääosin FPM-mallien ja hybridimallien käytöllä. FPM-mallien suurimpana vahvuutena muihin verrattuna on mallien validiteetti useassa eri operointipisteessä ja tällä ominaisuudella saavutettava helppo ylläpidettävyys (Friedman, 2006). Hybridimalleista erityisesti FPM-mallien ja PLS-regression yhdistävillä menetelmillä on saavutettu tarkkoja ja laajalla operointialueella valideja ennusteita (Komulainen, et al., 2004), (Pan, et al., 2013), (Mahalec & Sanchez, 2012). Yleinen perustelu tilastollisten tai black-box -mallien käytölle FPM-mallien sijaan on ilmiöymmärryksen tai ajan puute. Ohjelmistopakettien puutteellisuus ja soveltumattomuus teollisuusympäristöön todettiin mallinnusmenetelmästä riippumatta ongelmakohtaksi teollisten soft sensorien käytössä (Pantelides & Renfro, 2013), (Qin, 1997).

4 Kaupalliset tislausprosesseihin soveltuvat soft sensor -ohjelmistot

Kaupalliset tislausprosessien tilan ja tuotelaatujen estimointiin soveltuvat ohjelmistot voidaan karkeasti jakaa kahteen kategoriaan. Ensimmäinen kategoria koostuu nimenomaan tislauskolonneille tarkoitetuista laskenta- ja estimointiohjelmistopaketeista, kuten kappaleessa 4.1 esitelty Neste Jacobsin NAPCON Indicator, kappaleessa 4.2 esitelty Emerson Process Managementin SmartProcess Distillation ja luvussa 4.3 esitelty ExperTunen ProcessApex Distillation. Toinen kategoria on painottunut täysin datapohjaisiin estimointimenetelmiin, kuten neuroverkkoihin ja tilastollisiin malleihin. Näitä ohjelmistoja ei useimmiten ole tarkoitettu ainoastaan tislauskolonnien soft sensorien kehittämiseen, vaan esimerkiksi tuotelaatujen seurantaan jatkuvatoimisessa teollisuudessa yleensä. Tähän kategoriaan luokiteltavat ohjelmistopaketit ovat kappaleessa 4.4 esitelty Aspen Technologyn aspenOne Advanced Process Control, kappaleessa 4.5 esitelty ABB:n Optimize IT Inferential Modeling Platform sekä kappaleessa 4.6 esitelty Honeywellin Profit SensorPro. Ohjelmistojen arvioinnissa tarkastellaan erityisesti soveltuvuutta kolonnilaskentoihin, mallinnusmenetelmiä sekä räätälöitävyyttä ja konfigurointia. Huomion arvoista on, että esitellyistä ohjelmistoista ainoastaan Neste Jacobsin NAPCON Indicator sisältää kattavat kolonnilaskennat monimutkaisillekin monituotekolonneille. Taulukko 1 kuvaa esiteltyt ohjelmistot ja niiden tukemat ominaisuudet.

Taulukko 1. Esitellyt tislaukolonnien tuotelaadun estimointiin käytetyt työkaluohjelmistot ja niiden tukemat ominaisuudet (x)

	Kattavat kolonnilaskennat	FPM-mallinnus	Black-box - mallinnus	Tilastollinen mallinnus	Räätälöidyt mallirakenteet
Neste Jacobs NAPCON Indicator	x	x			x
Emerson SmartProcess Distillation	Enintään kolmelle tuotevirralle	x	x		
ExperTune ProcessApex Distillation	Binäärisille kolonneille	x			
AspenTech aspenOne Advanced Process Control		x	x	x	x
ABB Optimize IT Inferential Modeling Platform			x	x	x
Honeywell Profit SensorPro				x	x

4.1 Neste Jacobs NAPCON Indicator

Neste Jacobs on globaalisti noin 1000 henkilöä työllistävä korkeatasoisen teknologian sekä insinööri- ja projektijohtopalvelujen toimittaja. Yrityksen asiakkaat toimivat pääosin öljynjalostus-, kaasu- ja petrokemian teollisuuden sekä muun

kemianteollisuuden ja biotekniikan toimialoilla. Neste Jacobsilla on pitkäaikainen kokemus erityisesti prosessimallinnuksesta ja prosessiteollisuuden tietoteknisten sovellusten kehityksestä. (Neste Jacobs Oy, 2013b)

NAPCON Indicator on Neste Jacobsilla kehitetty reaaliaikaisiin prosessilaskentoihin tarkoitettu ohjelmisto, joka sisältää laajat kirjastot FPM-malleihin ja signaalinkäsittelyn menetelmiin perustuvien soft sensorien kehittämiseen. Ohjelmistossa on valmiit toteutusohjelmat muun muassa öljynjalostuksen ja petrokemian teollisuuden tyypillisiin prosesseihin, aineominaisuuksien ennustamiseen sekä taselaskentaan. Ohjelmiston tavoitteena on tuottaa laskettavasta prosessista ei-mitattavissa olevaa tietoa, kuten prosessin operointia ja suorituskykyä kuvaavia mittareita sekä kehittyneiden säätösovellusten suorituskykyä parantavia reaaliaikaisia ennustemuuttujia.

NAPCON Indicator sisältää erityisen laajat ohjelmistomoduulit monituotetislauskolonnien tilan ja tuotelaatujen ennustamiseen sekä energiakäytön optimointiin. Kolonnilaskennan tuottamat tulokset ovat muun muassa kolonnin sisäisiä virtauksia, tulvimisindikaattoreita, leikkauspisteitä sekä kolonnin energiakäytön reaaliaikaisen optimoinnin tuloksia. Kattavien kolonnilaskentojen lisäksi NAPCON Indicator mahdollistaa kokonaan räätälöityjen soft sensorien rakentamisen.

NAPCON Indicator sisältää muihin ohjelmistoihin verraten kattavimmat monituotekolonnilaskennat ja laajat kirjastot räätälöityjen FPM-malleihin perustuvien sovellusten joustavaan kehitykseen. Tilastollisten ja black-box -mallien käyttöönotolle ohjelmistossa ei ole suoraa tukea.

4.2 Emerson SmartProcess Distillation

Emerson on sekä teknologiatoimituksiin, että valmistukseen keskittynyt monipuolinen ja globaalisti noin 135000 henkeä työllistävä yritys. Emersonin tuote- ja palveluvalikoima on monipuolinen kattaen muun muassa prosessien hallinnan

sekä teollisuusautomaation ratkaisut kaikille prosessiteollisuuden toimialoille. (Emerson Electric Co., 2013)

Emersonin SmartProcess Distillation on modulaarinen, kahden tai kolmen tuotevirran tislaukolonnien laskenta- ja säätöohjelmisto. Ohjelmisto sisältää tislaukolonnien laskentaan kirjaston, jonka avulla voidaan määrittää kolonnin sisäisiä virtauksia, ennustaa tulvimista, laskea painekompensoituja lämpötiloja sekä optimoida energian käyttöä. Laskennan konfigurointi tapahtuu graafisten lohkoaviomallien avulla. Lisäksi tuotelaatujen ennustamiseen on lisätty oma moduulinsa, jonka avulla käyttäjä voi rakentaa epälineaarisia, prosessin historiadataan perustuvia estimaattoreita. Estimaattorien käyttöönotto tapahtuu graafisen työkalukäyttöliittymän avulla. Nämä moduulit toimivat ohjelmistoon sisältyvän malliprediktiivisen säätimen tukena. Säädön kannalta ohjelmisto on suunniteltu erityisesti ottamaan huomioon häiriöiden kompensoinnin, kuten syötön koostumuksen ja sääolosuhteiden muuttumisen. Ohjelmisto on suunniteltu toimimaan Emersonin DeltaV -automaatiojärjestelmän ohessa. (Emerson Process Management, 2012)

Ohjelmistopakedin vahvuus muihin esiteltyihin sovelluksiin verrattuna on valmis, modularisoitu toteutus erilaisille yksinkertaisille tislaukolonneille. Laskennat perustuvat FPM-mallinnusmenetelmien lisäksi osittain black-box -malleihin. Räätelöinnin mahdollisuus ohjelmistossa on kolonnilaskentojen osalta vähäisempi Neste Jacobsin NAPCON Indicatorsiin verraten.

4.3 ExperTune ProcessApex Distillation

ExperTune on globaalin teknologia- ja palvelutoimittaja Metson omistama ohjelmistoja toimittava yritys. ExperTunen toimittamat ohjelmistot pyrkivät maksimoimaan tuotannon tehokkuutta ja tuottavuutta sekä vähentämään jätteen määrää prosessiteollisuuden eri toimialoilla, kuten kemianteollisuudessa, sellu- ja paperiteollisuudessa, hyödykkeiden tuotannossa, öljynjalostuksessa sekä elintarviketeollisuudessa. (ExperTune, 2013a)

ExperTunen ProcessApex Distillation -ohjelmistokomponenttia käytetään tislaukskolonnien tilan ja suorituskyvyn seurantaan. Ohjelmiston tuottamat tulokset ovat muun muassa massa- ja energiataseita, tuotesaantoja, käyttökustannuksia ja erotuksen hyvyttä kuvaavia indikaattoreja. Näiden laskettujen arvojen perusteella ohjelmisto ohjeistaa kolonnin käyttöhenkilökuntaa kolonnin operoinnissa ja identifioi erilaisten häiriötilanteiden syitä. Tämän lisäksi ohjelmisto ehdottaa kolonnin operointidatan perusteella optimaalista säätökonfiguraatiota tuotelaatujen säätöön minimoiden säätösilmukoiden ristikkäisvaikutukset. Raportointi tapahtuu web-näyttöjen kautta ilman erillistä asiakasohjelmistoa. (ExperTune, 2013b)

Ohjelmisto sisältää kattavat kolonnin optimaaliseen operointiin liittyvät laskelmat. Huomattavana erona muihin kolonnilaskentaohjelmistoihin verrattuna on, että laskentojen tulokset kohdennetaan ensisijaisesti käyttöhenkilökunnalle ylemmän tason säätimen sijaan. ProcessApex Distillationin tulokset ovat myös luonteeltaan pidemmän aikavälin päätöksentekoa tukevia ja soveltuvat sekä käyttöhenkilökunnan, kunnossapidon että tehtaan johdon käytettäviksi. Mallinnusmenetelmistä ohjelmisto ei sisällä muita vaihtoehtoja, kuin FPM-mallinnuksen.

4.4 AspenTech aspenOne Advanced Process Control

AspenTech on markkinaosuudellaan johtava prosessiteollisuuden tuotannon optimointiin tarkoitettujen ohjelmistojen toimittaja maailmanlaajuisesti. AspenTechin tarjoamat ohjelmistot ja palvelut kattavat muun muassa toimitusketjun ja tuotannon hallinnan, kehittyneet säätöratkaisut sekä erilaiset insinööryön apuvälineet. Yrityksen laaja asiakaskunta koostuu prosessiteollisuuden eri aloilla toimivien yritysten lisäksi insinööritoimistoista, kuluttajatuotteiden valmistajista sekä yliopistoista. (Aspen Technology, 2013)

AspenOne Advanced Process Control -ohjelmisto on kehittyneiden säätöratkaisujen toteutukseen tarkoitettu kokonaisuus. Ohjelmiston avulla voidaan toteuttaa ja konfiguroida erilaisia DMC-säätimiä prosessiteollisuuden tarpeisiin. Eräs

ohjelmistopakettien moduuleista on niin kutsuttu Prediction & Inferential Measurements -moduuli, jonka tarkoituksena on toimia työkaluna soft sensorien, kuten tuotelaatujen ennustamiseen. Soft sensorien rakentamiseen voi käyttää lineaarisia tai epälineaarisia menetelmiä ja niiden ennusteita voidaan päivittää analysointimittauksien tai laboratoriodatan perusteella. Soft sensorien tuetut mallirakenteet ovat (Aspen Technology, 2011):

- Black box -malli FIR (engl. Finite Impulse Response) -rakenteella
- PLS-malli
- Sumeaa logiikkaa hyödyntävä PLS-malli
- Neuroverkko-hybridimalli
- Monotoninen neuroverkko
- Linearisoidut FPM-mallit
- Itse määritetyt malliyhtälöt

Ohjelmistomoduulin vahvuus muihin verrattuna on valittavien mallirakenteiden kattavuus ja mahdollisuus räätälöintiin ilman lähdekoodin muokkausta tai koodigenerointia. Ohjelmistoa ei kuitenkaan ole tehty ainoastaan tietyn yksikköprosessin (kuten tislauksolonin) ohjaukseen, joten esimerkiksi kattavat kolonnilaskennat on määritettävä erikseen soft sensoreina.

4.5 ABB Optimize IT Inferential Modeling Platform

ABB on markkinaosuudellaan johtava automaatio- ja sähkövoimateknologiayhtiö, joka työllistää globaalisti noin 145000 henkeä. Yhtiö koostuu viidestä ydinliiketoimintayksiköstä, joista eräs on tuotantoprosessien energiatehokkuutta ja tuottavuutta parantavien järjestelmien ja tuotteiden toimituksiin keskittynyt prosessiautomaation liiketoimintayksikkö. Liiketoimintayksikön asiakaskunta koostuu pääosin öljynjalostus-, kaasun-, kemian-, lääke-, metsä-, metalli- sekä meriteollisuuden toimialojen yrityksistä. (ABB, 2013)

ABB:n Optimize IT Inferential Modeling Platform on ohjelmistomoduuli, jonka avulla käyttäjä voi kehittää datapohjaisia soft sensoreja sovellusprosessista riippumatta.

Käyttäjän avuksi datan esikäsittelyyn ohjelmisto tarjoaa automaattista, tilastollisiin menetelmiin perustuvaa poikkeavien havaintojen poistoa. Ohjelmiston tukemat valmiit mallirakenteet ovat kaikki datapohjaisia:

- Adaptiiviset neuroverkot
- Myötäkytketyt neuroverkot
- Geneettisiä algoritmeja hyödyntävät neuroverkot
- Lineaarinen regressio
- Painotettu regressio
- PLS-regressio

Lisäksi ohjelmistoon on mahdollista määrittää räätälöityjä mallirakenteita, mutta tämä vaatii ulkoisen DLL:n (engl. Dynamic-Link Library) käyttöä. Järjestelmäarkkitehtuuri mahdollistaa ohjelmiston kommunikoinnin automaatiojärjestelmän ja LIMS (engl. Laboratory Information Management System) -järjestelmän kanssa standardirajapintojen avulla. (ABB, 2007)

Ohjelmisto on tarkoitettu yleiseksi datapohjaisten soft sensorien kehitystyökaluksi. Datapohjaisuus rajoittaa ohjelmiston käyttöä tarkkaan tunnetuissa yksikköprosesseissa, sillä räätälöityjen mallien käyttöönotto ulkoisen DLL:n avulla on monimutkaisempaa muiden ohjelmistojen ratkaisuihin verrattuna.

4.6 Honeywell Profit SensorPro

Honeywell on noin 132000 henkeä työllistävä globaali teknologiakehitys- ja valmistusyhtiö. Yhtiö koostuu neljästä liiketoimintayksiköstä, joista eräs on automaatio- ja ohjausratkaisujen (Automation and Control Solutions) liiketoimintayksikkö. Liiketoimintayksikkö toimii muun muassa prosessiteollisuuden, rakennusalan, turvallisuusteknologioiden sekä erilaisten tunnistus- ja havaitsemisteknologioiden parissa. (Honeywell, 2013)

Honeywellin Profit SensorPro on tilastollista analyysia ja regressiomallinnusta hyödyntävä soft sensor -ohjelmistopaketti. Ohjelmisto tarjoaa apua esimerkiksi selittäjämuuttujien valintaan pääkomponenttianalyysia ja muita tilastollisia

menetelmiä hyödyntäen. Ohjelmiston tukemat mallinnusmenetelmät ovat PNS-regressio, painotettu PNS-regressio, monimuuttujamenetelmät PLS ja DSS (engl. Dynamic Sub-Space) sekä käyttäjän määrittämät malliyhtälöt. Lisäksi ohjelmisto tarjoaa työkalut muuttujamuunnosten luomiseen ja prosessien dynaamisen luonteen huomioonottamiseen ja kompensointiin staattisissa, lineaarisissa regressiomalleissa. Datan esikäsittelyyn ohjelmisto tarjoaa muun muassa poikkeavien datapisteiden automaattisen havaitsemisen. Mallin ylläpito ja päivitys on mahdollista linkittää laboratoriomittausten tuloksiin. (Honeywell, 2011)

Ohjelmisto on yleinen tilastollisten soft sensorien kehittämiseen tarkoitettu työkalu. Sen vuoksi sen ominaisuudet tilastolliseen analyysiin ja mallien rakentamiseen ovat varsin kattavat ja moneen tarkoitukseen sovellettavissa. Valmiita tislaukolonneihin liittyviä mallirakenteita ohjelmistossa ei kuitenkaan ole ja mallinnus rajataan vain tilastollisiin menetelmiin.

KOKEELLINEN OSA

Kokeellisessa osassa esitellään luvussa 5 NAPCON Indicator -ohjelmiston nykyiset laskenta-algoritmit, järjestelmä- ja ohjelmistoarkkitehtuuri sekä konfigurointimenetelmät. Nykyiselle ratkaisulle kartoitetaan ohjelmiston tärkeimmät parannuskohteet kappaleessa 1.2 esitettyjen työn tavoitteiden saavuttamiseksi. Luvussa 6 esitetään toimenpiteet kartoitettujen parannuskohteiden saavuttamiseksi ja esitellään uudistettu, vaatimukset täyttävä ratkaisu. Ratkaisuun liittyvät ohjelmistot toteutetaan siltä osin, että kaikkien uudistettujen osioiden testaus on mahdollista. Luvussa 7 reaaliaikaisen laskentaohjelmiston testaus suoritetaan ja testauksen tulokset arvioidaan. Testauksessa laskentatuloksia verrataan kahden kaupallisen simulaattorin tuloksiin erästä monituotekolonnin simulointimallia käyttäen sekä tarkastellaan toteutetun laskennan herkkyyttä ja vikasietoisuutta.

5 Nykyinen ratkaisu

NAPCON Indicator on Neste Jacobs Oy:llä kehitetty ohjelmisto, jonka avulla voidaan räätälöimällä kehittää reaaliaikaisia laskentoja erilaisten jatkuvatoimisten prosessien operoinnin ja säädön tehostamiseksi. Ohjelmiston joustavan rakenteen ansiosta laskentoja voidaan kehittää räätälöidysti erilaisille prosesseille, mukaan lukien monituotetislausprosesseille. Raskaista räätälöintitarpeista johtuen ohjelmiston konfigurointi ja käyttöönotto vievät paljon aikaa ja vaativat erikoistietämystä laskettavan prosessin ilmiöistä.

Monituotetislauskolonnien laskennoissa NAPCON Indicator käyttää pääosin prosessimittauksia, analysaattorimittauksia, staattisen tilan malleja sekä empiirisiä korrelaatioita erilaisten kolonnin tilaa ja tuotelaatuja kuvaavien suureiden laskemiseen. Laskettujen muuttujien avulla mahdollistetaan ylemmän tason säätimien, kuten malliprediktivisten säätimien sekä reaaliaikaisen optimoinnin käyttö tehokkaasti. Ohjelmisto räätälöidään kullekin kolonnille erikseen lähdekoodia sekä tietokantamuuttujia muokkaamalla.

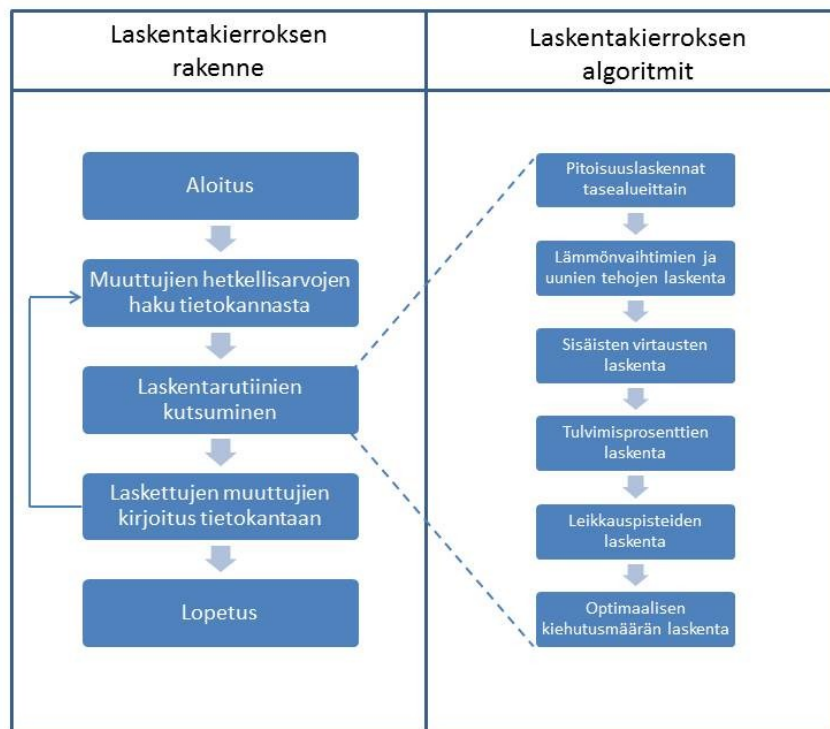
NAPCON Indicatorin ensisijainen tehtävä monituotekolonnien tuotelaatujen säädössä on laskea sivu-ulosottojen väliset leikkauspisteet, jotka kuvaavat esimerkiksi analysaattorien mittaamia tai laboratoriossa määritettäviä tislauskyriä pisteitä. Tällöin analysaattorisuureiden säädöistä saadaan ohjaussuureina tavoitearvot lasketuille leikkauspistelämpötiloille, joiden säädöstä puolestaan saadaan alemman tason säätimien (kuten virtaussäätimien) asetusarvot. Konfiguraation edut ovat, että analysaattoria voidaan käyttää ylätasen säädössä sen pitkästä mittausvälistä huolimatta ja että mittauksen vikaantuessa tai analysaattorin puuttuessa voidaan säätöön käyttää pelkkiä leikkauspistelaskentoja.

Leikkauspisteiden lisäksi tärkeitä reaaliaikaisen laskennan tuloksia ovat tulvimisprosentit ja optimaalinen kiehutusmäärä. Tulvimisprosentit toimivat kolonnin kehittyneessä säädössä rajoituksina ja indikoivat operaattorille kolonnin tilaa. Optimaalinen kiehutusmäärä (höyryvirtaus) minimoi kolonnin operoinnin kokonaiskustannukset kappaleessa 2.3.6 esitetyn optimointitehtävän mukaisesti.

