

# KEMIJSKO INŽENIRSTVO II

MATJAŽ KRAJNC

[matjaz.krajnc@fkkt.uni-lj.si](mailto:matjaz.krajnc@fkkt.uni-lj.si)

BLAŽ LIKOZAR

[blaz.likozar@ki.si](mailto:blaz.likozar@ki.si)

# ŠTUDIJSKA LITERATURA

Plazl in M. Lakner, **Uvod v modeliranje procesov**, Založba FKKT, Univerza v Ljubljani, Ljubljana, 2004, 230 str.;

C. F. Gerald in P. O. Wheatley, **Applied numerical analysis**, 7. izdaja, Addison Wesley, New York, 2003;

D. M. Himmelblau in J. B. Riggs, **Basic Principles and Calculations in Chemical Engineering**, 7. izdaja, Prentice Hall, 2003;

R. M. Felder in R. W. Rousseau, **Elementary principles of chemical processes**, 3. Izdaja, John Wiley and Sons, Inc., New York, 2000.

# UVOD V MODELIRANJE PROCESOV

## Vloga modelov v kemijskem inženirstvu

Matematični model je opisovanje določenih pogledov ne-matematičnega sistema v matematičnem izrazoslovju.

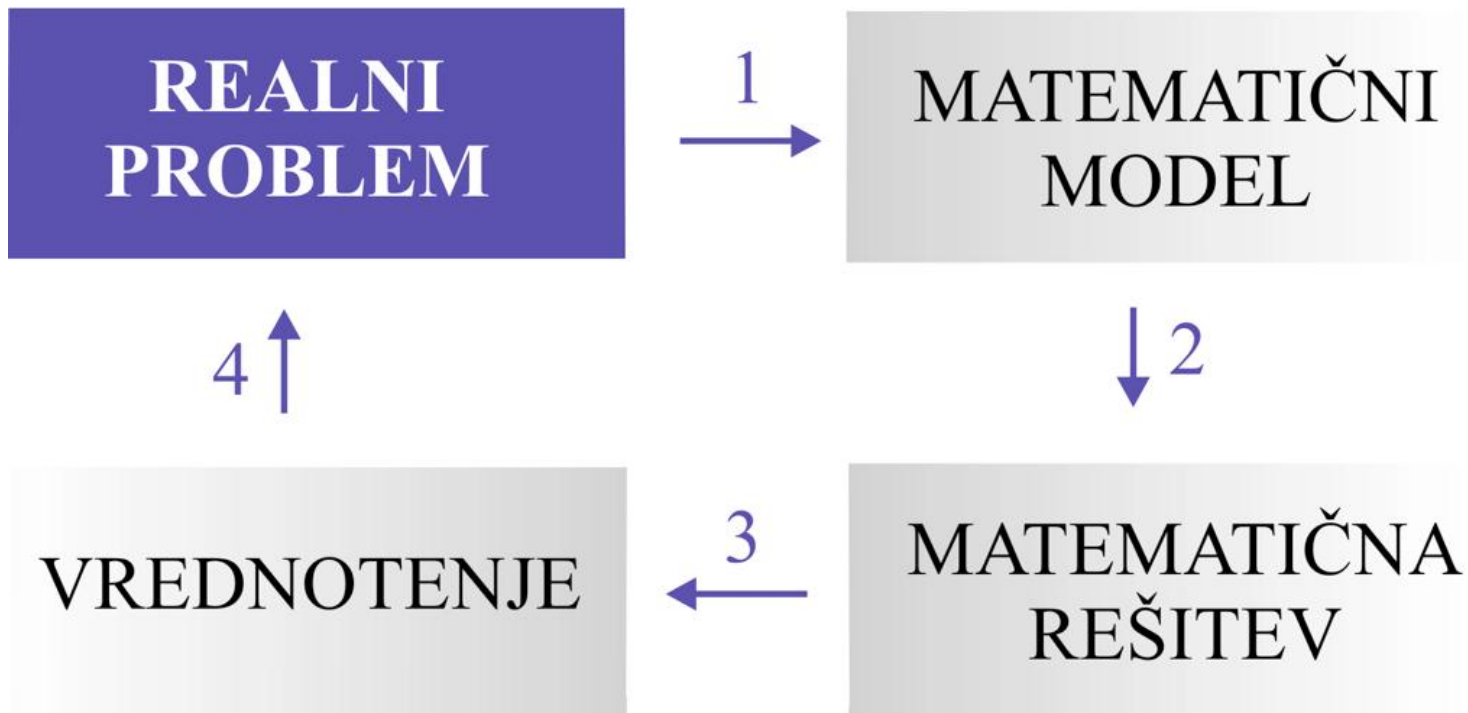
Matematični model je lahko le aproksimacija procesa iz realnega sveta, ki je pogosto izredno kompleksen in le delno razumljen. Torej modeli sami po sebi niso ne slabi, ne dobri, ampak morajo izpolniti predhodno dobro določen namen.