Optimaalista höyryvirtausta voidaan käyttää asetusrvona taseista lasketulle sisäiselle höyryvirtaukselle. Manipuloitavana muuttujana voidaan käyttää esimerkiksi kiertopalautusvirtaa ulosoton yhteydessä, jos virran pitoisuutta säädetään ulosottovirtauksen määrällä.

5.1 Kolonnilaskentojen algoritmit

Yksinkertaistettuna kolonnilaskentojen laskentakierros koostuu muuttujien luvusta tietokannasta, laskentojen suorituksesta sekä muuttujien uusien arvojen kirjoituksesta tietokantaan. Laskentakierroksen rakenne on esitetty kuvassa 8.

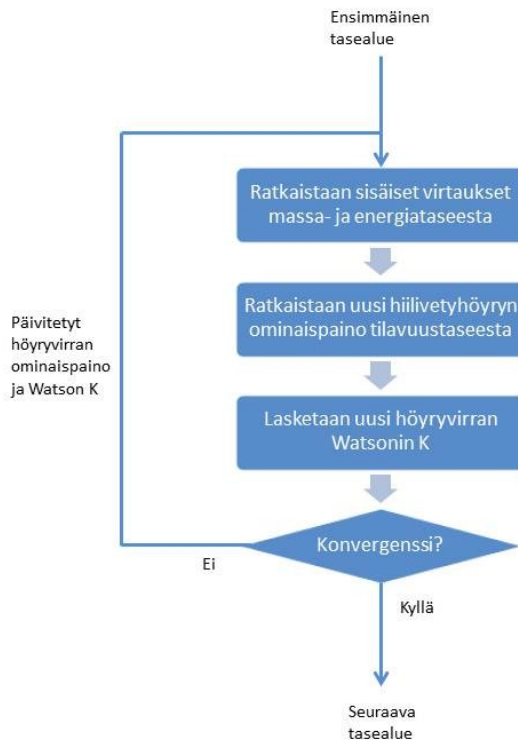


Kuva 8. Laskentakierroksen suoritus. NAPCON Indicator laskee tietokannan hetkellisarvojen perusteella kolonnin tilaa kuvaavia suureita ja kirjoittaa tulokset tietokantaan.

Laskentarutiineissa määritetään aluksi sekä ulkoisten, että sisäisten virtausten LK- ja HK-pitoisuudet kussakin tasealueessa. Pitoisuudet voidaan määrittää joko mittausten tai tislaukkyrien ja leikkauspisteasetusarvojen perusteella ja niitä

tarvitaan leikkauspistelaskennassa sekä energiakäytön optimoinnissa. Tämän jälkeen lasketaan mittausten ja aineominaisuuksien perusteella tehot kaikille kolonnin lämmönsiirtimille. Tehojen perusteella voidaan muodostaa kolonnin energiataseet.

Laskennan tulosten perustana ovat massa- energia- ja tilavuustaseet, jotka muodostetaan prosessimittausten sekä kappaleessa 2.3.2 esitettyjen perusaineominaisuuksien avulla. Taseiden tuntemattomat muuttujat ovat kolonnin sisäiset virtaukset ja tasealueiden muodostaminen tapahtuu kolonnin sivuulosottojen perusteella. Taseiden ratkaisussa joko huipun tai pohjan taseet oletetaan aluksi virheettömiksi, jolloin ensimmäisen tasealueen sisäiset virtaukset voidaan laskea. Tämän jälkeen edetään vuorollaan kuhunkin kolonnin taseeseen, joka täsmätään aina edellisen taseen tuloksiin. Iteraatioiden edetessä höyryfaasissa olevien virtausten ominaisentalpiaa joudutaan korjaamaan joka kierroksella, koska ominaispainolle ja Watsonin karakterisointikertoimelle ei ole saatavilla tarkkoja, helppokäyttöisiä korrelaatioita. Iteroinnin kulku on esitetty kuvassa 9.



Kuva 9. Sisäisten virtausten ratkaiseminen iteroimalla. Tasealueen hiilivetyhöyryn ominaispainoa ja Watsonin K -kerrointa tarkennetaan joka iteraatiokierröksellä tilavuustaseen avulla.

Sisäisten virtausten avulla NAPCON Indicator voi ennustaa kolonnin välipohjien tulvimista sekä laskea sivu-ulosottojen välisiä leikkauspisteitä ja optimaalisen kiehutuksen määrän. Leikkauspisteet lasketaan sovittamalla seuraavanlainen regressiomalli laboratorio- ja analysointimittauksiin:

$$T_{CP} = K_1 EFV_0 + K_2 Y + K_3 \frac{L}{V} + K_4 \quad (28)$$

missä T_{CP} on leikkauspistelämpötila, EFV_0 on tuotteen alkukiehumispiste, Y tuotteen saanto (massaosuus) ulosottopohjan yläpuolella olevassa höyryfaasissa sekä L ja V neste- ja höyryvirtaukset ulosottopohjan yläpuolella. Neste- ja höyryvirtauksen suhdetermiä käytetään erityisesti kuvaamaan TBP-käyrän epälineaarisia osia, kuten keveämmän komponentin suhteen 90 ja 95 % tisluspisteitä. K_1 , K_2 , K_3 ja K_4 ovat mallin regressiokertoimet.

Tuotevirtojen ja syötön TBP-käyrien pisteiden täsmäys analysaattorimittausten ja laboratoriotulosten perusteella vaihtelee NAPCON Indicatorissa kolonnikohtaisesti. TBP-käyrät voidaan siis olettaa vakioiksi tai niitä voidaan päivittää automaattisesti joka laskentakierroksella. Lisäksi syötön TBP-käyrän pisteitä ja perusominaisuuksia on mahdollista estimoida reaaliaikaisesti tuotetietojen perusteella.

Laskennassa ei-mitattujen lämpötilojen, paineiden ja aineominaisuuksien määrittäminen voi perustua interpolointiin, ekstrapolointiin tai lähdekoodiin erikseen määritettäviin oletuksiin. Esimerkiksi kolonnin sisäisten virtausten lämpötilat voidaan interpoloida ulkoisten virtausten lämpötilamittausten perusteella.

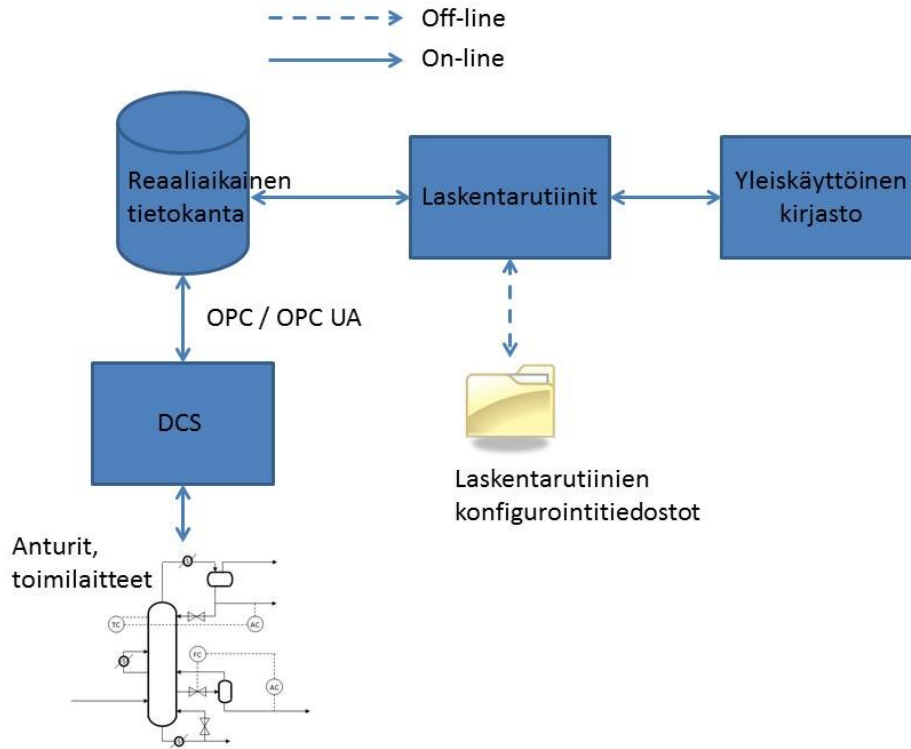
5.2 Nykyinen järjestelmäarkkitehtuuri

NAPCON Indicator on suunniteltu tukemaan monen sovellusalueen prosessien reaaliaikaista laskentaa, minkä vuoksi sen järjestelmärakennekin vaihtelee räätälöidystä sovelluksesta riippuen. Ohjelmiston nykyisistä asennuksista voidaan kuitenkin karkeasti erotella kahdentyyppisiä järjestelmäarkkitehtuureja: kolonnilaskentojen ja muiden laskentojen arkkitehtuurit. Eräs syy kolonnilaskentojen ja muiden laskentojen erotteluun on, että pelkälle monituotekolonnille on mahdollista kehittää helpommin räätälöitäviä laskentarunkoja, kuin suuremmille ja monimutkaisemmille prosesseille, joilla laskennat räätälöidään useimmiten alusta alkaen.

5.2.1 Kolonnilaskentojen nykyinen järjestelmäarkkitehtuuri

Kolonnilaskennat on suurelta osin toteutettu Alpha-ympäristön käyttöjärjestelmissä toimivina sovelluksina. Laskentasovellus on toteutettu kokonaan FORTRAN-kielisenä, itsenäisenä sovelluksena, joka kommunikoi reaaliaikaisen tietokannan kanssa lukemalla tietokantamuuttujien hetkellisarvoja ja päivittämällä laskettuja arvoja tietokantaan. Tietokanta sisältää laskettujen muuttujien hetkellisarvojen lisäksi automaatiojärjestelmästä (DCS, Distributed Control System) haetut, laskennassa tarvittavat mittaukset. Tietokanta ja DCS kommunikoivat keskenään

OPC- tai OPC UA -standardispeifikaation mukaisesti. Järjestelmän rakenne on esitetty kuvassa 10.



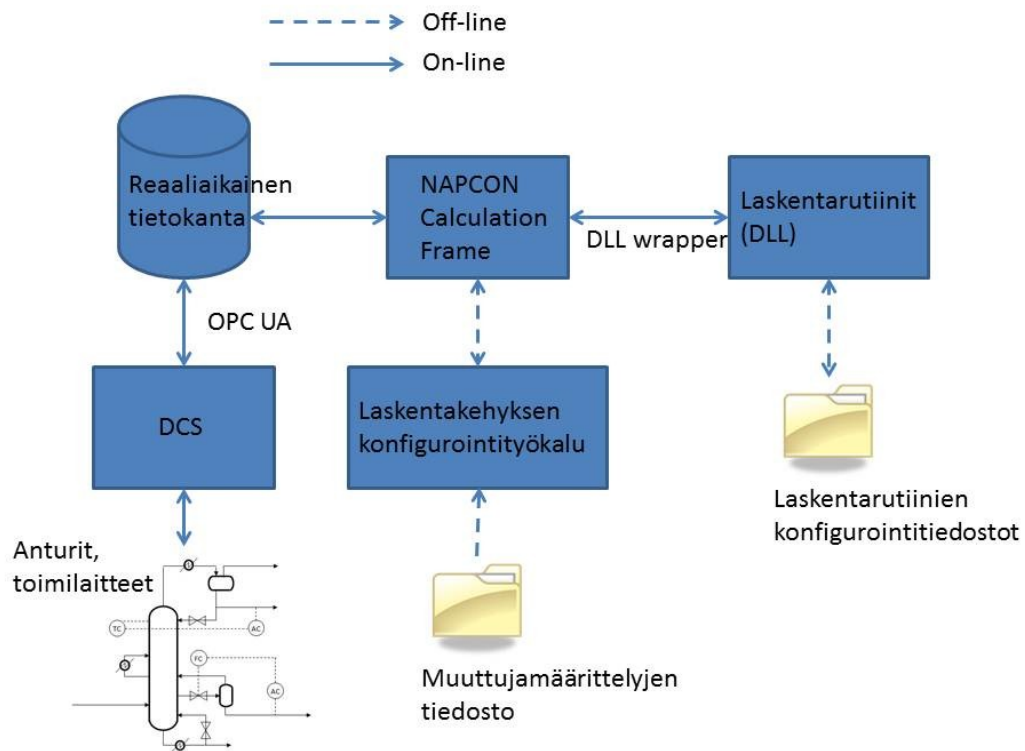
Kuva 10. Kolonnilaskennoissa käytetty reaaliaikaisen laskentajärjestelmän rakenne. On-line -kommunikaatio on merkitty kiinteillä nuolilla, off-line -kommunikaatio katkoviivanuolilla.

Laskentarutiinit kolonnilaskentojen tapauksessa on jaoteltu yleiskäyttöisiin funktioihin ja räätälöitäviin, suurempiin kokonaisuuksiin. Yleiskäyttöisten funktioiden kirjasto sisältää esimerkiksi kappaleessa 2.3 esitettyjä aineominaisuuskorrelaatioita, apufunktioita ja muita kolonnista riippumattomia rutiineja. Kolonnilaskennat räätälöidään muokkaamalla laskentarutiinien lähdekoodia ja konfigurointitiedostoja.

5.2.2 Ohjelmiston muiden laskentojen nykyinen järjestelmäarkkitehtuuri

Muiden kuin kolonnilaskentojen toteutukset on suurimmalta osin tehty Microsoftin Windows-käyttöjärjestelmissä toimiviksi. Pääpiirteissään laskentajärjestelmä koostuu Windows-palveluna suoritettavasta C#-laskentakehyksestä (NAPCON

Calculation Frame), prosessikohtaisista FORTRAN-laskentarutiineista ja myös Windows-palveluna suoritettavasta reaaliaikaisesta tietokannasta. Laskentakehys kommunikoi tietokannan kanssa lukemalla tietokantamuuttujien hetkellisarvoja ja päivittämällä laskettuja arvoja tietokantaan. Laskentakehys myös huolehtii sovelluskohtaisten rutiinien kutsumisesta joka laskentakierroksella. Sovelluskohtaiset rutiinit voidaan sisällyttää kehykseen dynaamisesti linkitettyinä kirjastona ja suorittaa .NET-ympäristössä samankaltaisilla kutsuilla sovellusprosessista riippumatta. Tietokanta sisältää kaikki laskentasovelluksen tarvitsemat ja tuottamat tiedot ja on yhteydessä automaatiojärjestelmään. Järjestelmän rakenne kommunikaatiotyyppineen on esitetty kuvassa 11.



Kuva 11. Muiden, kuin kolonnilaskentojen järjestelmäarkkitehtuuri. Olennainen ero kolonnilaskentojen arkkitehtuuriin on laskentakehys (NAPCON Calculation Frame), joka kommunikoi tietokannan kanssa ja huolehtii sovelluskohtaisten rutiinien kutsumisesta.

Yleisten prosessilaskentojen (muiden kuin kolonnilaskentojen) räätälöinti tapahtuu generoimalla konfigurointityökalun avulla automaattisesti laskentakehys

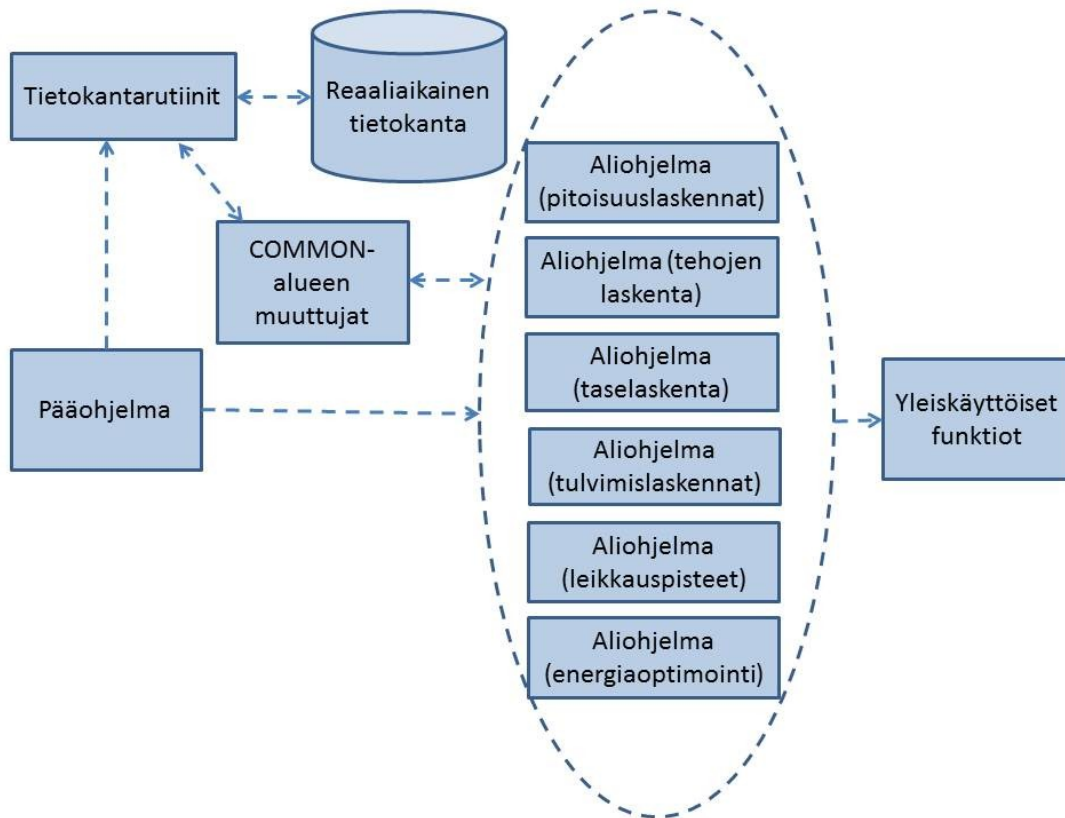
lähdekoodia ja kirjoittamalla sovelluskohtaiset laskentarutiinikoodit erikseen kullekin prosessille.

5.3 Nykyinen ohjelmistoarkkitehtuuri

Järjestelmäarkkitehtuurien tavoin myös ohjelmistoarkkitehtuurien osalta voidaan NAPCON Indicatorille erottaa kahdenlaisia arkkitehtuureja: kolonnilaskentojen ja muiden laskentojen arkkitehtuurit. Arkkitehtuurit eroavat toisistaan erittäin paljon, sillä kolonnilaskennat on toteutettu kokonaan proseduraalisella FORTRAN-kielellä, kun taas muissa laskennoissa on hyödynnetty myös olioparadigmaa. Tämän lisäksi arkkitehtuurit on suunniteltu kahta eri tarkoitusta varten: kolonnilaskennoissa on pyritty modulaariseen toteutukseen, kun taas muissa laskennoissa prosessi-informaation jaottelu ja uusien laskentasovellusten kehitys on pyritty tekemään kehittäjälle ja sovelluksen loppukäyttäjälle loogiseksi.

5.3.1 Kolonnilaskentojen nykyinen ohjelmistoarkkitehtuuri

Kolonnilaskentojen proseduraaliseen paradigmaan perustuva toteutus koostuu pääohjelmasta, joka kutsuu vuorollaan määritettyjä laskenta- ja tietokanta-aliohjelmiä. Tietokanta-aliohjelmat päivittävät tietokannasta luettuja hetkellisarvoja ohjelmiston COMMON-alueelle määritetyiksi muuttujiksi. Laskenta-algoritmeja sisältävät aliohjelmat käyttävät laskennoissaan näitä COMMON-alueen muuttujia sekä yleiskäyttöisiä funktioita, jotka on koottu omaksi kirjastokseen. Kolonnilaskentojen nykyinen ohjelmistoarkkitehtuuri on esitetty kuvassa 12.



Kuva 12. Kolonnilaskentojen nykyinen ohjelmistoarkkitehtuuri. Tietokantamuuttujien hetkellisarvot päivitetään COMMON-alueelle. Aliohjelmissä suoritetaan kolonnilaskennan algoritmit käyttäen hyväksi COMMON-alueen muuttujia sekä yleiskäyttöisiä funktioita.

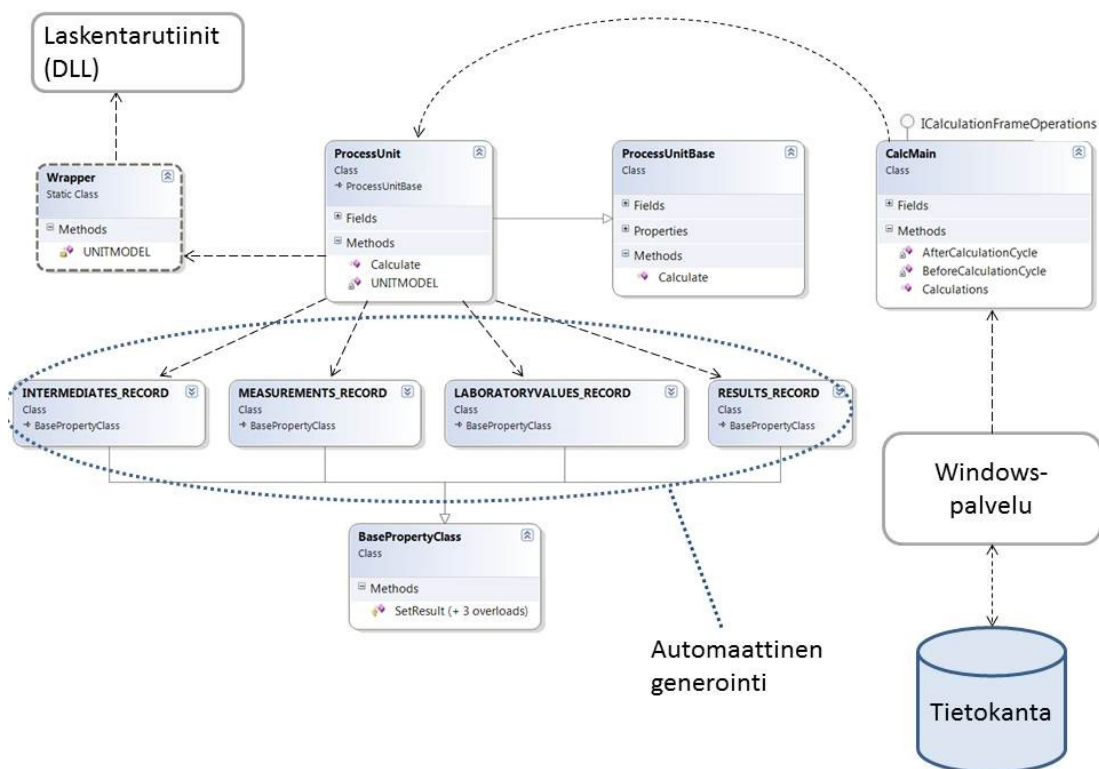
Arkkitehtuurissa aliohjelmiin perustuva jako on selkeä ja modulaarinen, mutta sen heikkoutena on konfiguroinnin hankaluus selkeän monituotekolonnin tietomallin puuttuessa. Konfigurointi on tehtävä aliohjelmien lähdekoodia ja erilaisia otsikkotiedostoja muokkaamalla.

5.3.2 Ohjelmiston muiden laskentojen nykyinen ohjelmistoarkkitehtuuri

Muissa laskennoissa käytettävän .NET-pohjaisen ohjelmiston UML (Unified Modeling Language) -kaavio tärkeimpine luokkineen ja metodeineen sekä liitännät muihin ohjelmistoihin ja kirjastoihin on esitetty kuvassa 13. Laskennan ydin on laskentakehykseen sisältyvä pääluokka (CalcMain), joka kutsuu vuorollaan laskentametodeja (Calculate) kullekin määritetylle prosessiyksikölle (ProcessUnit). Pääluokan on toteutettava rajapinta ICalculationFrameOperations, joka sisältää laskentametodeja kutsuvan Windows-palvelun vaatimat operaatiot. Kullekin

prosessiyksikölle määritetään erikseen prosessiyksikköä kuvaava, ProcessUnitBase-luokasta periyetty luokka. Yksi laskentasovellus voi suorittaa laskentaa usealle prosessiyksikölle samalla laskentakierroksella, vaikka kuvassa 13 luokkia on vain yksi (ProcessUnit). Laskennan algoritmit on toteutettu erillisellä DLL-kirjastolla esimerkiksi FORTRAN-kielillä ja niitä kutsutaan ulkoisella UNITMODEL-metodilla staattisen kääreluokan (Wrapper) kautta.

Prosessi-informaatio jaotellaan prosessiyksikköä kuvaavan luokan sisällä vielä informaatiolähteen mukaan tietueluokiksi, joiden jäsenmuuttujiksi voidaan automaattisesti generoida prosessitietoa kuvaavat (yleensä double-tyyppiset) muuttujat. Esimerkiksi kuvan 13 tapauksessa prosessi-informaatio on luokiteltu laskennan välituloksiin, mittauksiin, laboratoriotuloksiin sekä laskennan tuloksiin. Kukin tietueluokka on aliluokka BasePropertyClass-luokasta.



Kuva 13. Kokonaan räätälöitävien prosessilaskentojen UML-kaavio sekä liitännät muihin ohjelmistoihin ja kirjastoihin. Kaavio kuvaa laskentakehystä yhdelle prosessiyksikölle ja neljälle tietueluokalle.

Ohjelmiston välittäessä tietoa tietokannan kanssa käytetään abstraktista NapconVariable-luokasta periyettyjä olioita. Oliot sisältävät vastaavan muuttujan hetkellisarvojen lisäksi lukuisia hyödyllisiä attribuutteja, kuten diagnostiikka-arvoja, tietokantatunnuksen, viivästettyjä arvoja sekä OPC UA -rajapinnan muuttujan. Prosessi-informaatiota kuvaavat NapconVariable-muuttujat voidaan generoida konfigurointityökalun avulla staattisiksi jäsenmuuttujiksi tai palauttaa tietokannan kanssa kommunikoivalle prosessille dynaamisena listana. Jäsenmuuttujina olevat NapconVariable-muuttujat tietokannan kanssa kommunikoiva prosessi identifioi .NET-reflektion avulla.

Arkkitehtuurin vahvuus on prosessi-informaation helppo generointi ja jaottelu erillisen konfigurointityökalun avulla. Jaottelun ansioista uusien, kokonaan räätälöityjen sovellusten kehitys on helppoa ja valmiiden sovellusten prosessi-informaatio on loogisesti jaoteltu. Lisäksi prosessi-informaatiota kuvaavan NapconVariable-luokan käyttö mahdollistaa vikasietoisen arkkitehtuurin kehittämisen. Nykyiseen arkkitehtuuriin ei kuitenkaan ole sisällytetty valmiita, modulaarisia laskentametoodeja erilaisille yksikköprosesseille, kuten monituotetislaukselle.

5.4 Konfigurointi ja räätälöinti

Kolonnilaskentojen räätälöinti koostuu muuttujien määrittelystä tietokantaan ja otsikkotiedostoihin sekä laskentarutiinien muokkaamisesta kolonnin konfiguraation mukaan. Pääosin konfiguraatio määritetään FORTRAN-otsikkotiedostoon, jossa asetetaan arvot liitteessä 1 esitetyille parametreille. Näistä parametreista erityisesti taselaskelmien määrittelyssä vaaditaan tietämystä laskennan suorituksesta ja tislauksen ilmiöistä, eikä niitä ole mahdollista määrittää esimerkiksi suunnittelutietojen perusteella. Liitteen 1 parametrien lisäksi konfiguroijan on useimmiten muokattava suoritettavaan lähdekoodiin otsikkotiedostosta puuttuvia räätälöintimäärittelyjä. Yksikäsitteistä luettelo näille määrittelyille ei ole, koska ne riippuvat paljon kolonnin rakenteesta, instrumentaatiosta sekä tislattavista aineista. Yleisiä lähdekoodin muokkausta vaativia määrittelyjä on esitetty liitteessä 2.

Muissa, prosessikohtaisesti räätälöitävissä laskennoissa laskentamuuttujat määritellään erilliseen taulukkotiedostoon, josta voidaan konfigurointityökalun avulla automaattisesti generoida laskentakehykseen prosessi-informaatiota vastaavat prosessiyksikköoliot, tietueoliot, näiden jäsenmuuttujat sekä NapconVariable-muuttujat reaaliaikaisen tietokannan kanssa kommunikointia varten. Tämän jälkeen laskentakoodi kirjoitetaan FORTRAN-aliohjelmina kehittäjän prosessi-ilmiötietämystä hyväksikäyttäen.

5.5 Nykyisen ratkaisun parannuskohteet

Ensisijaiset parannuskohteet nykyisessä kolonnilaskennan ratkaisussa ovat laskentarutiinien konfiguroinnissa ja käyttöönotossa. Konfigurointi vie paljon aikaa ja vaatii ymmärrystä käytetyistä laskenta-algoritmeista sekä tislauksen ilmiöistä. Lisäksi, kun konfigurointia tehdään lähdekoodia muokkaamalla, on siinä suuri mahdollisuus inhimillisiin virheisiin ja puutteelliseen konfigurointiin. Ohjelmiston käyttöönotto vaatii paljon resursseja erityisesti, jos otetaan leikkauspistelaskennan lisäksi käyttöön energiakäytön optimointi ja tulvimislaskennat. Konfigurointimenetelmiä ja työkaluja on siis parannettava siten, että konfigurointi voidaan tehdä pelkkien suunnittelutietojen perusteella mahdollisimman kattavasti kolonnin rakenteesta riippumatta.

NAPCON Indicatorilla kehitetyissä, kokonaan räätälöidyissä laskentasovelluksissa käytetään prosessi-informaatiota kuvaamaan NapconVariable-tietorakennetta, joka sisältää muun muassa hyödyllistä diagnostiikka-informaatiota, OPC UA -rajapinnan sekä viivästettyjä hetkellisarvoja. Tätä tietorakennetta ei hyödynnetä nykyisissä kolonnilaskennan toteutuksissa, jolloin vikatilanteiden tulkinta ja käsittely on hankalaa. Uudistetuista kolonnilaskentasovelluksista saadaan vikasietoisempia ja modernien OPC UA -rajapinnan sisältävien järjestelmien kanssa yhteensopivia käyttämällä NapconVariable-tietorakennetta prosessi-informaation kuvaamiseen.

Myös laskenta-algoritmeissa on parannuskohteita. Nykyisellään taseiden ratkaisualgoritmi ei ratkaise kaikkia taseita samanaikaisesti, vaan taseet ratkaistaan perättäin käyttäen edellisen (tai ensimmäisen) taseen tietoja ratkaisun

lähtötietoina. Algoritmi ei siten minimoi kaikkien taseiden virheistä riippuvaa kustannusfunktiota, vaan kiinnittää ratkaisun ensimmäisen taseen lähtötietoihin. Laskenta-algoritmia on mahdollista parantaa siten, että ratkaisu minimoi määritetyn kustannusfunktion, joka riippuu kaikista kolonnille muodostettavista taseista.

Vianselvityksessä energia- ja massataseet ovat arvokkaita työkaluja (Kister, 2006). Esimerkiksi virheellisten virtaus- tai lämpötilamittausten vallitessa voivat taseiden virheet indikoida sitä kolonnin osaa, jossa virhe esiintyy. Kister (2006) esitti case-esimerkin, jossa taselaskennan avulla määritettiin virheellisen virtausmittauksen paikka häiriötilassa olevalle teolliselle tislaukskolonnille. Myös NAPCON Indicatorissa olisi kolonnin häiriötilanteiden varalta siten tarpeen esittää operaattorille kunkin taseen virheet, jolloin suuret prosentuaaliset virheet sekä massa- että energiataseissa viittaisivat virheelliseen virtausmittaukseen ja suuri prosentuaalinen virhe pelkässä energiataseessa virheelliseen lämpötilamittaukseen kyseisellä tasealueella.

Lisäksi leikkauspistelaskennan parametrien sovittaminen nykyisellään on hankalaa, koska parametrien sovittamiseen ei ole erillistä työkalua. Nykyisessä ratkaisussa mallin regressiokertoimet määritetään manuaalisesti visuaalisen arvioinnin tai kokemuksen perusteella. Jos mallirakennetta tai mallin parametreja halutaan muuttaa, on ne muokattava lähdekoodiin.

6 Uudistettu ratkaisu

NAPCON Indicator -kolonnilaskennoille määritettiin tässä työssä toteutettavaksi seuraavat kehitystoimenpiteet kappaleessa 5.5 kuvattujen parannuskohteiden täyttämiseksi:

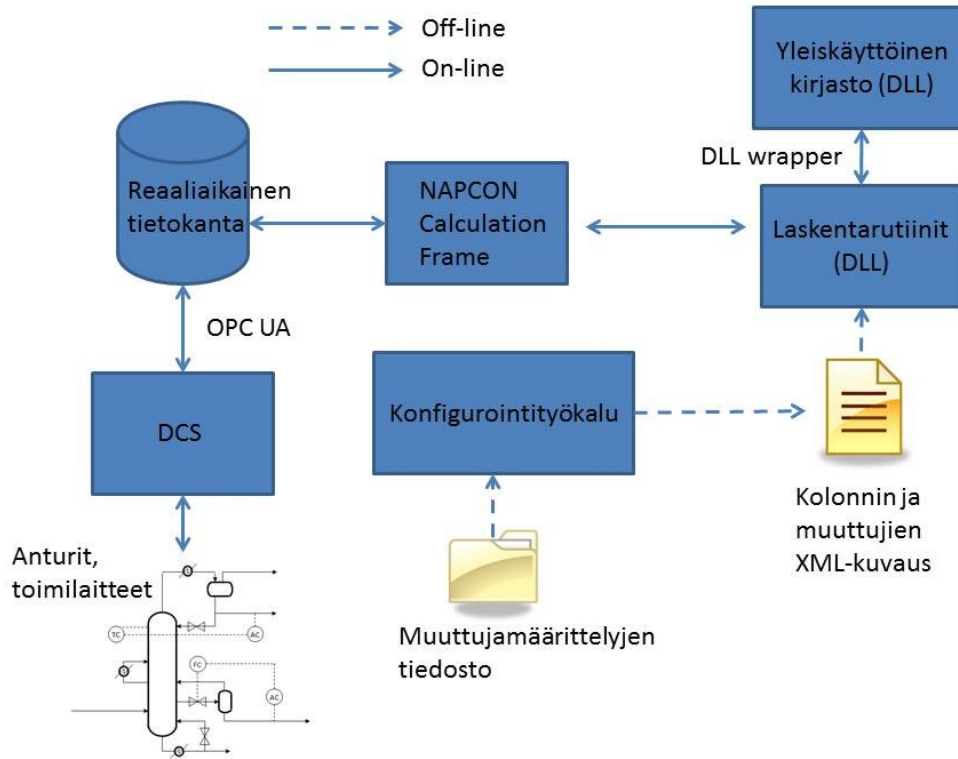
- Järjestelmäarkkitehtuurin uudelleenjärjestely muissa, kuin kolonnilaskennoissa käytettävää C#-laskentakehystä ja prosessi-informaation tietorakennetta käyttäen
- Helposti räätälöitävän tietomallin suunnittelu ja toteutus monituotekolonneille
- Uuden konfigurointityökalun toteutus
- Taselaskenta-algoritmin uudelleensuunnittelu ja toteutus
- Uudistetun reaaliaikaisen kolonnilaskentaohjelmiston toteutus siltä osin, mitä uudistettujen algoritmien testaus vaatii

Niiden parannuskohteiden, jotka eivät sisälly kappaleessa 1.4 kuvattuun työn rajaukseen, kehitystoimenpiteet on esitetty jatkotutkimusehdotuksina luvussa 9.

6.1 Uudistetun ratkaisun järjestelmäarkkitehtuuri

Uudistetun ratkaisun järjestelmäarkkitehtuuri on esitetty kuvassa 14. Arkkitehtuuri perustuu NAPCON Indicatorin muissa, kuin kolonnilaskennoissa käytettävään arkkitehtuuriin, joka on toteutettu pääosin .NET-ympäristössä. Uudessa järjestelmäarakenteessa laskennan konfiguroinnin voi tehdä kokonaisuudessaan yhden graafisen konfigurointityökalun avulla lähdekoodia muokkaamatta tai generoimatta. Konfiguroinnin tuloksena saadaan monituotekolonnin ja kolonniin liittyviä tietokantamuuttujia kuvaava olioinstanssi, jonka tila voidaan tallettaa pysyvästi XML (engl. eXtensible Markup Language) -muotoisena dokumenttina. Vastaavasti XML-dokumentista voidaan deserialisoida olioinstanssi itse laskentasovelluksessa ennen laskentojen aloittamista. Laskennassa käytettävät tietokantamuuttujat määritellään ulkoiseen taulukkotiedostoon konfiguroinnin

yhteydessä. Konfiguroinnin jälkeen sovellus ei kuitenkaan ole riippuvainen taulukkotiedostosta.



Kuva 14. Uudistetun ratkaisun järjestelmäarkkitehtuuri. Uudessa arkkitehtuurissa kolonnilaskennat on mahdollista konfiguroida yksittäisen graafisen työkalun avulla.

Sovelluskohtaiset laskentarutiinit siirrettiin C#-ympäristöön, jotta kolonnia kuvaavaa olioinstanssia voidaan hyödyntää tehokkaasti ja vaivattomasti. Yleiskäyttöiset aliohjelmat on säilytetty FORTRAN-kirjastona ja pakattu DLL-tiedostoksi C#-laskentarutiinien kutsuttavaksi. Yleiskäyttöinen kirjasto sisältää muun muassa aineominaisuuksien laskennan mallit.

Uudistetussa järjestelmärakenteessa olennainen muutos on, että suurempi osa laskennan muuttujista säilötään tietokantamuuttujina sen sijaan, että ne määritellään otsikkotiedostona laskennan sisäiseksi muuttujiksi. Tietokantamuuttujien käyttö mahdollistaa laskentasovelluksen käyttäjälle muuttujien arvojen vaihtamisen laskentojen ollessa käynnissä. Tämä mahdollisuus

on erityisen hyödyllinen ei-mitattaville muuttujille, jotka pysyvät pitkään vakioina. Esimerkiksi vakiona pidettyjä tislaukkyrien pisteitä voidaan näin muuttaa, kun tiedetään kyseisen virran koostumuksen muuttuneen oleellisesti. Muita tämänkaltaisia parametreja ovat tulvimislaskentojen ja energiakäytön optimoinnin parametrit, leikkauspistelaskennan regressiokertoimet sekä erilaiset viritysparametrit ja suodatuskertoimet.

6.2 Uudistetun ratkaisun ohjelmistot ja kirjastot

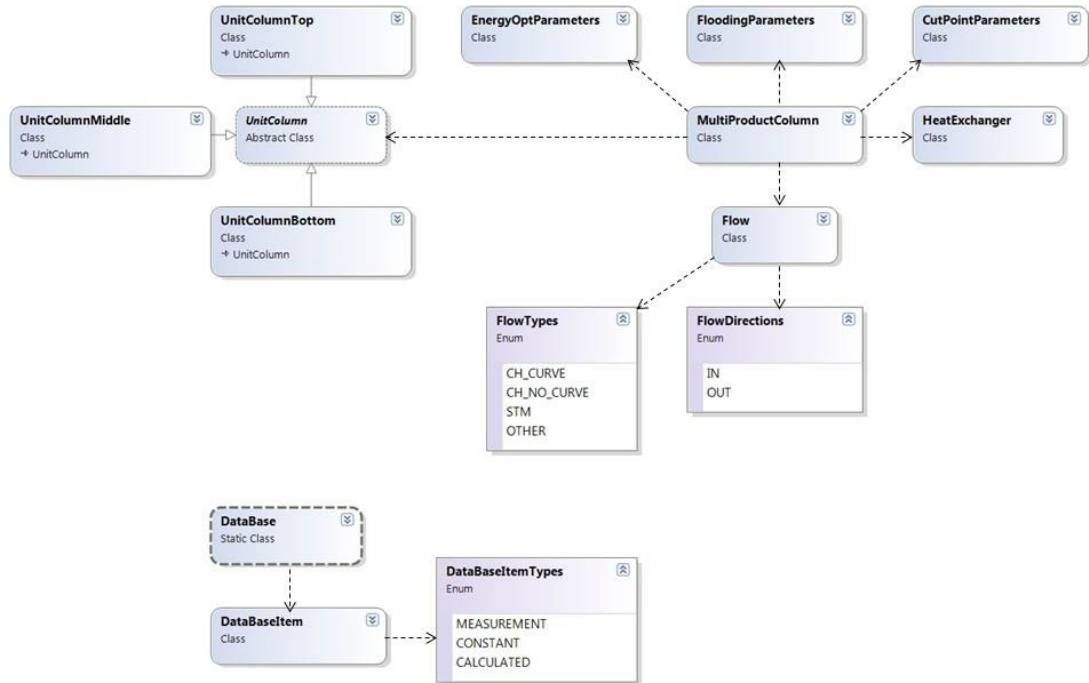
Kirjallisuusosassa FPM-malleihin perustuvien laskentojen käytölle kartoitettiin suurimmiksi haasteiksi kehittämiseen vaadittava aika, prosessitietämys sekä teollisuuden sopivien mallinnustyökalujen puute (Pantelides & Renfro, 2013). Näihin ongelmiin pyrittiin työssä pureutumaan ohjelmistosuunnittelun sekä monituotetislauksen ilmiötietämyksen perusteella. Kolonnilaskennoista sekä niiden konfiguroinnista kehitettiin monelta osin uudistettu ratkaisu olemassa olevaan .NET-ympäristössä toimivaan laskentakehykseen tukeutuen. Uudistetun ratkaisun ohjelmistot jaettiin neljään moduuliin:

- Monituotekolonnin rakennetta ja tietokantasisältöä mallintava kirjasto
- Graafinen konfigurointityökalu, jonka avulla voidaan luoda edellä mainitun kirjaston mukaisia monituotekolonnin-instansseja, muokata niitä ja tallentaa niiden tila pysyvään tietovarastoon
- Yleiskäyttöisten funktioiden kirjasto, joka sisältää muun muassa aineominaisuuslaskennan menetelmät sekä lineaarialgebran menetelmiä
- Reaaliaikainen laskentasovellus, joka sisältää monituotekolonnikirjastoa sekä yleiskäyttöisten funktioiden kirjastoa hyödyntävän ylemmän tason laskentakoodin. Kirjastojen käytön ansiosta voitiin luoda yleispätevä sovellus, jonka koodia ei tarvitse muokata laskettavan kolonnin rakenteesta, instrumentaatiosta ja lähtötiedoista riippuen.

Näiden moduulien rakenteet ja toiminnat on esitetty kappaleissa 6.2.1, 6.2.2 sekä 6.2.3. Uudistetun ratkaisun algoritmit on selostettu tarkemmin kappaleessa 6.3.

6.2.1 Monituotekolonnin tietomalli

Monituotekolonnin rakenteen ja tietosisällön mallintamiseen ohjelmoitiin erillinen luokkakirjasto. Kirjasto rakentuu pääosin monituotekolonnin kuvaavan MultiProductColumn-luokan ympärille kuvan 15 mukaisesti.



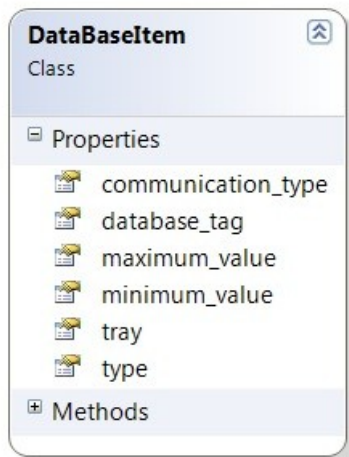
Kuva 15. Monituotekolonnin rakennetta ja tietosisältöä kuvaava luokkakirjasto. Kirjasto rakentuu pääosin monituotekolonnin kuvaavan MultiProductColumn-luokan ympärille. Tietokantainformaation käsittelyn apuvälineinä toimivat luokat on eriytetty kolonnin mallinnuksesta.

Monituotekolonne jaetaan mallissa tasealueiksi huippua (**UnitColumnTop**), pohjaa (**UnitColumnBottom**) sekä muita kolonnin tasealueita (**UnitColumnMiddle**) kuvaavina luokkina. Jaottelu perustuu niin kutsutun pseudobinääriseen tislauksen menettelyihin, missä monituotekolonne jaetaan sivu-ulosottojen perusteella useaksi pseudobinääriseksi kolonniksi, jossa kussakin erotetaan toisistaan kevyt ja raskas avainkomponentti. Kukin tasealuetta kuvaava luokka on määrätty periytyvän yhteisestä abstraktista ylliluokasta (**UnitColumn**) näiden käsittelyn helpottamiseksi.