Modeliranje je proces nenehnega razvoja. Priporočljivo je začeti z predstavitvijo nekega procesa v najbolj preprosti obliki, katere kompleksnost se dograjuje z razvojem modela. Začeti opisovanje procesa v njegovi najbolj zapleteni obliki pogosto vodi do zmedenosti.

Modeliranje je "umetnost", a hkrati tudi zelo pomemben učni proces.

Modrost modeliranja z nekoliko cinizma:

**VSI MODELI SO NAPAČNI, NEKATERI SO KORISTNI.**



Proces modeliranja realnega problema.

# Od realnosti do matematike (korak 1)

Pretvorba realnega problema v matematično jezikoslovje. Pri tem naletimo na ključna vprašanja.

- Kakšno je naše razumevanje realnega problema?
- Zakaj nameravamo uporabiti model?
- Kateri pojavi ali mehanizmi so zajeti v sistemu?
- Kateri tip modela je zahtevan?
- Kako naj bo model strukturiran in dokumentiran?
- Kako natančen naj bo model?
- Kateri podatki o sistemu so na voljo in kako zanesljivi so?
- Kaj vstopa in izstopa iz obravnavanega sistema in kakšne so motnje sistema?

## Matematična rešitev (korak 2)

Preden poiščemo vrednosti neznanih spremenljivk v postavljenem matematičnem opisu realnega sistema, moramo odgovoriti na nekatera vprašanja.

- Je model rešljiv?
- Katera numerična (analitična) metoda je primerna?
- Ali lahko še izboljšamo strukturo problema z namenom povečanja hitrosti procesiranja in stabilnosti rešitve?
- V kakšni obliki želimo ponazoriti rezultate (dvodimenzionalen, trodimenzionalen prikaz)?
- Kakšno občutljivost rešitve sistema lahko pričakujemo glede na spreminjanje vrednosti parametrov in vstopnih podatkov?

## Vrednotenje rezultatov (korak 3)

V tem delu procesa modeliranja izvedemo postopke in teste s katerimi preverimo, kako korektno je bil model izvršen in ali dovolj natančno posnema realni problem, da lahko model koristno uporabimo. Pri tem iščemo odgovore na ključna vprašanja.

- Kako bomo verificirali izvedbo modela?
- Kateri način ugotovitve veljavnosti oz. potrditve modela je primeren in uresničljiv za dani primer?
- Je rezultat modela razpoznaven?
- Kaj je potrebno spremeniti v modelu, če potrditev modela ni bila uspešna?
- Kakšna poenostavitev je še smiselna in upravičljiva?
- Kakšna kvaliteta in kvantiteta podatkov je potrebna za potrditev modela in parametrično določljivost?
- Kakšen način potrditve modela je potreben: statičen ali dinamičen?
- Kolikšna natančnost je smotrna?
- Kako občutljive so napovedi modela na spremenljive vstopne podatke in parametre sistema?

## Uporaba rezultatov v realnem procesu (korak 4)

Na tem mestu se soočimo z izvedbo modela in uporabo njegovih rešitev v realnem procesu iz katerega smo v osnovi izhajali pri razvoju modela. Katera ključna vprašanja lahko pričakujemo na tem mestu?