Ilmiömallinnuksen ja laskennan apuvälineiksi toteutettiin virtausta (Flow), lämmönsiirintä (HeatExchanger) sekä laskentaparametreja (CutPointParameters, FloodingParameters ja EnergyOptParameters) kuvaavat luokat, joiden instanssit liittyvät aina tiettyyn tasealueeseen. Virtauksille on määrätty laskennan kannalta oleelliset suunta (sisään tasealueeseen tai tasealueesta ulos) sekä virtaustyyppi, joka voi olla jokin seuraavista:

- Hiilivetyvirtaus, jonka TBP-käyrästä on mittaus tai luotettava estimaatti saatavilla
- Hiilivetyvirtaus, jonka TBP-käyrästä ei ole saatavilla luotettavaa tietoa
- Vesihöyryvirtaus
- Muu virtaus

Tietokantamuuttujia mallinnetaan luokalla DataBaseltem. Luokka sisältää ominaisuuksinaan kuvan 14 reaaliaikaisen laskentakehyksen vaatimat määrittelyt kommunikation suunnasta, maksimiarvosta, minimiarvosta, tunnuksesta sekä mahdollisesta pakotuksesta nolla-arvoon. Luokan ominaisuudet on esitetty kuvassa 16.



Kuva 16. Tietokantamuuttujaa kuvaava luokka DataBaseltem. Luokan jäsenmuuttujat "tray" ja "type" kuvaavat erityisesti kolonnilaskentojen vaatimia tietoja tietokantamuuttujan ominaisuuksista. Muiden jäsenmuuttujien sisältämät tiedot tarvitaan reaaliaikaisen tietokannan kanssa kommunikointia varten.

Reaaliaikaisen kolonnilaskennan kannalta on hyödyllistä tietää tietokantamuuttujaan liittyvä välipohja kolonnissa (tray) sekä tiedon lähteen tyyppi (type), joten myös nämä määrittelyt sisällytettiin tietokantamuuttujaa kuvaavaan luokkaan. Tietokantamuuttujan arvojen lähteet jaotellaan mittauksiksi (MEASUREMENT), lasketuiksi arvoiksi (CALCULATED) sekä vakioarvoiksi (CONSTANT).

Tietokantamuuttujien käsittelyn avuksi toteutettiin staattinen luokka TislaDataBase. Varsinaiset olioinstanssit kuitenkin säilötään monituotekolonnin kuvaavan luokan ilmentymämuuttujina, mikä helpottaa kolonnin konfigurointiympäristön toteutusta.

Monituotekolonnin kuvaavan olioinstanssin tila on konfiguroinnin aikana voitava tallettaa pysyvästi tietovarastoon. Pysyvästi tietovarastoon tallettaminen mahdollistaa konfiguroinnin suorittamisen monessa osassa ja helpottaa konfigurointityökalun ja itse laskentasovelluksen kehittämistä toisistaan riippumattomina. Olioinstanssin tilan muuntamista muotoon, joka voidaan tallettaa pysyvästi tai siirtää protokollan yli kutsutaan serialisoinniksi (Microsoft, 2013a). Serialisoinnin teknologiaksi valittiin XML-serialisointi seuraavista syistä:

- XML-formaatti on tekstipohjaisena ihmiselle helposti luettavissa ja tulkittavissa. (Kangasharju & Tarkoma, 2007)
- XML on avoin standardi, minkä ansiosta mikä tahansa sovellus voi prosessoida dokumentin tietoa. (Microsoft, 2013a)
- Serialisoinnin tai deserialisoinnin nopeus ei ole kriittinen tekijä, koska ne tapahtuvat off-line sekä konfiguroitaessa että laskentoja käynnistäessä.

6.2.2 Konfigurointityökalun toiminta

Konfigurointityökalun avulla voidaan luoda uusia kolonni-instansseja, generoida kolonnin perusrakenteet automaattisesti konfiguroijan antamien yksinkertaisten tietojen perusteella sekä tarkastella ja muuttaa olemassa olevia, XML-dokumentteina tallennettuja kolonni-instansseja. Työkalussa on graafinen käyttöliittymä, joka esittää monituotekolonnin hierarkkisena rakenteena. Lisäksi

työkalun avulla voidaan hallita kolonnin käyttämiä tietokantamuuttujia selkeän taulukkonäkymän avulla.

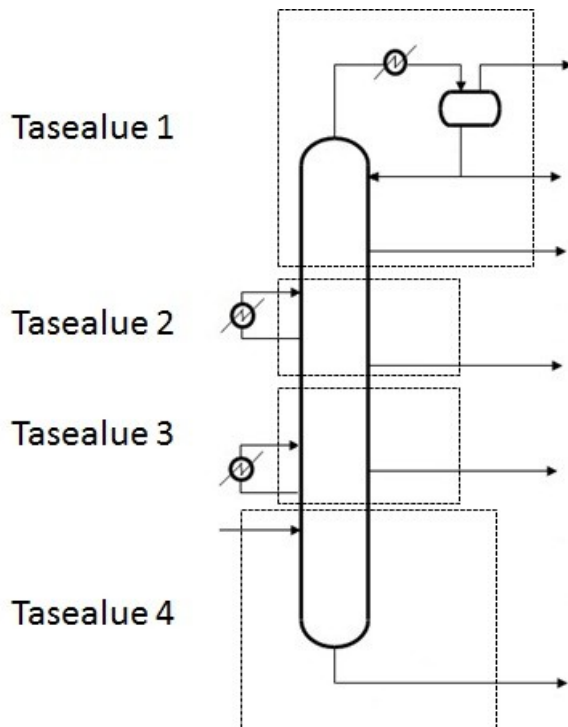
Uusia kolonni-instansseja luodessa konfigurointityökalun käyttäjä antaa seuraavat lähtötiedot:

- Kolonnin nimi
- Tietokantamuuttujatiedoston polku
- Erotuspohjien lukumäärä
- Syöttöpohjien numerot
- Sivu-ulosottopohjien numerot
- Kiertopalautuksien ulosottopohjien numerot
- Kiertopalautuksien paluupohjien numerot
- Kolonniin syötettävien strippaushöyryvirtojen pohjanumerot
- Ulkoisiin virtoihin liittyvien lämmönsiirtimien pohjanumerot

Näiden lähtötietojen perusteella työkalu luo monituotekolonneinstanssin, jossa on oikea määrä tasealueita ja taserajat on määritetty pseudobinäärisen tislauksen laskuperiaatteiden mukaisesti. Lisäksi ohjelmisto luo oikean määrän lämmönsiirtimiä ja virtauksia (mukaan lukien kolonnin sisäiset virtaukset) kuhunkin tasealueeseen ja asettaa niille oletusarvoiset virtaustyytit, suunnat sekä muut oletusarvoiset ominaisuudet, kuten höyryfaasin massaosuuden. Jos konfiguroija on asettanut monituotekolonnin sisäisille lämpötila- ja painemittauksille kullekin erotuspohjalle tietokantapositiot, asettaa konfigurointityökalu oletusarvoisesti kyseisellä kolonnin pohjalla vallitsevat lämpötila- ja painemuuttujat konfiguroimattomille virtauksille. Menettelyn etuna on, että konfiguroijan ei välttämättä tarvitse muodostaa oletuksia virtausten olosuhteista, vaan olosuhteet interpoloidaan automaattisesti kolonnissa olemassa olevien mittausten mukaan.

Tasealueisiin jako perustuu sivu-ulosottojen ja kiertopalautusten pohjanumeroihin. Kussakin tasealueessa pohjan tasealuetta lukuun ottamatta on aina yksi sivu-ulosottovirtaus ja tasealueiden kokonaismäärä on aina yhden suurempi, kuin sivu-ulosottojen lukumäärä. Huipun tasealueeseen kuuluu siten kaksi tuotevirtaa ja

kaikkiin muihin tasealueisiin yksi tuotevirta. Lisäksi, jos tasealueeseen kuuluu yhden tuotevirran yli pumpattavasta kiertopalautuksesta joko lähtö- tai tulovirta, rajataan molemmat kiertopalautuksen virrat mukaan tasealueeseen. Tällöin laskentoihin tarvittavissa lähtötiedoissa on enemmän joustavuutta (selitetty tarkemmin kappaleessa 6.3). Kuva 17 on esimerkki tasealueiden rajauksista kolonnille, jossa on kolme sivu-ulosottoa.

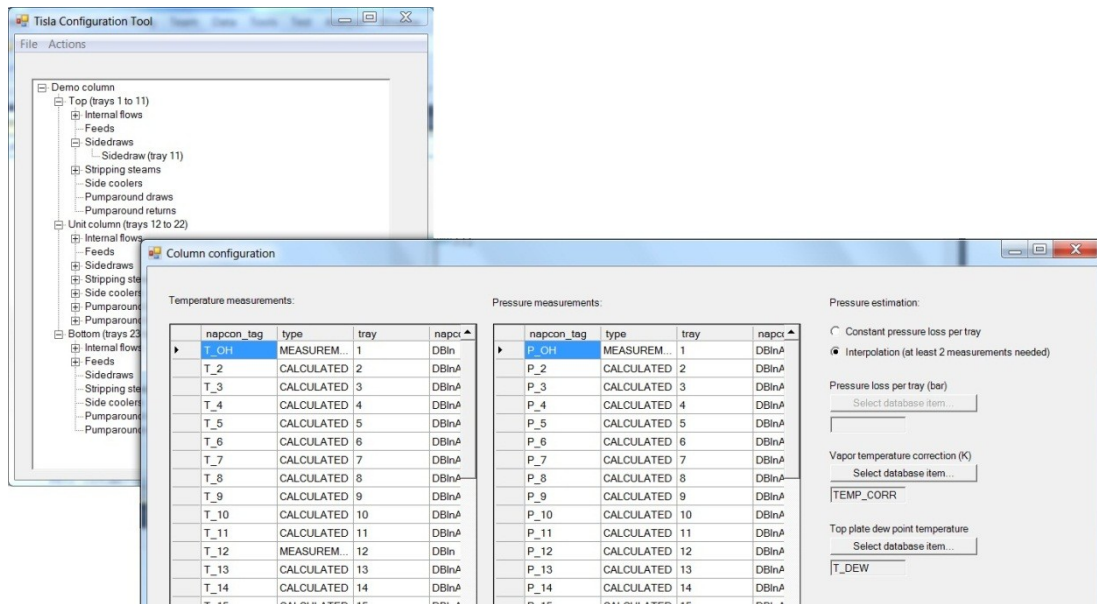


Kuva 17. Esimerkki tasealueiden rajauksista. Huipun tasealueeseen (tasealue 1) rajataan kaksi tuotevirtaa, kaikkiin muihin yksi. Lisäksi kiertopalautuksien molemmat virrat rajataan yhteen tasealueeseen (tasealueet 2 ja 3).

Kuvan 17 esimerkkitapauksessa konfigurointityökalu luo monituotekolonnin (MultiProductColumn), jolla on yksi huipun tasealue (UnitColumnTop), yksi pohjan tasealue (UnitColumnBottom) sekä kaksi muuta tasealuetta (UnitColumnMiddle) kappaleessa 6.2.1 esitetyn tietomallin mukaisesti.

Käyttäjän tehtäväksi konfiguroinnissa jää tietokantamuuttujien määrittäminen ja muuttujien sijoittaminen oikeille paikoilleen monituotekolonni-instanssissa. Monituotekolonni esitetään konfigurointityökalussa hierarkkisena puurakenteena,

jonka solmujen kautta käyttäjä voi muokata kolonnin eri osia ja sijoittaa muuttujia. Konfigurointityökalun käyttöliittymästä on esitetty esimerkinäkymä kuvassa 18.



Kuva 18. Konfigurointityökalun käyttöliittymän esimerkinäkymä. Kolonnin rakenne esitetään pääikkunassa hierarkkisenä puurakenteena. Muuttujien tarkasteluun ja sijoitukseen käytetään taulukkomaista esitystä, josta käyttäjä näkee kyseisen muuttujan kaikki ominaisuudet.

Muuttujat valitaan selkeästä taulukkonäkymästä, josta käyttäjä näkee kaikki tietokantamuuttujan ominaisuudet. Tietokantamuuttujien parametrit on esitetty kuvassa 16. Muuttujanäkymää voidaan muokata ulkoisen Microsoft Excel -yhteensopivan tiedoston avulla ja päivittää konfigurointityökaluun lopettamatta konfigurointia tai sulkematta työkalua. Konfiguroinnin valmistuttua muuttujamäärittelyjen taulukkotiedostoa ei tarvita, sillä tiedot tietokantamuuttujista tallennetaan monituotekolonnei-instanssin mukana XML-tiedostoon.

Eräs kappaleessa 5.5 esitetyistä tärkeimmistä parannuskohteista on konfigurointityökalujen kehittäminen siten, että konfiguroija ei tarvitse erikoistietämystä kolonnilaskennan algoritmeista ja tislauksen ilmiöistä. Tähän tarpeeseen konfigurointityökaluun toteutettiin seuraavia ominaisuuksia:

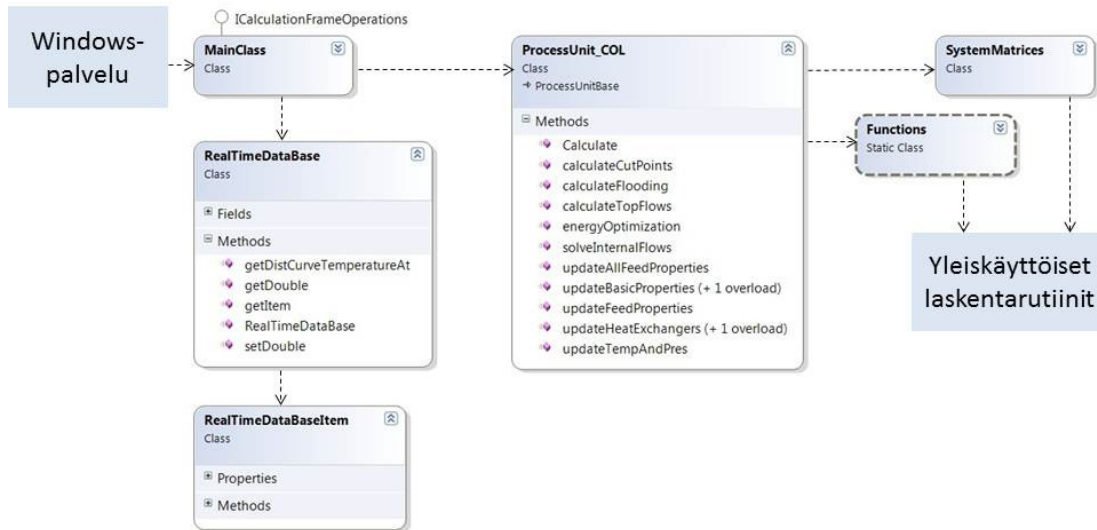
- Kolonnin tasealueet generoidaan automaattisesti (selitetty tarkemmin edellä). Taserajoja ja muita liitteen 1 taselaskennan parametreja ei siis tarvitse asettaa.
- Laskentakonfiguraation kannalta merkityksettömien muuttujien sijoittaminen on työkalussa estetty. Käyttäjän ei siten tarvitse tietää, mitä muuttujia eri laskentakonfiguraatiot tarvitsevat.
- Käyttäjän ei tarvitse muodostaa oletuksia virtausten ominaisuuksista, koska reaaliaikainen laskentaohjelmisto voi interpoloida kyseiset ominaisuudet. Jos konfiguroija kuitenkin haluaa käyttää omaan tietämykseensä perustuvia oletuksia, on niiden muodostaminen mahdollista muuttujasijoitusten avulla.
- Ohjelmisto neuvoo käyttäjää tietokantamuuttujien luonnissa ja laskennan etenemisessä kullakin käyttäjän valittavissa olevalla muuttujatyypillä (vakioarvo, mittausarvo tai laskettu arvo).
- Ohjelmisto sisältää toiminnot konfigurointivirheiden ja virheellisten tietokantatunnusten automaattiselle tarkistukselle. Toiminnot vähentävät inhimillisten virheiden mahdollisuutta konfiguroinnissa.

Näiden ominaisuuksien lisäksi graafisen työkalun etuna on, että konfigurointi ei vaadi lähdekoodin muokkausta. Työkalun käyttö säästää siten konfigurointiin kuluvaa aikaa, eikä vaadi konfiguroijalta ohjelmointiosaamista.

6.2.3 Reaaliaikainen laskentasovellus

Uudistettu laskentasovellus kehitettiin yhteensopivaksi olemassa olevan laskentakehyksen, eli laskentametodeja kutsuvan Windows-palvelun kanssa. Laskentasovelluksessa on siten rajapinnan ICalculationFrameOperations toteuttava pääluokka MainClass. Muista olemassa olevista laskennoista poiketen pääluokkaan on lisätty staattisiksi jäsenmuuttujiksi monituotekolonnia kuvaava muuttuja sekä hajautustauluperiaatteella toimiva tietokanta-avaimia ja vastaavien tietokantamuuttujien hakurakenne (RealTimeDataBase). Hakurakenteesta voidaan laskennan aikaisesti hakea tietokanta-avainta vastaava muuttujaolio, joka sisältää myös tietokantamuuttujan nykyisen hetkellisarvon. Pääluokan konstruktorissa sekä

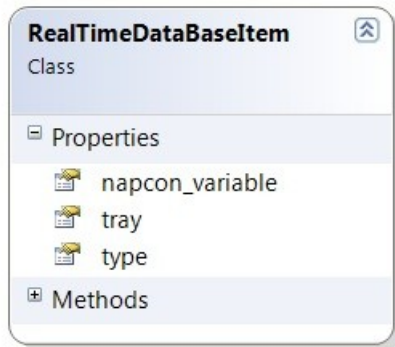
monituotekolonnia, että tietokantaa kuvaavat jäsenmuuttujat on mahdollista instantioida, kun konfiguroidun monituotekolonnin XML-tiedoston polku tiedetään. Laskentasovelluksen UML-kaavio on esitetty kuvassa 19.



Kuva 19. Uudistetun laskentasovelluksen rakenne. Windows-palvelu kommunikoi pääluokan kanssa `ICalculationFrameOperations`-rajapinnan välityksellä. Pääluokkaan on lisätty staattiset jäsenmuuttujat monituotekolonnille ja tietokantahakurakenteelle.

Tietokantamuuttujia ei säilötty XML-tiedostoon hakurakennemuodossa, koska rakenteessa hyödynnettävää hajautustaululuokkaa (luokka `Dictionary` nimiavaruudessa `System.Collections.Generic`) ei voida sellaisenaan XML-serialisoida. Kyseisen luokan käyttö on kuitenkin haun nopeuden kannalta kannattavaa, sillä hakuoperaatiot lähestyvät $O(1)$ -operaatioiden nopeutta (Microsoft, 2013b). Lisäksi laskentakehyksessä käytettävät `NapconVariable`-luokasta periytyvät instanssit eivät ole XML-serialisoitavissa, minkä vuoksi niiden konstruointiin vaaditut parametrit säilöttiin serialisointiin soveltuvassa `DataBaseltem`-luokassa. Reaaliaikaisen laskennan käyttämä tietokantamuuttujaluokka `RealTimeDataBaseltem` sisältää

jäsenmuuttujanaan vastaavan NapconVariable-luokasta periytetyn muuttujan. Reaaliaikaisen laskentasovelluksen käyttämän tietokantamuuttujaluokan parametrit on esitetty kuvassa 20.



Kuva 20. Reaaliaikaisen laskentasovelluksen käyttämä tietokantamuuttujaa kuvaava luokka RealTimeDataBaseltem. Jäsenmuuttuja napcon_variable on NapconVariable-luokasta periytetty muuttuja, joka sisältää tietokannan kanssa kommunikointiin vaaditut rajapinta- ja diagnostiikkaominaisuudet. Jäsenmuuttujat tray ja type ovat kolonnilaskennan vaatimat lisäparametrit.

RealTimeDataBaseltem-tyyppisten tietokantamuuttujien käyttö mahdollistaa laskentaohjelmiston kommunikoinnin reaaliaikaisen tietokannan kanssa NapconVariable-luokan avulla. Lisäksi laskennassa voidaan hyödyntää NapconVariable-luokan hyödyllisiä ominaisuuksia, kuten diagnostiikkatoimintoja, OPC UA -rajapintaa sekä viivästettyjen arvojen käyttöä. Diagnostiikkatoiminnot parantavat huomattavasti laskentasovelluksen vikasietoisuutta. Muuttujille voidaan esimerkiksi määrätä sallitut minimi- ja maksimirajat, joiden ulkopuolella olevia arvoja ei laskennassa sijoiteta muuttujaan. Tämänkaltaisissa virhetilanteissa tietokantamuuttujan statuskoodiin merkitään virheellinen tila ja tapahtuma kirjoitetaan laskentakehyksen tapahtumalokiin. Laskenta ei siten pysähdy tällaisissa tilanteissa, vaan sitä jatketaan sallittuja arvoja käyttäen.

Laskenta-algoritmit on toteutettu luokkien ProcessUnit_COL, SystemMatrices sekä staattisen Functions-luokan avulla. Ylimmällä tasolla erilaiset laskennat on jaettu luokan ProcessUnit_COL metodeiksi, joita kutsutaan vuorollaan aina, kun pääluokka suorittaa oman laskentametodinsa. Jaolla pyritään samankaltaiseen modulaariseen

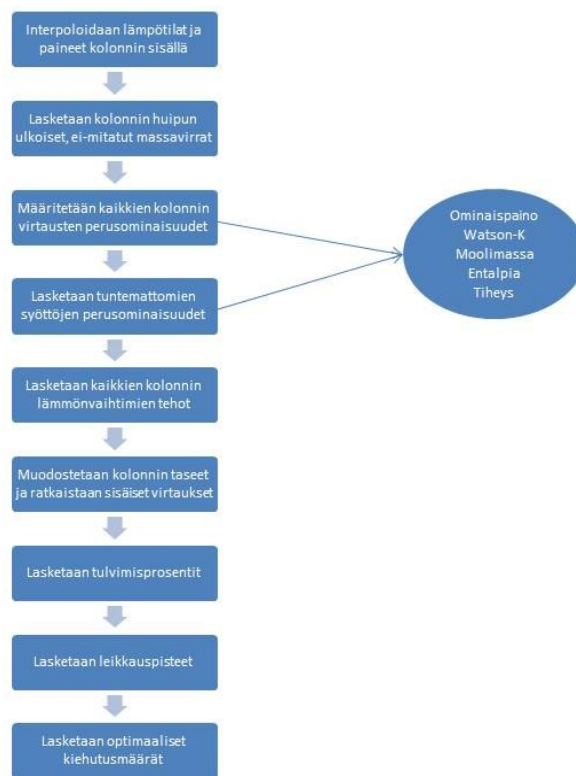
ratkaisuun kuin kolonnilaskentojen nykyisessä ohjelmistoarkkitehtuurissa (kuva 12), mutta käyttäen hyväksi kehitettyä monituotekolonnin tietomallia. Menettelyn ansiosta laskentametojeja ei tarvitse erikseen muokata kolonnin rakenteen mukaan. Yksityiskohtaisemmalla ja yleiskäyttöisemmällä tasolla käytetään Functions-luokan kautta valmiita, jo olemassa olevia FORTRAN-rutiineja. Uuden ratkaisun algoritmeissa hyödynnetään lineaarialgebran menetelmiä, mistä johtuen systeemiä kuvaamien matriisien muodostamiseen erilaisille kolonneille käytetään SystemMatrices-luokkaa. Uudistetun ratkaisun laskenta-algoritmit on kuvattu tarkemmin kappaleessa 6.3.

6.3 Uudistetun ratkaisun laskenta-algoritmit

Laskenta-algoritmeja koskeissa uudistuksissa pyrittiin ensisijaisesti helpottamaan ohjelmiston käyttöönottoa ja räätälöintiä kehittämällä algoritmit kaikkia monituotekolonnilaskentoja tukeviksi kolonnin rakenteesta ja instrumentoinnista riippumatta. Suurimmat uudistukset koskevat sisäisten virtausten ratkaisua, joka yleistettiin siten, että konfiguroijan ei tarvitse määrätä itse taserajoja ja ratkaisujärjestystä. Lisäksi ratkaisusta saadaan selville kussakin kolonnin tasealueessa olevat taseiden suhteelliset virheet. Kolonnin virtausten perusaineominaisuuksien tasolla laskenta-algoritmeja on muokattu siten, että konfiguroijan ei välttämättä tarvitse muodostaa ominaisuuksista oletuksia tietämyksensä pohjalta.

6.3.1 Kolonnilaskentojen suoritus uudistetussa ratkaisussa

Uudistetussa ratkaisussa kolonnilaskennan suorituksen modulaarisuus on pyritty säilyttämään, mistä johtuen kullekin laskentametodille on selkeästi jaettu oma tehtävänsä. Menetdit toteutettiin siten, että ne voidaan suorittaa aina samassa järjestyksessä monituotekolonnin rakenteesta riippumatta. Uudistetun kolonnilaskennan suorituksen vuokaavio on esitetty kuvassa 21.



Kuva 21. Uudistettujen kolonnilaskentojen suoritusjärjestys. Aluksi päivitetään kunkin virtauksen lämpötilat ja paineet sekä perusaineominaisuudet, minkä jälkeen muodostetaan taseet ja lasketaan kolonnilaskennan tärkeimmät tulokset.

Mitatut virtausten lämpötila- ja painearvot päivittyvät laskennan sisäiseen tietokantamuuttujien hakurakenteeseen automaattisesti laskentakehyksen toiminnan ansiosta, mutta interpoloidut arvot on laskettava erikseen joka kierroksella. Laskenta aloitetaan kolonnin sisäisten lämpötila- ja painearvojen määrittämisellä jokaisella kolonnin välipohjalla. Näitä arvoja käytetään laskennassa automaattisesti virtauksille, joilla ei erikseen ole määritetty lämpötila- ja painemittauksia tai niitä ei voida muodostaa yksinkertaisten oletusten ja muuttujamuunnosten avulla.

Lämpötilojen ja paineiden päivitysten jälkeen lasketaan kolonnin huipun mahdolliset tuntemattomat massavirtaukset yksinkertaisten taseiden avulla sekä määritetään kyseisten virtausten perusominaisuudet (ominaispaino, Watsonin

karakterisointikerroin, moolimassa, ominaisentalpia ja tiheys) huipun mitattujen virtausten perusteella. Laskennassa käytetään samoja oletuksia, kuin kolonnilaskentojen nykyisissä toteutuksissa. Huipun virtausten ominaisuuksien tunteminen on tarpeellista taseiden muodostamisen kannalta laskennan myöhemmässä vaiheessa.

Tämän jälkeen määritetään mittausten tai interpoloinnin avulla kolonnin jokaisen virtauksen (mukaan lukien sisäiset virtaukset) edellä mainitut perusominaisuudet. Ominaispaine tai tiheys voidaan määrittää ensisijaisesti mittauksen avulla, jos sellainen on saatavilla. Toissijaisesti käytetään empiiristä korrelaatiota mitatun tislaukikäyrän pisteiden suhteen. Jos tislaukikäyrästäkään ei ole mittausta saatavilla, interpoloidaan tislaukikäyrän pisteet muiden mitattujen käyrien suhteen. Tislaukikäyrän pisteiden ja ominaispainon avulla voidaan määrittää edelleen Watsonin karakterisointikerroin, moolimassa ja ominaisentalpia yhtälöiden 3, 4 ja 5 mukaisesti.

Syöttöjen tislaukikäyriä ja perusominaisuuksia ei kolonnilaskennassa aina ole mahdollista mitata reaaliaikaisesti, eikä interpolointi ole yhtä mielekäs tapa niiden määrittämiseen verraten esimerkiksi kolonnin sisäisten virtausten ominaisuuksiin. Tällöin, jos kolonnissa on vain yksi tuntemattomaksi oletettu syöttö, voidaan sen ominaispaine laskea kolonnille muodostetun tilavuustaseen ja tunnettujen tuotteiden ominaispainojen avulla:

$$SG_F = \frac{F}{\frac{DL}{SG_{DL}} + \sum_{i=1}^n \frac{SS_i}{SG_{SS_i}} + \frac{B}{SG_B}} \quad (29)$$

missä indeksi n viittaa sivu-ulosottojen lukumäärään.

Vastaavasti syötön Watsonin karakterisointikerroin voidaan määrittää kaavaa 3 hyväksikäyttäen, kun oletetaan syöttövirran keskimääräisen kiehumispisteen olevan virtausmäärien suhteen painotettu keskiarvo. Syöttövirran Watsonin karakterisointikertoimen lauseke on tällöin:

$$K_{w,F} = \frac{\left(\frac{DL}{F} (K_{w,DL} SG_{DL})^3 + \sum_{i=1}^n \frac{SS_i}{F} (K_{w,SS_i} SG_{SS_i})^3 + \frac{B}{F} (K_{w,B} SG_B)^3 \right)^{1/3}}{SG_F} \quad (30)$$

Energiataseiden muodostamiseen tarvitaan kaikkien kolonnin virtausten ominaisentalpioiden lisäksi lämmönvaihtimien, kuten huipun jäähtytyksen, pohjan kiehutuksen ja sivukiertojen tehot. Konfigurointivaiheessa teho voidaan määrittää laskettavaksi kahden minkä tahansa tunnetun hiilivety- tai höyryvirtauksen perusteella, minkä ansiosta uudistetussa laskennassa voidaan ottaa huomioon lämmönvaihtimen yhteydessä oleva instrumentointi ja mahdolliset lämpöintegraatiot.

Kun lähtötiedot energiataseiden muodostamiseen on laskettu, generoidaan kustakin monituotekolonnin tasealueesta (huippu ja pohja mukaan lukien) stationääritilan massa- ja energiataseet, joissa muuttujina ovat kolonnin sisäiset höyry- ja nestevirtaukset. Näiden ratkaisussa käytetään hyväksi myös tilavuustaseita. Taseiden muodostamista helpottaa mahdollisten kiertopalautusten molempien virtojen sisällyttäminen tasealueeseen (ks. kappale 6.2.2), jolloin kiertopalautuksesta tarvitaan laskentoihin ainoastaan lämpövirta. Lämpövirta taas voidaan laskea joko kolonnin tai lämmönsiirtonesteen puolelta, mikä parantaa konfiguroinnin joustavuutta. Taseiden muodostamisen algoritmi on kuvattu tarkemmin kappaleessa 6.3.2 ja ratkaisualgoritmi kappaleessa 6.3.3. Taselaskennan tuloksena saadaan sisäisten virtausten lisäksi tietokantaan kirjoitettavat prosentuaaliset massa- ja energiataseiden virheet kussakin tasealueessa sekä höyryn kastepistelämpötila. Tämän jälkeen tulvimisprosentit, leikkauspisteet ja optimaalinen höyryvirtauksen määrä voidaan laskea kullekin konfiguroijan määrittämälle tasealueelle. Tulvimisprosenttien ja leikkauspisteiden laskentaan käytetään empiirisiä korrelaatioita ja energiakäytön optimointi suoritetaan kappaleessa 2.3.6 kuvatulla Shinskeyn (1977) algoritmilla tasealueittain.

6.3.2 Kolonnin taseiden muodostaminen

Laskentaohjelmistossa voidaan monituotekolonnin kuvaavat taseet muodostaa automaattisesti konfiguroinnin lähtötietojen pohjalta. Konfigurointityökalu jakaa

kolonnin automaattisesti tasealueisiin pseudobinäärisen tislauksen laskennan mukaisesti (selostettu kappaleessa 6.2.2) sekä luo tasealueisiin kuuluvat virtaukset ja lämmönsiirtimet. Konfiguroijan sijoitettua näihin kuuluvat tietokantapositionit paikalleen voidaan taseet muodostaa kolonnin rakenteesta riippumatta.

Laskentaohjelmistossa monituotekolonnia kuvaavat massa- ja energiataseet käsitellään lineaarisena systeeminä:

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \quad (31)$$

missä \mathbf{A} on $m \times n$ -kerroinmatriisi, \mathbf{x} on tuntemattomien virtausten n -vektori ja \mathbf{b} tunnettujen massa- ja lämpövirtojen summien m -vektori. Tuntemattomien sisäisten virtausten lukumäärä on n ja taseiden lukumäärä m .

Tilavuustaseet käsitellään myös lineaarisena systeeminä, mutta niissä tuntemattomien muuttujien vektorina ovat sisäisten massavirtojen sijaan sisäiset höyryvirtaukset tilavuusvirtoina. Sisäisten virtausten ratkaisu on esitetty tarkemmin kappaleessa 6.3.3.

Konfigurointityökalun muodostamien tasealueiden perusteella kolonnille voidaan muodostaa massa- ja energiataseita yhteensä aina kaksi enemmän, kuin kolonnissa on tuntemattomia sisäisiä virtauksia. Esimerkiksi monituotekolonnille, jossa on neljä tuotevirtaa (ja siten neljä tuntematonta sisäistä virtausta ja kolme tasealuetta), muodostetaan kuusi tasetta seuraavasti:

$$\begin{bmatrix} -1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \\ -h_{L_1} & h_{V_1} & 0 & 0 \\ h_{L_1} & -h_{V_1} & -h_{L_2} & h_{V_2} \\ 0 & 0 & h_{L_2} & -h_{V_2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} L_1 \\ V_1 \\ L_2 \\ V_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum \dot{m}_1 \\ \sum \dot{m}_2 \\ \sum \dot{m}_3 \\ \sum \dot{Q}_1 \\ \sum \dot{Q}_2 \\ \sum \dot{Q}_3 \end{bmatrix} \quad (32)$$

missä \dot{m} viittaa tunnettuun massavirtaukseen ja \dot{Q} tunnettuun lämpövirtaukseen. Numeroindeksit viittaavat tasealueen järjestyslukuun kolonnin huipusta aloittaen. Tunnettujen massa- ja lämpövirtojen suunnat tasealueeseen nähden otetaan summauksessa huomioon etumerkillä.

Tämän lisäksi laskentaohjelmisto muodostaa automaattisesti yhtälöt kolonnin huipulle ja pohjalle tehden oletuksia niiden nestevirtauksista. Näin laskennassa pystytään erottelamaan sisäisten neste- ja höyryvirtausten vaikutus massa- ja energiataseisiin sen lisäksi, että taseet täsmätään mahdollisimman hyvin. Kolonnin huipun tasealueesta poistuvalla nestevirtauksella oletetaan:

$$L_1 = L_R + L_{R,cond} + \sum L_{k,1} + \sum F_1 x_{L,1} - SS_1 \quad (33)$$

missä L_1 on huipun tasealueesta poistuva nestevirta, L_R on kolonnin huipun palautusvirta, $L_{R,cond}$ palautusvirran kondensoima nestevirta kolonnin huipussa, $\sum L_{k,1}$ huipun tasealueen kiertopalautusvirtojen summa sekä $\sum F_1 x_L$ huipun tasealueeseen tulevien syöttöjen nesteosuusien summa. F_1 merkitsee syötön kokonaisvirtausta ja $x_{L,1}$ nestefaasin massaosuutta.

Alkuperäisessä laskennassa palautusvirran kondensoima nestemäärä oletettiin vakioksi. Palautusvirran ja kolonnin huipun lämpötilat ja ominaisuudet kuitenkin muuttuvat ajan suhteen, mistä johtuen laskennan dynamiikan parantamiseksi uudistetussa ratkaisussa kondensoitu nestemäärä lasketaan näiden virtausten ominaisuuksien perusteella. Palautusvirran kondensoima nestemäärä huipussa lasketaan olettaen, että palautusvirta kuumenee kolonnin huipun lämpötilaan. Kuumenemista vastaava energiamäärä kuluu siten höyryn lauhtumiseen, eli lauhtunut nestemäärä voidaan laskea:

$$L_{R,cond} = \frac{\Delta Q_R}{H_{V,OH}} \quad (34)$$

missä ΔQ_R kuvaa palautusvirran kuumenemisen energiamuutosta ja $H_{V,OH}$ lauhtuvan ylimenokaasun höyrystymisentalpiaa.

Kolonnin pohjan tasealueeseen tulevalle nestevirralle oletetaan:

$$L_i = B - L_{i-1} - \sum L_{k,i} - \sum F_i x_{L,i} \quad (35)$$

missä B on kolonnin pohjatuotteen massavirta.

Tilavuustaseita voidaan monituotekolonnille muodostaa yksi kullekin tasealueelle, eli aina yksi enemmän, kuin kolonnissa on tuntemattomia sisäisiä höyryvirtauksia.

Edellä mainitulle esimerkkikolonnille tilavuustaseet voidaan esittää seuraavasti:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 1 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_{vol,1} \\ V_{vol,2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum \dot{V}_1 \\ \sum \dot{V}_2 \\ \sum \dot{V}_3 \end{bmatrix} \quad (36)$$

missä \dot{V} viittaa tunnettuun tilavuusvirtaukseen.

Tilavuustaseita käytetään massavirtausten ratkaisun sijaan hiilivetyjen ominaispainojen laskentaan höyryfaasissa. Tämän vuoksi niitä ei liitetä massa- ja energiataseiden ryhmään. Taseiden ratkaiseminen on esitetty tarkemmin kappaleessa 6.3.3.

6.3.3 Sisäisten virtausten ratkaiseminen

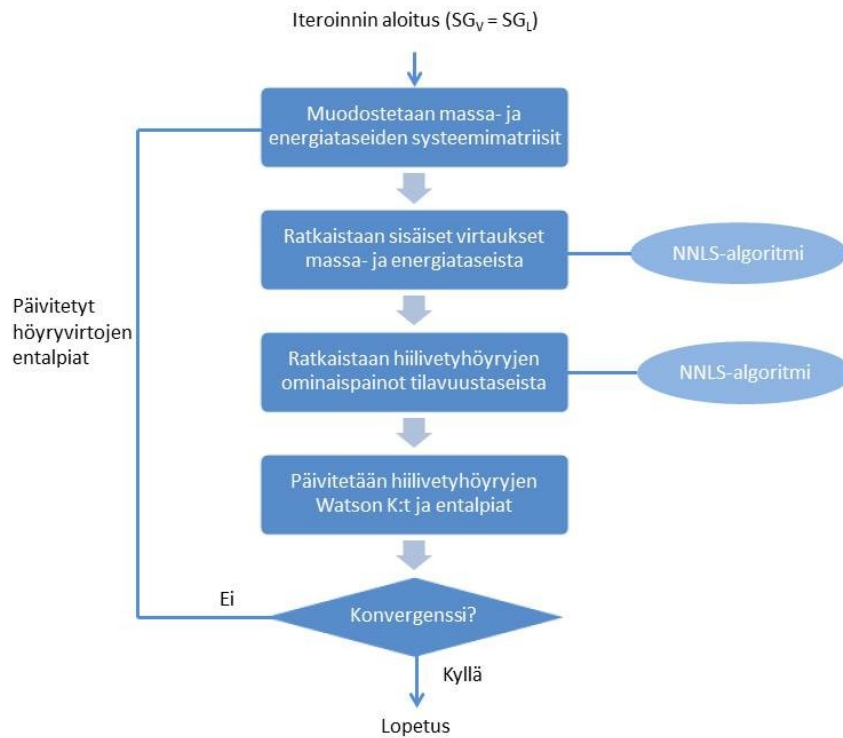
Pseudobinäärisen tislauksen laskusääntöjen mukaan tasealueisiin jaetulle monituotekolonnille voidaan aina muodostaa massa- ja energiataseita enemmän kuin kolonnissa on tuntemattomia sisäisiä virtauksia. Kolonni voidaan mallintaa siten ylimäärätyinä lineaarisena systeeminä. Lisäksi entalpioiden ennustusepätkäryöstä johtuen taseet ovat keskenään lineaarisesti riippumattomia, jolloin systeemille ei voida määrittää eksaktia ratkaisua. Sisäisille virtauksille on siten mielekästä esittää approksimatiivinen ratkaisu käyttäen hyväksi kaikkia kolonnille muodostettuja taseita ja minimoiden taseiden virheiden neliösumman. Rajoituksena ratkaisulle on, että sisäisten virtausten on oltava ei-negatiivisia ollakseen fysikaalisesti mahdollisia. Ongelma voidaan siten esittää muodossa:

$$\min \| \mathbf{Ax} - \mathbf{b} \| \quad (37)$$

$$\mathbf{x} \geq \mathbf{0} \quad (38)$$

Lawson ja Hanson (1974) esittivät ongelmalle äärellisessä ajassa suppenevan ratkaisualgoritmin, jota kutsutaan NNLS-algoritmiksi (engl. Non-Negative Least Squares). Algoritmi on esitetty liitteessä 3.

Myös pelkkien tilavuustaseiden avulla mallinnettu monituotekolonne on aina ylimäärätty lineaarinen systeemi, kun tuntemattomina muuttujina ovat sisäisten hiilivetyvirtausten ominaispainot. Ominaispainojen ollessa ei-negatiivisina fysikaalisesti mahdollisia, voidaan niidenkin ratkaisuun käyttää NNLS-algoritmia. Muutokset hiilivetyhöyryjen ominaispainoissa aiheuttavat muutoksen myös niiden ominaisentalpioissa (ja siten kolonnin energiataseissa), joten alkuperäinen massa- ja energiataseilla mallinnettu systeemi ja sen ratkaisu muuttuvat käytettäessä eri ominaispainoja hiilivetyhöyryille. Sisäisten virtausten ratkaisu toteutetaan siten alkuperäistä sisäisten virtauksien ratkaisualgoritmia (esitetty kuvassa 9) mukailevana iteraationa, jonka vuokaavio on esitetty kuvassa 22.



Kuva 22. Sisäisten virtausten ratkaiseminen NNLS-algoritmia hyödyntäen. Sisäisten hiilivetyhöyryjen entalpiat päivitetään tilavuustaseiden ratkaisun perusteella, jolloin massa- ja energiataseiden systeemi muuttuu.

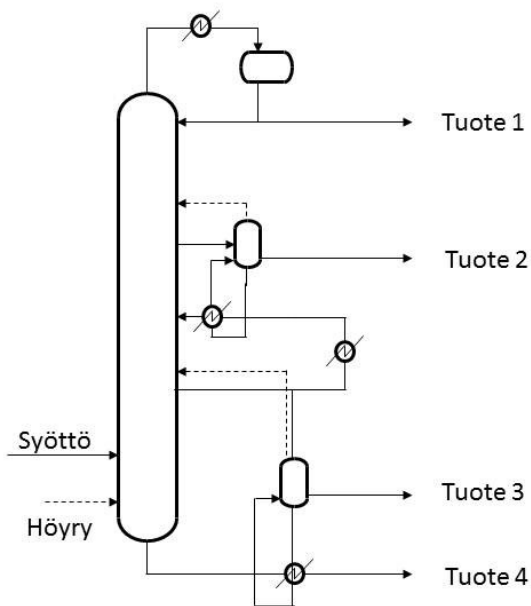
NAPCON Indicatorissa hiilivetyseosten entalpian estimoinnin lauseke on epälineaarinen ominaispainon suhteen, minkä vuoksi iteroinnin toteutuksessa kiinnitettiin erityistä huomiota numeeriseen stabiiliuteen. Iteroinnin stabiiliutta voidaan parantaa käyttämällä suodatusta sisäisten hiilivetyhöyryvirtausten ominaispainojen päivityksessä. Tällöin kuitenkin laskennan avulla saavutettava ratkaisu muuttuu. Kappaleessa 7.4 on numeerista stabiiliutta testattu eri suodatusparametrien avulla.

7 Uudistetun laskentasovelluksen ja algoritmien testaus

Uudistettuihin kolonnilaskentoihin tehtiin laskenta-algoritmimuutoksia (esitetty kappaleessa 6.3) laskentojen helpomman konfiguroitavuuden saavuttamiseksi. Suurimmat algoritmimuutokset koskevat taselaskentaa ja sisäisten virtausten ratkaisua taseiden avulla. Reaaliaikainen laskentasovellus toteutettiin siten siltä osin, kuin algoritmiuudistusten testaus vaatii, eli sisäisten virtausten ratkaisuun asti kuvan 21 mukaisessa laskentasuoritusta kuvaavassa vuokaaviossa. Testaukseen sisällytettiin laskettujen sisäisten virtausten vertailu stationääritilan simulaattorin (Aspen Technologyn Aspen Plus) sekä Neste Jacobsin dynaamisen ProsDS-simulaattorin avulla saatuihin tuloksiin erästä vetykrakkausprosessin monituotekolonnin simuloiden. Lisäksi laskennan herkkyyttä tietokannassa säilöttävien mittaus- ja vakioarvojen suhteen testattiin herkkyyksianalyysillä.

7.1 Testiprosessin kuvaus

Testikolonnina käytettiin erään vetykrakkausprosessin loppuvaiheessa olevaa monituotetislauskolonnin simulaatiomallia. Kolonnin yksinkertaistettu virtauskaavio on esitetty kuvassa 23.



Kuva 23. Testikolonnin yksinkertaistettu virtauskaavio. Kolonnin syöttö jaetaan neljäksi tuotevirraksi. Kolonnissa on kaksi sivustripperää ja kiertopalautus ja sen rakenne on lämpöintegraatioiden osalta monimutkainen.