- Ali je potrebno pri neposredni (angl.: on-line) uporabi modela za vodenje, regulacijo ali optimizacijo procesa, kjer je hitrost procesiranja ključnega pomena, zmanjšati kompleksnost modela?
- Kako lahko posodobimo model in katere podatke potrebujemo v ta namen?
- Kdo bo upravljal z modelom in v kakšni obliki naj bodo predstavljeni rezultati?
- Kako vzdrževati in ohranjati uporabnost modela?
- Kako podrobna dokumentacija modela je potrebna?



# Uporaba in namen modeliranja v procesnem inženirstvu (primeri)

PODROČJE APLIKACIJ	UPORABA IN NAMEN MODELOV
NAČRTOVANJE PROCESOV	<ul style="list-style-type: none"><li>• možnost analiz pri načrtovanju novih procesov</li><li>• tehnične, ekonomske in okoljevarstvene ocene</li><li>• vpliv sprememb procesnih parametrov na izvajanje procesa</li><li>• optimizacija na osnovi strukturnih in parametričnih sprememb</li><li>• dinamična analiza procesa</li><li>• optimalno zmanjšanje odpadnih snovi pri načrtovanju procesa</li></ul>
VODENJE PROCESOV	<ul style="list-style-type: none"><li>• preverjanje sistema za vodenje in regulacijo procesa</li><li>• optimizacija regulacijskega sistema pri šaržnih procesih</li><li>• optimizacija regulacijskega sistema za večproduktne procese</li></ul>
ODKRIVANJE NAPAK	<ul style="list-style-type: none"><li>• odkrivanje možnih povzročiteljev slabše kvalitete produktov</li><li>• odkrivanje možnih nepravilnosti procesa</li></ul>
VARNOST PROCESV	<ul style="list-style-type: none"><li>• odkrivanje nevarnih območij obratovanja</li><li>• iskanje spleta okoliščin, ki lahko pripeljejo do nesreč med obratovanjem</li><li>• določitev postopkov za odpravo posledic nesreč</li></ul>
TRENING IN UČENJE OPERATERJEV	<ul style="list-style-type: none"><li>• simulacija varnega zagona in ustavitve procesa</li><li>• trening odziva v primeru nevarnosti</li><li>• učenje vodenja procesa pri pogojih obratovanja</li></ul>
OKOLJEVARSTVO	<ul style="list-style-type: none"><li>• določanje emisijskih hitrosti</li><li>• napoved širjenja onesnaženja v zraku in vodi</li><li>• opredelitev socialnega in ekonomskega vidika</li><li>• ocenitev posledic hudih nesreč (požar, eksplozija, ipd.)</li></ul>

# Vrste modelov

Modele lahko razvrščamo na najrazličnejše načine, vendar jih v osnovi delimo na

fizične in  
abstraktne modele.

Slednje naprej delimo na

mentalne in  
simbolične.

## Fizični modeli

Fizični modeli so tridimenzionalne preslikave realnih sistemov. Lahko imajo statični značaj kot to velja za pomanjšane kopije realnih objektov (makete avtomobilov, letal, hiš, ipd.) in imitacijske modele (modeli atomskih struktur, molekul, ipd.). Njihova gradnja je pogosto draga, zamudna in nepraktična. Med fizične modele z dinamičnim značajem uvrščamo analogne modele, ki realni sistem zaradi določenih razlogov predstavljajo s pomočjo ustrezne analogije, in prototipe.

Slednji predstavljajo pomanjšane kopije laboratorijskih naprav in pilotnih obratov, miniaturne železnice, ipd. Nasploh imajo dinamični fizični modeli pomembno mesto na področju procesnega inženirstva.

## Mentalni modeli

Mentalni modeli se oblikujejo v človeški zavesti in vsebujejo subjektivne predstave vsakega posameznika na dogajanje v realnem svetu. Po značaju so izrazito hevristični[1] in imajo sposobnost neposrednega dojetja in zaznavanje bistva česa, kar je neodvisno od razumskega razčlenjevanja. Tovrstne modele je težko ovrednotiti, saj se jih običajno niti ne zavedamo. Prisotnost mentalnih modelov se odraža v naših pridobljenih izkušnjah in neposredno vplivajo na odločitve in ravnanja.