Testikolonneihin syötetään osittain höyryfaasissa olevaa hiilivetyseosta erotuspohjalle 32 (huipusta aloittaen) sekä vesihöyryä kolonnin pohjalta. Tislet otetaan ulos kokonaan nesteinä kolonnin huipulta ja osa tisetuotteesta palautetaan kolonneihin. Kaksi keskimmäistä tuotevirtaa otetaan ulos välipohjilta 11 ja 22 ja syötetään sivustrippereihin, joissa molemmissa on kiehuittimet. Strippereiden ylimenokaasut palautetaan kolonneihin erotuspohjille 10 ja 19. Lisäksi tuotteen 3 (ks. kuva 23) ulosottopohjalta 22 otetaan ulos kokonaan nestemäinen, lauhdutettava kiertopalautusvirta, joka palautetaan pohjalle 19. Kiertopalautuksen lauhdutus on osittain lämpöintegroitu sitä ylemmän sivustripperin kiehuittimen kanssa. Alemman sivustripperin kiehuutin on lämpöintegroitu kolonnin pohjatuotevirran jäähdytyksen kanssa.

Lähtötietojen ja instrumentaation osalta kolonnin tuotevirtausten tislaukkyrat oletetaan vakioiksi. Syoton tislaukkyra oletetaan tuntemattomaksi ja hoyryfaasin osuus tunnetuksi vakioiksi. Muut ominaisuudet lasketaan reaaliaikaisesti tuotetietojen perusteella. Kolonnin ulkoisista virtauksista oletetaan olevan saatavilla virtaus- ja lampotilamittaukset. Kolonnin sisaisia lampotilamittauksia on viidessa ja painemittauksia kolmessa pisteessa. Sisaisista virtauksista ei oleteta olevan ennakkotietoa, joten niiden ominaisuudet interpoloidaan reaaliaikaisesti tuotetietojen perusteella. Sivu-ulosottojen erotuspohjien perusteella kolonnilaskennoissa tuotetaan seuraavat sisaiset virtaukset:

- Nestevirta pohjalta 10
- Nestevirta pohjalta 11
- Hoyryvirta pohjalle 11
- Nestevirta pohjalle 21
- Nestevirta pohjalle 22
- Hoyryvirta pohjalle 22

7.2 Testiymparistojen kuvaus

Stationaaritilan testauksen referenssiymparistona kaytettiin Aspen Technologyn Aspen Plus -simulaattoriohjelmistoa. Ohjelmisto on yhdistetty simulointi- ja optimointiohjelmisto, joka tukee sekä yhtalopohjaista, että perakkaisiin modulaarisiin prosessiyksikkomalleihin perustuvaa simulointia. Laskennan dynamiikan testaukseen puolestaan kaytettiin Neste Jacobs Oy:n ProsDS-prosessisimulaattoriohjelmistoa. ProsDS on dynaaminen, perakkaisiin modulaarisiin prosessiyksikkomalleihin perustuva simulaattoriohjelmisto.

Kumpikin kaytetyista testisimulaattoreista sisaltaa kattavat yksikkooperaatiomallit ja aineominaisuuskirjastot kaytettavaksi prosessiteollisuuden eri osa-alueilla. Tislaukolonnit on simulaattoreissa mallinnettu tarkkoina, kutakin kolonnin erotuspohjaa mallintavina vaiheina. Kunkin erotuspohjan malli sisaltaa muun muassa siihen liittyvat sisaiset neste- ja hoyryvirtaukset.

Testausta varten kappaleessa 7.1 kuvatusta testikolonnista luotiin työssä toteutetun konfigurointityökalun avulla kolonnia kuvaava XML-tiedosto. Luotu XML-tiedosto deserialisoitiin työssä toteutetun reaaliaikaisen laskentaohjelmiston avulla ja laskennat suoritettiin sekä stationääritilan testidatalle (suunnitteluarvot Aspen Plus -simulaattorissa) sekä ProsDS:n avulla tuotetulle aikasarjadataalle. Laskentojen suoritus aika todettiin reaaliaikaiseen käyttöön erinomaisesti sopivaksi. Yhden laskentakierroksen suoritus kesti keskimäärin 7 ms, kun laskenta suoritettiin sisäisten virtausten ratkaisuun asti (ks. kuva 21). Testitietokoneen prosessori oli nelilytiminen Intel Core i7-3720QM 2,60 GHz laskentataajuudella.

7.3 Tulokset

Uudistetun taselaskenta-algoritmin toimivuus todennettiin testikolonnin tapauksessa vertaamalla laskennan tuottamia sisäisten virtausten arvoja tarkkojen prosessisimulaattorien (Aspen Plus ja ProsDS) tuottamiin arvoihin. Stationääritilan virtauksia verrattiin Aspen Plus -ohjelmiston avulla simuloituihin virtauksiin ja laskennan dynaaminen käyttäytyminen verifioitiin ProsDS:n simuloituihin virtauksiin verraten. Lisäksi laskennan numeerista herkkyyttä mittaus- ja vakioarvojen suhteen arvioitiin herkkyyksianalyysillä.

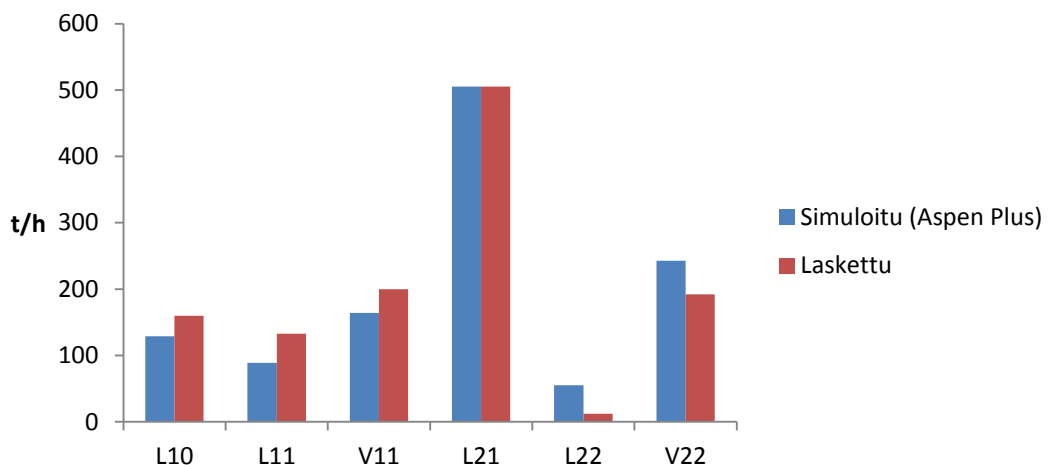
7.3.1 Taselaskennan testaus stationääritilassa

Sisäisten virtausten ratkaisualgoritmi testattiin kappaleessa 7.1 kuvatulla testikolonnilla stationääritilassa vertaamalla tunnetun, suunnitteluarvoihin perustuvan tasapainopisteen laskettuja sisäisiä virtauksia kaupallisen Aspen Plus -simulaattorin vastaaviin sisäisiin virtauksiin. Stationääritilan laskenta- ja simulointitulokset sekä niiden keskinäiset poikkeamat on esitetty taulukossa 2.

Taulukko 2. Sisäisten virtausten ratkaisualgoritmin testaus stationääritilassa. Parhaiten tulokset täsmäävät Aspen Plus -simulaattorin kanssa pohjalta 21 poistuvalla nesteelle, heikoiten välipohjalta 22 poistuvalla nesteelle ja saapuvalle höyrylle.

	L ₁₀	L ₁₁	V ₁₁	L ₂₁	L ₂₂	V ₂₂
Simuloitu (t/h), aspenOne	129	89	164	505	55	243
Laskettu (t/h)	160	133	200	505	12	192
Poikkeama (t/h)	31	44	36	0	43	51
Poikkeama (%)	19.4	33.1	18.0	0.0	78.2	21.0

Taulukon 2 vertailusta voidaan todeta, että laskennan stationääritilan ennustetarkkuus vaihtelee Aspen Plus -simulaattoriin verraten. Välipohjalta 21 poistuvan nesteen massavirrat täsmäävät täysin, mutta välipohjalta 22 poistuvan nesteen ennusteessa on huomattavan suuri suhteellinen poikkeama Aspen Plus -tuloksiin verraten. Toisaalta tonnimääräisesti suurin poikkeama on pohjalle 22 tulevalle höyrylle. Ratkaistujen sisäisten virtausten keskinäisten suhteiden vertailu on visualisoitu kuvassa 24.



Kuva 24. Laskettujen stationääritilan sisäisten virtausten vertailu Aspen Plus -simulaattorin tuloksiin.

Kuvan 24 perusteella huomataan stationääritilan sisäisten virtausten keskinäisten suhteiden täsmäävän erittäin hyvin reaaliaikaisen laskentaohjelmiston ja Aspen Plus -simulaattorin välillä huolimatta välipohjalta 22 poistuvan nesteen suuresta suhteellisesta poikkeamasta. Reaaliaikaisen laskentaohjelmiston määrittämällä sisäisillä virtauksilla massa- ja energiataseet täsmäävät, joten ratkaisualgoritmin voidaan todeta toimivan oikein ja poikkeamien Aspen Plus -simulaattorin tuloksiin nähden johtuvan ennustetarkkuudesta. Ennustetarkkuutta huonontavat puutteelliset lähtötiedot (kuten syötön koostumuksen oletaminen tuntemattomaksi), instrumentaatiopuutteet, aineominaisuuskorrelaatioiden käytöstä aiheutuvat virheet sekä eri faasien käsittely massa- energia- ja tilavuustaseissa.

Stationääritilan simulointitulosten perusteella voidaan todeta reaaliaikaisen laskentaohjelmiston laskemien sisäisten virtausten keskinäisten suhteiden olevan riittävän tarkkoja monituotekolonnin säädön ja operoinnin tarpeisiin. Stationääritilan ennusteita voidaan muokata lisäämällä laskettuihin sisäisten virtausten arvoihin ennalta määritetyt vakioarvot, eli toisin sanoen mallin kalibroinnilla. Jotta kalibroitartpeesta voitaisiin luopua, olisi laskennan ilmiömallinnusta kehitettävä. Ilmiömallinnuksen kehittäminen ei kuitenkaan sisälly tämän diplomityön rajaukseen.

7.3.2 Taselaskennan dynamiikan testaus

Laskennan dynamiikan testaamiseksi kappaleessa 7.1 kuvattua testikolonnin simuloitiin dynaamisella ProsDS-simulaattorilla 13,9 tunnin ajan 2 sekunnin askelpituudella. Kolonnin huipun lämpötilan asetusarvoa muutettiin simulaatiojakson aikana kahdesti. Aluksi lämpötilan asetusarvoa laskettiin 2 °C ja sisäisten virtausten annettiin saavuttaa stationääritila. Sen jälkeen asetusarvoa nostettiin 3 °C ja sisäisten virtausten annettiin jälleen asettua stationääritilaan. Testikolonnissa huipun lämpötilaa säädetään kaskadisäädöllä kolonnin

palautusvirtaa muuttamalla, joten huipun lämpötilan muuttaminen vaikuttaa kaikkiin kolonnin sisäisiin virtauksiin.

Dynamiikkojen vertailussa tarkasteltiin sisäisten virtausten tuloksia aikasarjana. Simuloidut ja laskennan avulla tuotetut sisäiset virtaukset koko simulaatiojaksolta on esitetty liitteessä 4 sekä käsittelemättöminä, että keskistettynä. Aikasarjojen keskittäminen tehtiin, jotta dynamiikkojen vertailu on mahdollista kalibroimattomalle laskentamallille. Aikasarjojen perusteella voidaan todeta uudistetun laskennan ja ProsDS:n avulla määritettyjen sisäisten virtausten dynamiikkojen olevan keskenään samankaltaisia.

Dynamiikkoja vertailtiin visuaalisen arvioinnin lisäksi laskemalla Pearsonin korrelaatiokerroimet sekä RMSE (engl. Root Mean Squared Error) -arvot keskistettyjä ProsDS-simulaatioarvoja ja laskentatuloksia käyttäen. Tulokset on esitetty taulukossa 3. Parhaiten dynamiikat täsmäävät kolonnin huipun tasealueen sisäisille virtauksille (neste välipohjalle 10, neste välipohjalle 11 ja höyry välipohjalle 11). Heikoiten dynamiikat täsmäävät välipohjalle 22 tulevalle höyrylle.

Taulukko 3. Laskennan dynaamisen testauksen tunnusluvut kullekin sisäiselle virtaukselle. Sisäiset virtaukset täsmäävät ProsDS-simulaattorin tulosten kanssa paremmin kolonnin huipun, kuin pohjan tasealueissa.

	Pearsonin korrelaatiokerroin	RMSE (t/h)
Neste pohjalle 10	0,998	0,221
Neste pohjalle 11	0,998	1,14
Höyry pohjalle 11	0,982	1,21
Neste pohjalle 21	0,921	2,59
Neste pohjalle 22	0,924	1,61
Höyry pohjalle 22	0,455	2,29

Kappaleessa 6.3.2 esitettiin neste- ja höyryvirtausten erottelemista varten kolonnin huipulle ja pohjalle automaattisesti muodostettavat yhtälöt, joiden normalisoidut virheet minimoimalla sisäiset virtaukset ratkaistaan. Näihin yhtälöihin kuuluu tavanomaisten massa- ja energiataseiden lisäksi määrittelyt kolonnin huipun ja pohjan sisäisistä nestevirtauksista (yhtälöt 33, 34 ja 35). Määrittelyjä ei ole Neste Jacobsilla käytetty alkuperäisissä kolonnilaskennoissa, joten niiden vaikutus sisäisten virtausten dynamiikkaan testattiin erikseen ProsDS-simuloinnilla. Laskentatulosten vertailu ProsDS-simulaatioon ilman yhtälöitä 33, 34 ja 35 on esitetty taulukossa 4.

Taulukko 4. Laskennan dynaamisen testauksen tunnusluvut kullekin sisäiselle virtaukselle ilman lisämäärittelyjä nestevirtauksille kolonnin huipussa ja pohjassa. Laskennan ja ProsDS-simuloinnin tulokset täsmäävät huomattavasti huonommin ilman lisämäärittelyjä.

	Pearsonin korrelaatiokerroin	RMSE (t/h)
Neste pohjalle 10	0,996	0,975
Neste pohjalle 11	0,995	0,337
Höyry pohjalle 11	0,998	0,248
Neste pohjalle 21	-0,659	4,89
Neste pohjalle 22	-0,869	5,51
Höyry pohjalle 22	-0,913	6,30

Taulukosta 4 nähdään erityisesti, että kolonnin pohjalla sisäisten virtausten dynamiikka on käännteinen ProsDS:n dynamiikkaan verraten (negatiiviset korrelaatiokertoimet), joten kappaleessa 6.3.2 esitetyt lisämäärittelyt

nestevirtauksille ovat välttämättömiä ja ennusteiden dynaamista käyttäytymistä huomattavasti parantavia.

Tulosten perusteella voidaan uudistetun laskennan algoritmien toiminta todeta oikeiksi. Mallin kalibroinnin avulla sisäisten virtausten ennusteista saadaan erittäin tarkkoja dynaamisen ProsDS-simulaattorin tuloksiin verraten. Kolonnin huipun tasealueen virtausten dynamiikka todettiin pohjan tasealueen dynamiikkaa tarkemmaksi. On siis mahdollista, että tarkemmalla höyry- ja nestevirtausten osuuden mallinnuksella myös pohjan tasealueen virtauksista saataisiin tarkempi ennuste. Kaikkien laskettujen testikolonnin sisäisten virtausten keskimääräinen poikkeama ProsDS-simulaatiotuloksista on kuitenkin koko 13,9 tunnin simulaatiojaksolla alle 3 t/h, mikä on reaaliaikaisiin sovelluksiin riittävä tarkkuus. Dynaamisen käyttäytymisen puolesta voidaan laskentaohjelmisto todeta soveltuvaksi monituotekolonnin säädön ja operoinnin tarpeisiin.

7.3.3 Numeerisen herkkyyden testaus

Laskennan numeerista herkkyyttä tarkasteltiin suorittamalla osittaisherkkyysanalyysi kaikkien tietokannassa säilöttävien mittaus- ja vakioarvojen suhteen. Osittaisherkkyysanalyysissä laskettiin numeeriset osittaisderivaatat kullekin testikolonnin sisäiselle virtaukselle tunnetun tasapainopisteen ympäristössä muuttaen aina yhtä muuttujaa kerrallaan. Tämän lisäksi testattiin laskennan konvergenssia sijoittamalla laskennan alkaessa vuoron perään kullekin mittaus- ja vakioarvolle konfiguroinnissa määritetyt minimi- ja maksimiarvot.

Osittaisderivaatat approksimoitiin lineaarisella kahden pisteen menetelmällä tasapainopisteen ympäristössä:

$$\frac{\partial f}{\partial x}(x_0) \cong \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h} \quad (39)$$

missä f merkitsee tarkasteltavaa funktiota, x muuttujaa, josta funktio f riippuu, x_0 kyseisen muuttujan arvoa tasapainopisteessä ja h kyseisen muuttujan poikkeamaa

tasapainopisteestä. Poikkeaman ollessa hyvin pieni lähestyy lausekkeen 39 arvo funktion f osittaisderivaatan arvoa x :n suhteen pisteessä x_0 .

Poikkeaman h arvo valittiin kullekin muuttujalle suhteessa muuttujan arvoon tasapainopisteessä. Lasketut osittaisderivaatat on esitetty taulukossa 5 viidelle muuttujalle, joiden suhteen sisäisten virtausten osittaisderivaattojen itseisarvot ovat testikolonnilaskennoissa suurimmat.

Taulukko 5. Herkkyyksianalyysissa määritetyt osittaisderivaatat sisäisille virtauksille viiden herkkimmän muuttujan suhteen. Laskennan tulokset ovat testikolonnissa selvästi herkimpiä syötön höyryfaasin massaosuuden suhteen.

x	$\frac{\partial L_{10}}{\partial x}$	$\frac{\partial L_{11}}{\partial x}$	$\frac{\partial V_{11}}{\partial x}$	$\frac{\partial L_{21}}{\partial x}$	$\frac{\partial L_{22}}{\partial x}$	$\frac{\partial V_{22}}{\partial x}$
Höyryfaasin massaosuus syötössä	7.64	7.64	8.95	328	328	307
Taselaskennan iteroinnin suodatuskerroin	-2.57	-2.38	1.76	-0.920	-0.943	24.6
Huipun palautuksen massavirta	1.42	1.42	1.34	0.004	0.004	0.047
Pohjatuotteen massavirta	0.160	0.161	0.067	1.03	1.03	0.697
Huipun lämpötila	0.926	0.925	0.957	0.002	0.002	0.087

Taulukossa 5 esitettyjen tulosten perusteella voidaan todeta syötön höyryfaasin massaosuuden vaikuttavan voimakkaasti erityisesti kyseisen syötön tasealueen sisäisiin virtauksiin. Höyryfaasin massaosuus vaikuttaa pohjan nestevirtauksen määrittelyyn (kaava 37) lisäksi kolonnin pohjan sisäisten virtausten entalpioihin. Taselaskennan iteroinnin suodatuskertoimella tarkoitetaan ensimmäisen asteen suodattimen suodatusparametria kuvan 22 mukaisessa sisäisten virtausten ratkaisussa, jossa höyryvirtojen ominaispainoa tarkennetaan tilavuustaseita hyväksikäyttäen. Suodatusparametrin vaikutus tuloksiin on voimakas, sillä laskennassa käytetty höyryvirtauksen entalpian estimoinnin lauseke on epälineaarinen ominaispainon suhteen. Näiden jälkeen merkittävimmät muuttujat herkkyyksianalyyssissa ovat kolonnin ulkoisten virtojen massavirtaus- ja lämpötilamittauksia.

Osittaisderivaattojen lisäksi mittaus- ja vakioarvomuuuttujille tehtiin analyysi, jossa muuttujien arvoiksi sijoitettiin yksi kerrallaan niiden sallitut minimi- ja maksimiarvot pidettäessä muut muuttujat vakioina. Rajat määritettiin kolonnilaskentojen konfigurointivaiheessa prosessitietämyksen perusteella seuraavin säännöin:

- Lämpötila-arvot ovat välillä 1–1000 °C
- TBP-käyrien lämpötilapisteet ovat välillä 1–1000 °C
- Paine-arvot ovat välillä 1–1000 kPa
- Virtaukset ovat välillä 1–1000 t/h
- Suodatuskertoimet ovat välillä 0,0–1,0
- Eri faasien massaosuudet ovat välillä 0,0–1,0

Reaaliaikainen laskentaohjelmisto suoritti kussakin testitapauksessa laskennan tarkoituksenmukaisesti loppuun ja konvergoi kaikissa tapauksissa tasapainotilaan. Numeeriset virheet on estetty pääosin nollajaon estolla ja tietokantamuuttujien rajoituksilla. Kaikki tietokantamuuttujien aktiiviset rajoitukset kunkin mittaus- ja vakioarvomuuuttujan manipuloinnin jälkeen on esitetty liitteessä 5. Eniten aktiivisia rajoituksia tietokannassa aiheutui syöttövirtauksen, tislevirtauksen ja pohjatuotevirtauksen manipuloinnista minimi- ja maksimiarvoihinsa.

Testikolonnin laskentojen herkkyyssanalyysin perusteella laskenta toimii luotettavasti sekä normaalissa operointipisteessä että normaalista operointipisteestä poikkeavissa olosuhteissa. Virheelliset mittaukset tai fysikaalisesti mahdottomat arvot eivät siten vaadi laskennan pysäyttämistä tai muita tuotantoa häiritseviä toimenpiteitä. Lisäksi laskenta konvergoi tasapainopisteeseen kaikissa testitapauksissa. Testikolonnin sisäisten virtausten laskennan virityksessä konfiguroija pystyy parhaiten vaikuttamaan laskentatuloksiin syötön höyryfaasin massaosuutta sekä iteroinnin suodatusvakiota muuttamalla.

7.4 Uudistetun ratkaisun hyödyt

NAPCON Indicatorin uudistettu arkkitehtuuri, algoritmimuutokset ja menetelmäkehitys tuovat monia hyötyjä sekä räätälöinnin- että käytönaikaisesti. Räätälöinnin kannalta työn tuomat suurimmat hyödyt ovat:

- Räätälöinti vaatii vähemmän monituotetislauksen ilmiötietämystä.
- Räätälöinti ei vaadi tietämystä laskentaohjelmiston algoritmeista.
- Lähdekoodin muokkausta ei vaadita (inhimillisten virheiden mahdollisuus pienenee).
- Monimutkaisten kolonnilaskentojen konfigurointiin vaadittava aika lyhenee.
- Ohjelmisto pystyy käsittelemään kolonneja, joiden rakenne on monimutkainen (sisältäen esimerkiksi lämpöintegraatioita, sivustrippereitä ja kierrätysvirtoja).

Ohjelmiston käytönaikaisesti puolestaan suurimmat hyödyt ovat:

- Tietokantamuuttujan poistaminen ei pysäytä tai kaada laskentaa.
- Fysikaalisesti mahdoton mittaus ei pysäytä tai kaada laskentaa, jos mittausarvon rajoitukset on konfiguroitu oikein.
- Ohjelmisto tuottaa taselaskennasta mielekästä lisätietoa (taseiden virheet).
- Ohjelmisto pystyy reaaliaikaisesti estimoimaan tuntemattoman syöttövirtauksen ominaisuuksia.

- Ohjelmisto tuottaa testatusti tarkkoja dynaamisia ennusteita kolonnin sisäisistä virtauksista minimoiden kolonnin taseiden virheisiin perustuvan kustannusfunktion.

Lisäksi uudistettu ohjelmisto toimii modernissa .NET-ympäristössä kommunikoiden Neste Jacobsin reaaliaikaisen OPC UA -tietokannan kanssa laskentakehyksen välityksellä.

8 Yhteenveto

Työn tavoitteena oli suunnitella Neste Jacobs Oy:n reaaliaikaiselle NAPCON Indicator -tislaukolonnilaskentaohjelmistolle uudistettu arkkitehtuuri, joka mahdollistaa helpomman ja nopeamman ohjelmiston konfiguroinnin lähdekoodia muokkaamatta. Lisäksi uudistetun arkkitehtuurin tavoitteena oli yleistää reaaliaikaiset laskennat erilaisille, toisistaan huomattavan paljon eroaville öljynjalostus- ja petrokemian teollisuuden monituotekolonneille.

Kirjallisuudessa tarkasteltiin aluksi öljynjalostus- ja petrokemian teollisuuden monituotetislauksen ilmiötä. Erityisesti tarkasteltiin ilmiötä, jotka liittyvät yleisiin, reaaliaikaisesti määritettäviin laskennallisiin suureisiin ja niiden ennustamiseen kolonnin operointidatasta. Ilmiöille ja suureille esitettiin kolonnin tilan seurantaan, operointiin, säätöön ja optimointiin liittyviä menetelmiä ja sovelluksia. Sen lisäksi esitettiin ja arvioitiin kaupallisia, tislaukolonnien laskennallisten suureiden ennustamiseen soveltuvia soft sensor -ohjelmistoja.

Kirjallisuuskatsauksen perusteella todettiin erityisesti ilmiöteoriaan perustuvilla fysikaalis-kemiallisilla FPM-malleilla tai FPM-hybridimalleilla olevan onnistuneita teollisuussovelluksia tislaukolonnien tilan ja tuotelaatua kuvaavien suureiden reaaliaikaisessa ennustamisessa. Ilmiöymmärryksen tai kehitysajan puutteen vuoksi myös kokonaan datapohjaisia mallinnusmenetelmiä on käytetty. Kaupalliset ohjelmistopakettit ovat useimmiten teollisuuden ohjelmisto- ja automaatiotoimittajien soft sensor -kehitysympäristöjä, joista osa on tarkoitettu nimenomaan tislaukolonneissa käytettävien soft sensorien kehittämiseen. Tislaukolonneille kohdistetuissa ratkaisuissa laskennan pohjana ovat pääosin fysikaalis-kemialliset ilmiöt, mutta osa ratkaisuista sisältää myös datapohjaisten soft sensorien kehittämismahdollisuuden. Työssä katselmoidut ohjelmistopakettit NAPCON Indicatoria lukuun ottamatta ovat helposti konfiguroitavia parhaimmillaan pienille, melko yksinkertaisille kolonneille. Teollisuuden käyttöön soveltuvien ohjelmistopakettien puute todettiin mallinnusmenetelmästä riippumatta ongelmalliseksi tislaukolonnien soft sensor -kehityksessä.

Kokeellisessa osassa esiteltiin aluksi NAPCON Indicator -ohjelmiston alkuperäiset laskenta-algoritmit, järjestelmä- ja ohjelmistoarkkitehtuuri ja konfigurointimenetelmät sekä kartoitettiin ohjelmiston tärkeimmät parannuskohteet ja toimenpiteet työn tavoitteiden saavuttamiseksi. NAPCON Indicatorille suunniteltiin ja toteutettiin uudistettu ohjelmistoarkkitehtuuri sisältäen monituotekolonnia mallintavan kirjaston, graafisen konfigurointityökalun sekä uudistetun reaaliaikaisen laskentaohjelmiston. Tämän lisäksi reaaliaikaisen laskennan algoritmeja uudistettiin siten, että laskenta on yleistetty kaikille öljynjalostus- ja petrokemian monituotekolonneille kolonnin rakenteesta, instrumentaatiosta ja lähtötiedoista riippumatta.

Reaaliaikaisen laskentaohjelmiston uudistetut algoritmit testattiin vertaamalla ohjelmiston laskemia tuloksia kahden tarkan (stationäärisen ja dynaamisen) prosessisimulaattorin tuloksiin eräällä testikolonnilla. Lisäksi arvioitiin laskennan herkkyyttä herkkyysanalyysillä ja testattiin toimintaa yksinkertaisissa vikatilanteissa. Toteutetun, uudistetun reaaliaikaisen laskentaohjelmiston todettiin tuottavan dynaamisen simulaattorin kanssa yhdenmukaisia kolonnin sisäisten virtausten estimaatteja testiprosessin ollessa dynaamisessa tilassa. Stationääritilan testauksen perusteella laskennan algoritmit toimivat tarkoituksenmukaisesti ja ennustetarkkuuden lisäämiseen vaadittavan joko sovelluskohtaista mallin kalibrointia tai ilmiömallinnuksen jatkokehitystä.

Uudistetun ratkaisun todettiin parantavan laskentojen konfigurointimenetelmiä siten, että konfigurointi vaatii huomattavasti vähemmän tietämystä monituotetislauksen ilmiöistä ja laskennan algoritmeista, on nopeampaa, eikä vaadi lähdekoodin muokkausta edes monimutkaisten monituotekolonniin tapauksessa. Uusilla konfigurointimenetelmillä on siten saavutettavissa nopeita ja vaivattomia ohjelmiston räätälöintejä ja käyttöönottoja. Laskentojen käytönaikaisesti uudistetun ratkaisun todettiin olevan edellistä ratkaisua vikasietoisempi, informatiivisempi sekä yhteensopivampi modernien automaatio- ja informaatioteknisten järjestelmien kanssa. Toteutettu laskentaohjelmisto toimii edellistä ohjelmistoa vakaammin erityisesti yleisissä tietokantaan ja numeerisiin virheisiin liittyvissä vikatilanteissa.

Uudistettu ohjelmisto tuottaa edellisen laskentaohjelmiston tulosten lisäksi reaaliaikaiset, kolonnille muodostettujen taseiden virheet. Taseiden virheet ovat operaattorille sekä kolonnin käyttö- ja kunnossapitohenkilökunnalle arvokasta tietoa operoinnissa ja vianselvityksessä.

9 Jatkotutkimusehdotukset

Reaaliaikainen NAPCON Indicator -laskentaohjelmisto pystyy tuottamaan monituotetislausprosesseille suuren määrän tarkkoja, fysikaalisiin ja kemiallisiin ilmiöihin perustuvia kolonnin tilaa kuvaavia avainarvoja. Modernissa prosessinohjausjärjestelmässä kuitenkin operaattorin reaaliaikaisesti seuraamien muuttuja-arvojen, hälytysten ja tapahtumien määrä on niin suuri, ettei operaattori pysty käsittelemään kaikkea saamaansa tietoa. NAPCON Indicatorin tuottamaa dataa voitaisiin hyödyntää paremmin kehittämällä ympäristö, jossa ylemmän tason avainindikaattoreita on helppo rakentaa käyttämällä hyödyksi esimerkiksi kolonnilaskentojen tuottamia alemman tason laskennallisia muuttujia. Kirjallisuusosassa tarkasteltaessa teollisia kolonnilaskentasovelluksia (luku 3) todettiin tilastollisten monimuuttujamenetelmien käytön prosessiteollisuuden vikadiagnostiikassa ja laatusuureiden ennustamisessa toimiviksi erityisesti käytettäessä laskennallisilla muuttujilla jalostettua dataa. Kolonnilaskentojen tuloksista erityisesti taseiden virheet voidaan todeta mahdollisesti instrumentti- ja vuotovikojen ennustamiseen soveltuvaksi dataksi. Lisäksi nykyisellään leikkauspistelaskennan lineaariregression selittäjät korreloivat keskenään, joten leikkauspiste-estimaatteja on mahdollista tarkentaa käyttämällä selittäjien korrelaatiot huomioivaa monimuuttujaregression menetelmää. Kaupallisten soft sensor -ohjelmistojen kartoituksessa luvussa 4 todettiin usean ohjelmiston sisältävän toiminnallisuuden datapohjaisten soft sensorien kehitykseen.

Kolonnilaskentojen ilmiömallinnusta on mahdollista kehittää laatimalla höyry- ja nestevirtauksien osuuksia kuvaavia stationääritilan yhtälöitä kussakin monituotekolonnin tasealueessa. Energiakäytön optimointisovelluksissa ja tulvimislaskennoissa sisäisten virtausten dynamiikkojen lisäksi myös niiden stationääritilojen arvot ovat merkityksellisiä. Tarkempi ilmiömallinnus mahdollistaisi kolonnilaskentojen käyttöönoton ilman mallien kalibrointia tai vähäisemmällä kalibroinnilla.

Herkkyysanalyysi tehtiin työssä osittaisherkkyysanalyysinä, jossa yhtä muuttujaa muutettiin kerrallaan pidettäessä muut vakiona. Kattavamman testauksen kannalta herkkyysanalyysi tulisi suorittaa mallintamalla erilaisia yleisiä vikatilanteita, kuten TBP-analysaattorin virhemittausta. Erityisesti analysaattorien virhetilanteissa tulisi testata, miten laskennan tulokset muuttuvat päivittäessä tuntemattoman kolonnin syötön ominaisuuksia virheellisellä analysaattorimittaus- tai laboratoriotuloksella määritetyn tuotevirran TBP-käyrän mukaan. Laskentamallien täsmäys analysaattori- ja laboratoriomittausten perusteella on todettu kirjallisuuskatsauksessa yleiseksi toiminnoksi, mutta automaattinen päivittäminen on saanut soveltajilta osakseen myös kritiikkiä.

Lähdeviitteet

Aalto, M., Keskinen, K.I., Aittamaa, J., Liukkonen, S. (1996). An improved correlation for compressed liquid densities of hydrocarbons. Part 2. Mixtures. *Fluid Phase Equilibria*, 114 (1–2), ss. 21-35.

ABB. ABB-yhtymä [Online]. (2013).
<http://www.abb.fi/cawp/fiabb251/5b3b47abc1e9e75dc2256b20003f96db.aspx>
[Viitattu 9.10.2013].

ABB. OptimizeIT Inferential Modeling Platform (IMP) [Online]. (2007).
[http://www05.abb.com/global/scot/scot267.nsf/veritydisplay/8b91f5ad9c8bf37a85256fe300665259/\\$file/Flyer%20IMP_3_0.pdf](http://www05.abb.com/global/scot/scot267.nsf/veritydisplay/8b91f5ad9c8bf37a85256fe300665259/$file/Flyer%20IMP_3_0.pdf) [Viitattu 3.10.2013].

Adnan, A., Sani, N.M., Nam, S.Y., Friedman, Y.Z. (2004). The use of first-principle inference models for crude switching control. *Proceedings of the 2004 ERTC Computer conference*. 360 s.

American Petroleum Institute. Volume II Thermal Properties & Phase Equilibria 2006. Teoksessa API Technical Data Book, 8. painos. The American Petroleum Institute and EPCON International.

Ansari, R.M. & Al-Otaibi, J.A. (2007). An Innovative Approach to Inferential Modeling on Crude Distillation Unit. *Saudi Aramco Journal of Technology – Summer 2007*, ss. 26-30.

Aspen Technology. (2013). AspenTech: Optimizing Process Manufacturing [Online].
<http://www.aspentech.com/Company/About-AspenTech/> [Viitattu 9.10.2013].

Aspen Technology. (2011). aspenONE® Advanced Process Control [Online]. <http://www.aspentech.com/WorkArea/DownloadAsset.aspx?id=6442451701> [Viitattu 9.9.2013].

Barttfeld, M., Aguirre, P.A., Grossmann, I.E. (2003). Alternative representations and formulations for the economic optimization of multicomponent distillation columns. *Computers & Chemical Engineering*, 27 (3), ss. 363-383.

Bolf, N., Ivandic, M., Galinec, G. (2008). Soft sensors for crude distillation unit product properties estimation and control. *Proceedings of the 16th Mediterranean Conference on Control and Automation*, ss. 1804.

Chatterjee, T., Saraf, D.N. (2004). On-line estimation of product properties for crude distillation units. *Journal of Process Control*, 14 (1), ss. 61-77.

Dave, D.J., Dabhiya, M.Z., Satyadev, S.V.K., Ganguly, S., Saraf, D.N. (2003). Online tuning of a steady state crude distillation unit model for real time applications. *Journal of Process Control*, 13 (3), ss. 267-282.

Emerson Electric Co. (2013). Company Overview, Our Businesses and More | Emerson [Online]. <http://www.emerson.com/en-US/about/overview/Pages/default.aspx> [Viitattu 9.10.2013].

Emerson Process Management. (2012). SmartProcess® Distillation [Online]. http://www2.emersonprocess.com/siteadmincenter/PM%20DeltaV%20Documents/ProductDataSheets/PDS_SmartProcess_Dist.pdf [Viitattu 22.10.2013].

Engelien, H.K., Skogestad, S. (2004). Selecting appropriate control variables for a heat-integrated distillation system with prefractionator. *Computers & Chemical Engineering*, 28 (5), ss. 683-691.

Estrada-Flores, S., Merts, I., De Ketelaere, B., Lammertyn, J. (2006). Development and validation of “grey-box” models for refrigeration applications: A review of key concepts, *International Journal of Refrigeration*. 29 (6), ss. 931-946.

ExperTune. (2013a). ExperTune Inc [Online].
<http://www.expertune.com/about.aspx> [Viitattu 9.10.2013].

ExperTune. (2013b). ProcessApex™ Distillation Columns [Online].
<http://www.expertune.com/PADistillation.aspx> [Viitattu 3.10.2013].

Fair, J. (1987). Distillation. Teoksessa *Handbook of Separation Process Technology*. ed. Rousseau, R.W. John Wiley & Sons, USA, ss. 229-339.

Friedman, Y.Z. (2011). Inferential control model input selection. *Hydrocarbon Processing*. 90 (2), ss. 94-94.

Friedman, Y.Z. (2006). Choosing inferential modeling tools. *Hydrocarbon Processing*, 85 (1), ss. 15-16.

Friedman, Y.Z. (1997). Engineering Models for Inferential Control. *Proceedings of the 1st International Hydrocarbon Processing's Process Optimization Conference*.

Friedman, Y.Z. (1994). Model-Based control of crude qualities: Unique advanced controls improved operation, particularly during crude switches. *Hydrocarbon Processing*, 73 (2), ss. 97.

Friedman, Y.Z. (1985). Control of Crude Fractionator Product Qualities During Feedstock Changes by Use of a Simplified Heat Balance. *Proceedings of the 1985 American Control Conference*. 1720 s.

Glitsch & Sons Inc. (1974). Ballast Tray Design Manual, 5th edition. Glitsch Inc., Dallas, Texas.

Honeywell. (2013). Today's Honeywell [Online].
http://honeywell.com/About/Documents/TodaysHoneywell_13_0711.pdf [Viitattu 9.10.2013].

Honeywell. (2011). Profit SensorPro [Online].
<https://www.honeywellprocess.com/library/marketing/notes/ProfitSensorProPIN2010eop.pdf> [Viitattu 3.9.2013].

Horn, L.V.D. (1980). Crude unit computer control—how good is it?. *Hydrocarbon Processing*. 59 (4), ss. 145-148.

Hou, K. (2001). Crude distillation unit online optimization. *Hydrocarbon Processing*, 80 (6), ss. 69.

Jones, A., O'Donnell, M., Terndrup, H. (1999). Crude unit control and optimisation at Grangemouth Refinery. *Computing & Control Engineering Journal*, 10 (5), ss. 209-213.

Kadlec, P., Gabrys, B. & Strandt, S. (2009). Data-driven Soft Sensors in the process industry. *Computers & Chemical Engineering*, 33 (4), ss. 795-814.

Kangasharju, J., Tarkoma, S. (2007). Benefits of alternate XML serialization formats in scientific computing. *Proceedings of the 2007 workshop on Service-oriented computing performance: aspects, issues, and approaches*, ss. 23.

Kano, M., Miyazaki, K., Hasebe, S., Hashimoto, I. (2000). Inferential control system of distillation compositions using dynamic partial least squares regression. *Journal of Process Control*, 10 (2–3), ss. 157-166.

Kesler, M.G., Lee, B.I. (1976). Improve Predicted Enthalpy of Fractions. *Hydrocarbon Processing*, 55 (3), ss. 153.

Kim, S., Okajima, R., Kano, M., Hasebe, S. (2013). Development of soft-sensor using locally weighted PLS with adaptive similarity measure. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 124 (0), ss. 43-49.

King, M.J. (2004). How to lose money with inferential properties. *Hydrocarbon Processing*, 83 (10), ss. 47-52.

Kister, H.Z., Mathias, P., Steinmeyer, D., Penney, W., Crocker, B., Fair, J. (2008). Equipment for distillation, gas absorption, phase dispersion, and phase separation. Teoksessa *Perry's Chemical Engineers' Handbook*, 8th edition, McGraw-Hill. ss. 40.

Kister, H.Z. (2006). Misleading Measurements: Number 8 on the Top 10 Malfunctions. Teoksessa *Distillation Troubleshooting*. John Wiley & Sons, Inc. ss. 347-356.

Komulainen, T., Sourander, M., Jämsä-Jounela, S. (2004). An online application of dynamic PLS to a dearomatization process. *Computers & Chemical Engineering*, 28 (12), ss. 2611-2619.

Lawson, C.L. & Hanson, R.J. (1974). Solving Least Squares Problems. Prentice-Hall, New Jersey, USA.

Mahalec, V., Sanchez, Y. (2012). Inferential monitoring and optimization of crude separation units via hybrid models. *Computers & Chemical Engineering*. 45 (0), ss. 15-26.

Martin, G. (1997). Consider soft sensors. *Chemical Engineering Progress*, 93 (7), ss. 66.

Martin, G., Barber, G., Friedman, Y.Z., Bullerdiel, E. (2000). Refining & petrochemical property indicators for distillation, fractionation and crude switching, *Proceedings of the 2000 NPRA Computer Conference*.

Microsoft. (2013a). Introducing XML Serialization [Online].
<http://msdn.microsoft.com/en-us/library/182eeyhh.aspx> [12.9.2013].

Microsoft. (2013b). Dictionary<TKey, TValue> Class [Online].
<http://msdn.microsoft.com/en-us/library/xfhwa508.aspx> [Viitattu 13.9.2013].

Mitra, S. (2013). Distillation column tray hydraulics [Online].
http://academia.edu/639720/Distillation_column_tray_hydraulics [Viitattu 1.7.2013].

Moharam, H.M., Braek, A.M., Fahim, M.A. (1998). A Simple Method of Estimating the Enthalpy of Petroleum Fractions. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, . 37 (12), ss. 4898-4902.

More, R.K., Bulasara, V.K., Uppaluri, R. & Banjara, V.R. (2010). Optimization of crude distillation system using aspen plus: Effect of binary feed selection on grass-root design. *Chemical Engineering Research and Design*. 88 (2), ss. 121-134.

Neste Jacobs Oy. (2013a). TISLA [Ohjelmiston lähdekoodi].

Neste Jacobs Oy. (2013b). Neste Jacobs - Home [Online].
<http://www.nestejacobs.com/> [Viitattu 9.10.2013].

Oisiovici, R.M., Cruz, S.L. (2001). Inferential Control of High-Purity Multicomponent Batch Distillation Columns Using an Extended Kalman Filter. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 40 (12), ss. 2628-2639.

Pan, Y.C., Qin, S.J., Nguyen, P., Barham, M. (2013). Hybrid Inferential Modeling for Vapor Pressure of Hydrocarbon Mixtures in Oil Production. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 52 (35) ss. 12420–12425.

Pantelides, C.C., Renfro, J.G. (2013). The online use of first-principles models in process operations: Review, current status and future needs. *Computers & Chemical Engineering*, 51 (0), ss. 136-148.

Patke, N.G., Deshpande, P.B., Chou, A.C. (1982). Evaluation of inferential and parallel cascade schemes for distillation control. *Industrial & Engineering Chemistry*, 21 (2), ss. 266-272.

Perry, M.B. & White, C.M. (1985). New Correlations Between the Watson Characterization Factor (K_w) and Properties of Coal-Derived Materials. *Proceedings of the 1985 Symposium on liquefaction and characterization of liquids*, ss.204-214.

Qin, S.J. (1997). Chapter 8 - Neural Networks for Intelligent Sensors and Control— Practical Issues and Some Solutions. Teoksessa *Neural Systems for Control*. Ed. Omidvar, O., Elliott, D.L. Academic Press. San Diego. ss. 213-234.

- Riazi, M., Mansoori, G.A. (1993). Simple equation of state accurately predicts hydrocarbon densities. *Oil & Gas Journal*, 91 (28), ss. 108-111.
- Riazi, M.R., Daubert, T.E. (1986). Analytical Correlations Interconvert Distillation Curve Types. *Oil & Gas Journal*, 84 (34). ss. 50.
- Riazi, M.R., Daubert, T.E. (1980). Simplify Property Predictions. *Hydrocarbon Processing*, 59 (3), ss. 153.
- Rogina, A., Šiško, I., Mohler, I., Ujević, Ž., Bolf, N. (2011). Soft sensor for continuous product quality estimation (in crude distillation unit). *Chemical Engineering Research and Design*, 89 (10), ss. 2070-2077.
- Roussel, J., Boulet, R. (1995). Composition of Crude Oils and Petroleum Products. Teoksessa *Petroleum Refining. Volume 1, Process Flowsheets*. Ed. Wauquier, J.P. Éditions Technip. Pariisi.
- Schneider, D. (1998). Select the right hydrocarbon molecular weight correlation. *Chemical Engineering Progress — December 1998*. 302 s.
- Shinskey, F.G. (1977). *Distillation Control*. McGraw-Hill. USA.
- Skogestad, S. (1997). Dynamics and control of distillation columns—a critical survey. *Modeling, Identification and Control*, 18 (3), ss. 177-217.
- Tran, M., Varvarezos, D.K., Nasir, M. (2005). The importance of first-principles, model-based steady-state gain calculations in model predictive control—a refinery case study. *Control Engineering Practice*, 13 (11), ss. 1369-1382.