## Simbolični modeli

Izredno široko in pomembno skupino modelov tvorijo simbolični modeli, ki so veliko bolj dostopni za obravnavnje in ravnanje kot fizični modeli. Delimo jih na

- nematematične in
- matematične modele.

Nematematične modele, katerih skupna lastnost je ta, da je iz njih včasih težko dobiti enoumno in precizno informacijo, naprej delimo na

- verbalne (izrečeni ali zapisani opisi dogodkov, izkušenj, itd.)
- grafične (risbe, grafi, itd.) in
- shematične (diagrami poteka, prikaz vezij, zemljevidi, načrti, itd.).

# Klasifikacija matematičnih modelov

## Linearni in nelinearni modeli

Znano je, da ima vsak realni sistem vsaj do neke mere nelinearni značaj. Mnogokrat pa se pokaže upravičeno oz. koristno takšen problem linearizirati, kajti lokalno se da nelinearni problem v večini primerov dobro aproksimirati z linearnim. Z ustreznimi postopki tako dobimo linearni model, ki ga opisujejo linearne matematične strukture. V tem primeru velja zakon superpozicije<sup>[1]</sup>. V nasprotnem primeru so modeli nelinearni. Linearni model je mnogo uporabnejši in lažji za nadaljno obravnavo.

<sup>[1]</sup>Zakon superpozicije pravi, da če imamo npr. dve rešitvi linearnega problema, potem je tudi njuna vsota rešitev tega linearnega problema.

## Modeli s prostorsko neodvisnimi spremenljivkami (PNS) in prostorsko odvisnimi spremenljivkami (POS)

V splošnem delimo spremenljivke v dve skupini: neodvisne (npr. čas in dolžina) in odvisne (npr. koncentracija, temperatura, hitrost, itn.). Kadar v nekem trenutku vrednosti določene spremenljivke v vsaki točki procesnega sistema zanemarljivo odstopajo od njene povprečne vrednosti v tem sistemu, je takšna spremenljivka prostorsko neodvisna (angl.: "lumped variable"). Njihova značilnost je torej ta, da niso odvisne od prostorskih koordinat. Modele s PNS obravnavamo npr. v sistemih, za katere velja predpostavka idealnega mešanja. Tovrstne sisteme bomo imenovali sistemi PNS. Kadar pa želimo modelirati procesni sistem z neidealnim mešanjem moramo, ali sistem razdeliti na določeno število različnih področij (vsakega od njih lahko potem opišemo s PNS), ali pa vpeljati prostorske koordinate. V tem primeru govorimo o prostorsko odvisnih spremenljivkah - POS (angl.: "distributed variables") in sistemih POS. PNS vodijo do razvoja navadnih enačb (navadne diferencialne enačbe, diferencialno-algebrajske enačbe, algebrajske enačbe), modeli s POS pa nastanejo z razvojem parcialnih diferencialnih enačb.

## Zvezni in diskretni modeli

Definicijsko območje neodvisnih spremenljivk pri zveznih modelih je povezana množica točk (interval, pravokotnik, kroglja, itd.). Kadar zvezne spremenljivke nadomestimo z diskretnimi spremenljivkami, ki zavzamejo končno število vrednosti, dobimo diskretne modele. Čeprav je velika večina realnih procesov zveznega značaja, pa postaja diskretizacija modelov vedno bolj pomembna (uporaba numeričnih orodij).

## Stohastični in deterministični modeli

Stohastični modeli nastanejo, kadar pri opisu problema upoštevamo elemente naravnih naključnih dogodkov, ki jih tipično opišemo z uporabo statistične verjetnosti. Nekatere zveze med spremenljivkami pri tovrstnih modelih so torej podane s pomočjo statističnih vrednosti, medtem ko pri determinističnih modelih verjetnost dogodkov ne igra nobene vloge in njihov opis problemov povsem temelji na osnovi zveze vzroka in posledice. V realnih procesih so seveda naključni šumi in motnje vedno prisotni, stopnja njihovega vpliva na obnašanje sistema pa določa stohastični ali pa deterministični način modeliranja.

# Značilne vrste enačb za posamezne tipe modelov

TIP MODELA	VRSTA ENAČBE	
	STACIONARNI PROBLEM	DINAMIČNI PROBLEM
<b>LINEARNI</b>	linearne algebrajske enačbe	linearne navadne diferencialne enačbe
<b>NELINEARNI</b>	nelinearne algebrajske enačbe	nelinearne navadne diferencialne enačbe
<b><i>PNS</i></b>	algebrajske enačbe	navadne diferencialne enačbe
<b><i>POS</i></b>	eliptične parcialne diferencialne enačbe	parabolične parcialne diferencialne enačbe
<b>ZVEZNI</b>	algebrajske enačbe	navadne diferencialne enačbe
<b>DISKRETNi</b>	diferenčne enačbe	diferenčne enačbe
<b>STOHASTIČNI</b>	algebrajske / diferenčne enačbe	diferencialne / diferenčne enačbe
<b>DETERMINISTIČNI</b>	nelinearne algebrajske enačbe	navadne dif. en. / parcialne dif. enačbe



K matematičnem modeliranju lahko v glavnem pristopimo na dva osnovna, med sabo bistveno različna načina, tretji pristop pa predstavlja kombinacijo prvih dveh. Na osnovi teh pristopov lahko razdelimo matematične modele na

- mehanistične,
- eksperimentalne in
- kombinirane.

## Mehanistični modeli

Razvoj mehanističnih modelov temelji na osnovi matematičnega zapisa naravnih fenomenov oz. pojavov in mehanizmov kot so prenos snovi, toplote in gibalne količine. Mnogo vsakdanjih modelov na področju procesnega inženirstva izhajajo iz poglobljenega in detaljnega poznavanja osnovnih mehanizmov. Matematični model je lahko zaradi kvantitativno formalnega zapisa sistema zelo kompleksen, kar pa modelu jemlje značaj uporabnosti. Zato so skrbno pretehtane in dobro argumentirane zanemaritve, poenostavitve in smiselne predpostavke tisti elementi procesa modeliranja, ki omogočajo kompromis med natančnostjo in uporabnostjo modela.

## Eksperimentalni modeli

Drugi, alternativni pristop mehanističnemu razvoju matematičnega modela je posledica pomanjkanja znanja o realnem procesu. V tem primeru uporabimo za izgradnjo modela izmerjene podatke vhodov in izhodov procesnega sistema. Matematično strukturo in njene parametre določimo tako, da so odzivi modela čimbolj podobni merjenim odzivom ob enakih vhodnih pogojih. Glavna naloga tovrstnega modeliranja je torej zbiranje uporabnih informacij za identifikacijo modela, ki so posledica stimuliranja sistema. Ker je spoznavanje procesa možno le na osnovi eksperimentalnih podatkov oz. vhodno izhodnih informacij, ne pa tudi iz osnovnih fizikalno kemijskih mehanizmov, se tovrstni modeli imenujejo eksperimentalni modeli in, še bolj razširjeno, modeli črnih škatel (angl.: "black box models").

## Kombinirani modeli

Modeli, ki so po svoji naravi in značilnostih zgolj mehanistični ali eksperimentalni, so v procesnem inženirstvu zelo redki. V praksi se največkrat uporablja kombinirano modeliranje, ki sloni na dobrih lastnostih mehanističnega in eksperimentalnega pristopa k izgradnji modelov. Na osnovi predhodnih inženirskih znanj o nekem realnem procesu se definira struktura modela in oceni vrednosti nekaterih parametrov modela. Nato pa se za razvoj modela dokonča z uporabo eksperimentalnih podatkov. Pri tem določimo kinetične in transportne mehanizme in njihove parametre kot tudi ovrednotimo model glede na specifičnosti obratovanja. Te kombinirane modele imenujemo tudi modeli sivih škatelj (Angl.: "grey box models").