Warne, K., Prasad, G., Rezvani, S., Maguire, L. (2004). Statistical and computational intelligence techniques for inferential model development: a comparative evaluation and a novel proposition for fusion. *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, 17 (8), ss. 871-885.

Watson, K.M., Nelson, E.F. (1933). Improved Methods for Approximating Critical and Thermal Properties of Petroleum Fractions. *Industrial & Engineering Chemistry*, 25 (8), ss. 880-887.

Liitteet

Liite 1. Laskentarutiinien konfigurointiparametrit

PARAMETRI	SELITE
Koostumuslaskennat	
Ulkoisten virtojen mitattujen koostumusten tyypit	Paino- tilavuus- tai mooliprosentti
Ulkoisten virtojen koostumusten määrittystapa	TBP-käyrä tai pitoisuusmittaus
Huipun koostumuksen mittauspaikka	Tislevirtaus tai ylimenovirtaus
Laskettavan koostumuksen paikka huipussa	Tislevirtaus tai ylimenovirtaus
Komponenttien lukumäärät ulkoisissa virroissa	
LK-komponentti pohjavirrassa	Komponentille valittu tunniste
Kolonnin rakennemäärittelyt	
Pohjaluku	
Syöttöpohjien numerot	
Ulosottopohjien numerot	
Sivustripperien lukumäärä	
Sivustripperien palautuspohjat	
Pohjahöyryn syöttöpohja	
Strippaushöyrysyöttöjen lukumäärä	
Strippaushöyrysyöttöjen palautuspohjat	
Sivukiertojen lukumäärä	
Sivukiertojen ulosottopohjat	
Sivukiertojen palautuspohjat	
Sivukiertojen tyypit	Jäähdytys tai lämmitys
Sivukiertojen laskentatapa	Prosessiaineen puoli tai jäähdytysfluidin puoli
Sivukiertojen maksimitehot	
Huipun lauhduttimen maksimiteho	
Huipun lauhdutusvaiheiden lukumäärä	
Taselaskelmien määrittelyt	
Laskettavien sisäisten virtausten lukumäärä	
Tuntemattomien pohjien numerot kussakin tasealueessa	
Tunnettujen pohjien numerot kussakin tasealueessa	
Tasealueiden määrittely, taseosoittimet ja pohjanumerot	Taulukko viittaamaan

	taseen identifioivaan kokonaislukuun ja sitä vastaavaan pohjalukuun
Sisäisten virtausten minimiarvo	Sijoitetaan lasketulle virtaukselle, jos virtaus olisi laskennan tuloksena negatiivinen
Iteraatiokierrosten maksimimäärä	
Tulvimislaskennat	
Välipohjien etäisyydet	
Virtauskanavien pituudet	
Paineen lineaarinen vaikutus tulvimisprosenttiin	Regressiokertoimet lineaariselle mallille
Pohjien kokonaispinta-alat	
Pohjien aktiiviset pinta-alat	
Paluukaukaloiden poikkipinta-alat	
Virtausnopeus paluukaukalossa	
Vaahtoamiskerroin	
Varmuuskerroin	
Energiakäytön optimoinnin parametrit	
Käytetyn energian hinta	
LK-komponentin arvo	
HK-komponentin arvo	
HK-pitoisuus syötössä	
Kolonnikohtainen kerroin	Erotuksen hyvyttä kuvaava kolonnispesifinen kerroin
Suodatuskertoimet	
TBP-laskennan suodatuskertoimet	
Sisäisten höyryvirtausten suodatuskertoimet	
Sisäisten nestevirtausten suodatuskertoimet	
Alkukiehumispisteiden suodatuskertoimet	
Laskentojen virityskertoimet	
Huipun ominaispainon virityskerroin	Virityskertoimia käytetään tuntemattomien aineominaisuuksien määrittämisessä, kun jonkin referenssivirran aineominaisuudet tunnetaan.

Huipun Watsonin karakterisointikertoimen virityskerroin	
Sivu-ulosottojen ominaispainon virityskerroin	
Sivu-ulosottojen Watsonin karakterisointikertoimen virityskerroin	
Huipun palautusvirran ominaispainon virityskerroin	
Huipun palautusvirran Watsonin karakterisointikertoimen virityskerroin	
Huipun ylimenon ominaispainon virityskerroin	
Huipun ylimenon Watsonin karakterisointikertoimen virityskerroin	
Muut määrittelyt	
Vesihöyryn moolimassa	
Höyryfaasin massaosuudet syötöissä	
Höyryfaasin massaosuudet sivu-ulosotoissa	
Painehäviö pohjaa kohden	
Tuotteiden tislaukikäyrät	Annetaan tislaukikäyriä valittujen tilavuusprosenttien lämpötilat

Liite 2. Yleisiä lähdekoodin muokkausta vaativia räätälöintimäärittelyjä

MÄÄRITYKSET	MENETELMÄT
Pitoisuus- ja taselaskennat, kolonnin huippu tai pohja	
<p>Taselaskennat aloitetaan ratkaisemalla joko ylimmän tai alimman taseen massa- ja energiavirrat. Konfiguroijan on ratkaistava pohjan tai huipun tasealueen ulkoiset ja sisäiset virtaukset, pitoisuudet, moolimassat, ominaispainot ja Watsonin karakterisointikertoimet.</p>	<p>Valitaan huippu tai pohja ratkaistavaksi suunnittelutietojen perusteella.</p> <p>Määritetään ja ohjelmoidaan massa- ja komponenttibaseet manuaalisesti.</p> <p>Määritetään moolimassa, ominaispaino ja Watsonin karakterisointikerroin olettamalla suunnitteluolosuhteet kolonnissa tai interpoloimalla mittausten avulla.</p>
Taselaskennat, sisäiset virtaukset	
<p>Sisäisten virtausten aineominaisuudet (moolimassa, ominaispaino, Watsonin karakterisointikerroin) on määritettävä energiataseiden muodostamista varten.</p>	<p>Aineominaisuudet määritetään joko oletuksilla ulkoisten virtojen mittausten ja suunnittelutietojen suhteen tai interpoloimalla. Kirjoitetaan määrittelykset lähdekoodiin manuaalisesti.</p>
Taselaskennat, kokonaistaseet	
<p>Kolonnille määritetään kokonaismassatase taselaskennan lopuksi ja arvioidaan taselaskennan virhettä. Virhettä ei kuitenkaan käytetä koodissa sen laskennan jälkeen tai esitetä</p>	<p>Kokonaismassatase kirjoitetaan lähdekoodiin manuaalisesti.</p>

operaattorille. Kokonaisenergiatasetta ei lasketa.	
Paineiden estimointi välipohjilla	
Tase-, tulvimis- ja leikkauspistelaskennassa tarvitaan paine laskettavalla välipohjalla.	Paineet estimoidaan huipun mittauksesta joko olettamalla vakiopainehäviö välipohjaa kohden tai interpoloimalla kahden painemittauksen suhteen. Määrityskoodi on ohjelmoitava manuaalisesti.
Höyryn ja nesteen lämpötilaeron estimointi	
Jokaiselle kolonnin tasealueelle on määritettävä höyryjen ja nesteiden lämpötilat erikseen. Samassa kolonnin kohdassa oleva höyry on usein nestettä kuumempaa.	Höyryn lämpötila arvioidaan interpoloidusta nesteen lämpötilasta lisäämällä manuaalisesti lähdekoodiin lämpötilakorjaus kokemuksen tai simulaation perusteella.
Leikkauspisteen laskeminen	
Korrelaatio räätälöidään jokaiselle kolonnin tuotteelle erikseen. Räätälöinnissä määritetään regressiokertoimet, L/V-suhdetermin käyttö sekä mallissa käytetyn saannon tasealue.	Regressiokertoimet ja käytetyt termit määritetään visuaalisesti sovittamalla tai kokemuksen perusteella. Leikkauspisteen laskenta ohjelmoidaan lähdekoodiin.

Liite 3. NNLS-algoritmi (Lawson & Hanson, 1974)

Algoritmi ratkaisee n -vektorin x , joka toteuttaa ehdon

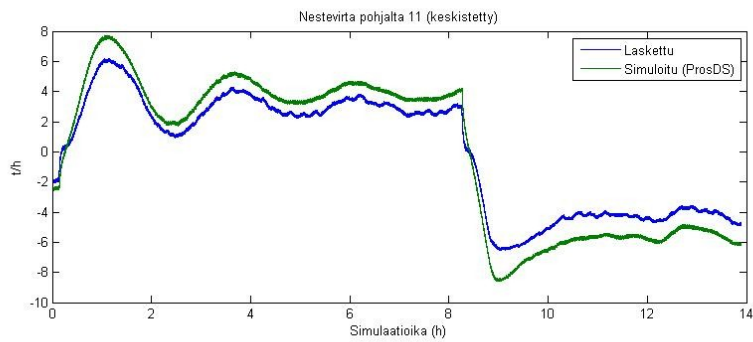
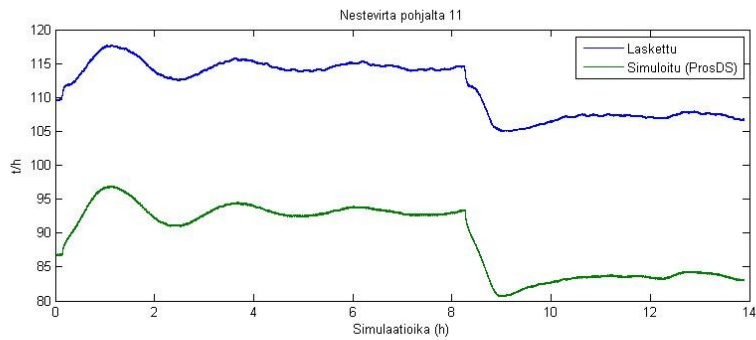
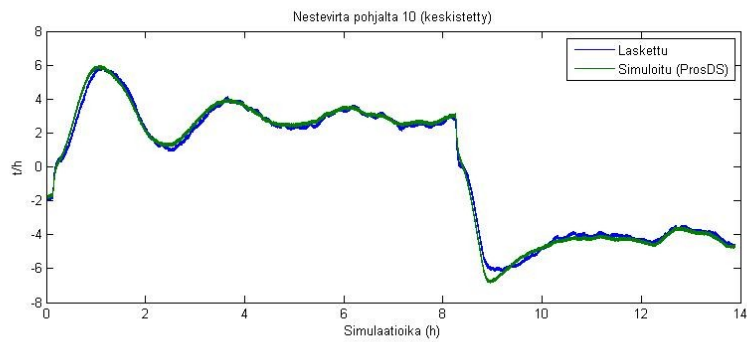
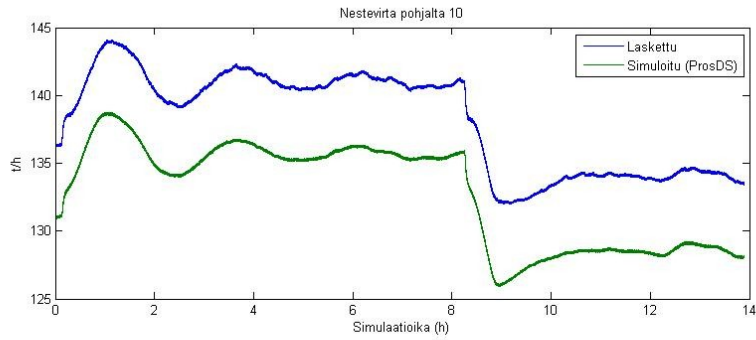
$$\min \|Ex - f\|, x \geq 0$$

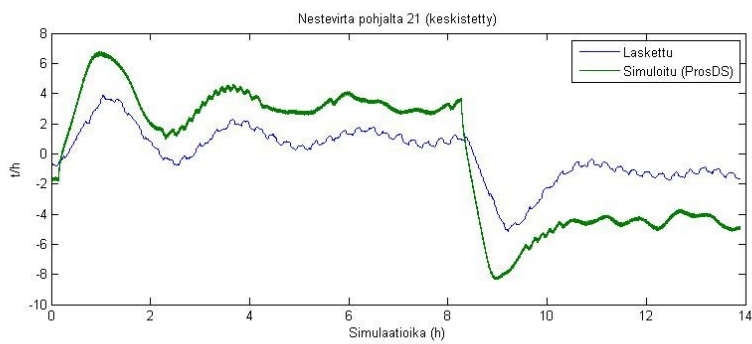
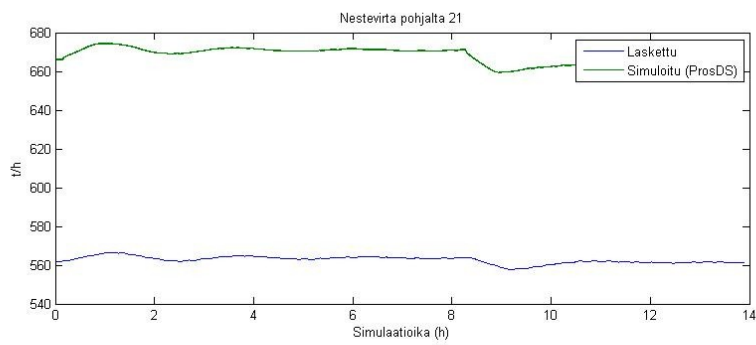
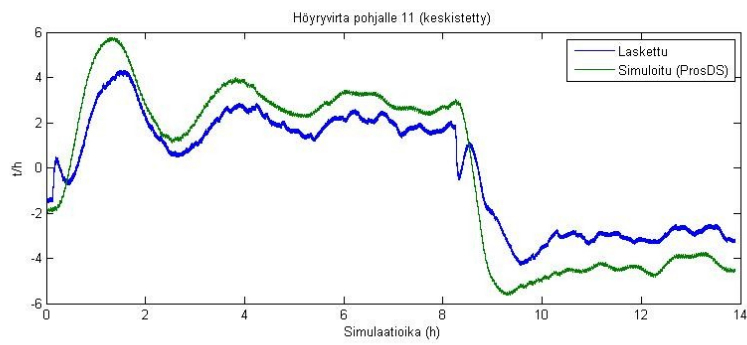
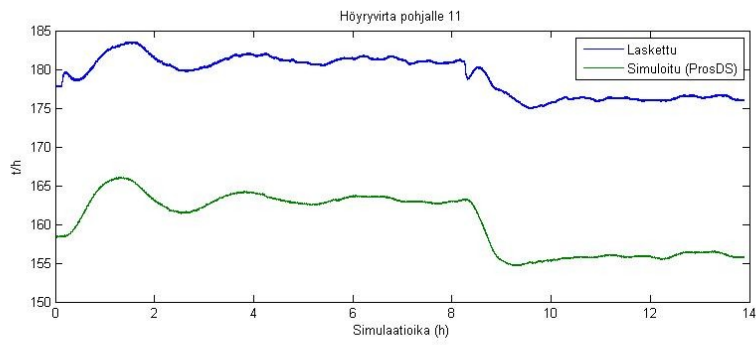
Algoritmi saa syötteenään $m \times n$ -matriisin E , kokonaisluvut m ja n sekä m -vektorin f . Algoritmi käyttää työtilana n -vektoreita w ja z . P ja Z ovat indeksijoukkoja, joita algoritmi muokkaa edetessään.

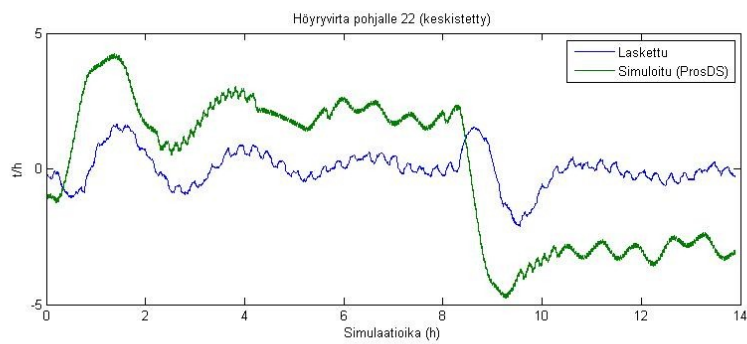
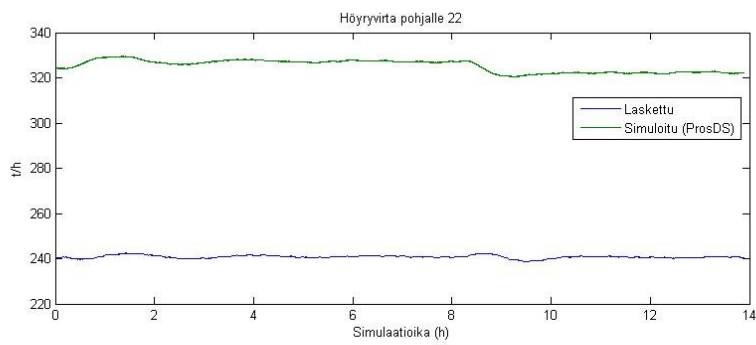
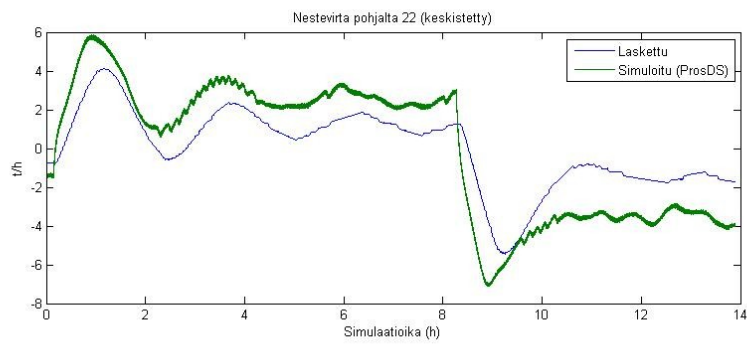
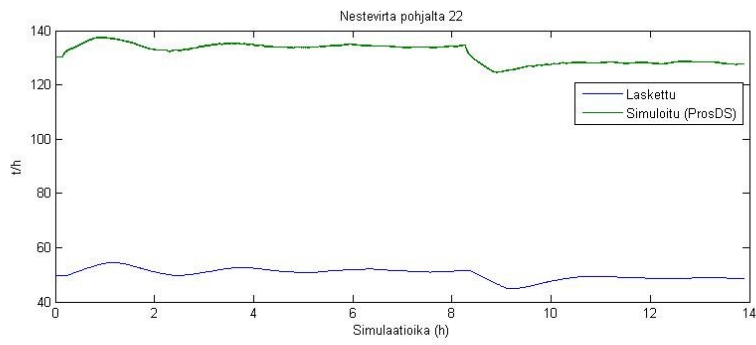
- 1 Asetetaan $P := \emptyset, Z := \{1, 2, \dots, n\}$ ja $x := 0$.
- 2 Asetetaan $w := E^T(f - Ex)$.
- 3 Jos $Z := \emptyset$ tai $\forall j \in Z: w_j \leq 0$, siirrytään vaiheeseen 12.
- 4 Etsitään indeksi $t \in Z$ siten, että $w_t = \max\{w_j: j \in Z\}$.
- 5 Siirretään indeksi t joukosta Z joukkoon P .
- 6 Määrätään $m \times n$ -matriisi E_P :

$$E_P: n \text{ sarake} := \begin{cases} E: n \text{ sarake } j, j \in P \\ 0, j \in Z \end{cases}$$
- Lasketaan z pienimmän neliösumman ratkaisuna ongelmasta $E_P z \cong f$.
Asetetaan $z_j := 0, j \in Z$.
- 7 Jos $\forall j \in P: z_j > 0$, asetetaan $x := z$ ja siirrytään vaiheeseen 12.
- 8 Etsitään indeksi $q \in P$ siten, että $\frac{x_q}{x_q - z_q} = \min\{\frac{x_j}{x_j - z_j}: z_j \leq 0, j \in P\}$.
- 9 Asetetaan $\alpha := \frac{x_q}{x_q - z_q}$.
- 10 Asetetaan $x := x + \alpha(z - x)$.
- 11 Siirrä joukosta P joukkoon Z kaikki indeksit $j \in P$, joille $x_j = 0$. Siirrytään vaiheeseen 6.
- 12 Algoritmi on valmis.

Liite 4. Sisäisten virtausten laskentatulosten vertailu ProsDS:llä simuloituihin tuloksiin







Liite 5. Herkkyyksanalyysi: mittaus- ja vakioarvojen minimi- ja maksimitestaus

Manipuloitu muuttuja	Aktiiviset rajoitukset manipuloinnin jälkeen
Pohjan massavirta	Syötön tiheys Syötön ominaispaine Nestevirta pohjalta 22 Nestevirta pohjalta 11 Höyryvirta pohjalle 11
Kiertopalautuksen massavirta	Nestevirta pohjalta 21
Tisleen massavirta	Kiertopalautusvirran tiheys Syötön tiheys Pohjalta 21 lähtevän nestevirran tiheys Alemman sivu-ulosoton tiheys Huipun kondensatorin jäähdytysteho Höyryvirta pohjalle 11
Syötön massavirta	Syötön ominaispaine Pohjatuotteen tiheys Kiertopalautusvirran tiheys Syötön tiheys Pohjalta 10 lähtevän nesteen tiheys Pohjalta 11 lähtevän nesteen tiheys Pohjalta 21 lähtevän nesteen tiheys Pohjalta 22 lähtevän nesteen tiheys Huipun kondensatorin jäähdytysteho Alemman sivustripperin kiehutusteho Nestevirta pohjalta 22 Höyryvirta pohjalta 22 Höyryvirta pohjalta 11
Huipun ylimenokaasuvirtaus	Huipun ylimenokaasun tiheys Huipun ylimenokaasun ominaispaine Huipun kondensatorin jäähdytysteho
Huipun palautusvirta	Huipun kondensatorin jäähdytysteho Huipun ylimenokaasun tiheys Huipun ylimenokaasun ominaispaine Nestevirta pohjalta 11
Ylemmän sivu-ulosoton massavirta	Nestevirta pohjalta 10
Alemman sivu-ulosoton massavirta	Syötön tiheys Nestevirta pohjalta 21
Höyryfaasin massaosuus syötössä	Nestevirta pohjalta 22
Paine pohjalla 32	Paineet pohjilla 33–39
Kiertopalautusvirran kuumen puolen lämpötila	Kiertopalautuksen lauhdutusteho
Kiertopalautusvirran kylmän puolen lämpötila	Kiertopalautuksen lauhdutusteho
Huipun lämpötila	Huipun kondensatorin lauhdutusteho Nestevirta pohjalta 11
Syötön lämpötila	Höyryvirta pohjalle 22