

OBSAH

1. ÚVOD	5
2. SYSTÉMOVÝ PŘÍSTUP K ŘEŠENÍ PROBLÉMŮ CHEMICKO-TECHNOLOGICKÝCH PROCESŮ	7
2.1 POJMY SYSTÉM A MODEL	7
2.2 CÍLE A PROSTŘEDKY SYSTÉMOVÉHO PŘÍSTUPU V CHEMICKÉM INŽENÝRSTVÍ	10
3. SIMULACE STACIONÁRNÍHO STAVU CHEMICKO-TECHNOLOGICKÝCH PROCESŮ	12
3.1 CÍLE SIMULACE, ROZDÍL MEZI SIMULAČNÍMI A NÁVRHOVÝMI VÝPOČTY	12
3.2 ETAPY ŘEŠENÍ SIMULAČNÍ ÚLOHY	13
3.3 MODEL JEDNOTKOVÝCH OPERACÍ PRO STACIONÁRNÍ SIMULACI	17
3.4 SEKVENČNĚ MODULÁRNÍ METODY	21
3.5 ROVNICOVĚ ORIENTOVANÉ METODY	30
3.6 PŘIZPŮSOBENÍ MODELU REÁLNÉMU CHOVÁNÍ VÝROBNY	38
3.7 VYHODNOCENÍ VÝSLEDKŮ, VYVOZENÍ ZÁVĚRŮ PRO PRAXI	39
4. SIMULAČNÍ PROGRAMY	41
4.1 STRUKTURA SIMULAČNÍCH PROGRAMŮ	42
4.2 KNIHOVNA JEDNOTKOVÝCH MODULŮ	44
4.3 DATABANKA FYZIKÁLNĚ-CHEMICKÝCH VLASTNOSTÍ	46
4.4 ŘÍZENÍ SIMULAČNÍHO VÝPOČTU	47
4.5 KOMUNIKACE S UŽIVATELEM	48
4.6 SLUŽBY UŽIVATELI	50
5. SIMULAČNÍ PROGRAM MAX	52
5.1 IMPLEMENTACE PROGRAMU MAX	52
5.2 PRÁCE S PROGRAMEM MAX - ÚVODNÍ PŘÍKLADY	54
5.2.1 Rovnovážná destilace	54
5.2.2 Destilační kolona pro recyklaci methylcyklohexanu	57
5.2.3 Sestavení topologie modelu grafickými prostředky	65
5.3 VÝPOČETNÍ REŽIMY PROGRAMU MAX	68
5.3.1 Standardní režim	69
5.3.2 Režim generování tabulek (TGS - Table Generation System)	70
5.3.3 Odhad vlastností látek z jejich struktury (PCES - Property Constant Estimation System)	72
5.3.4 Odhad vlastností látek z naměřených dat (DRS - Data Regression System)	78
5.4 POPISY JEDNOTKOVÝCH MODULŮ	81
5.4.1 Mísiče a děliče	82
5.4.2 Destilace a extrakce (separační procesy)	86
5.4.3 Rovnovážné stupně, ohříváče a tepelné výměníky	94
5.4.4 Chemické reaktory	98
5.4.5 Čerpadla a kompresory	118
5.4.6 Manipulátory	120
5.5 DATABANKA A MODEL Y PRO VÝPOČET FYZIKÁLNĚ-CHEMICKÝCH VLASTNOSTÍ	121

5.6 SPECIÁLNÍ FUNKCE PROGRAMU	129
5.6.1 Citlivostní analýza.....	129
5.6.2 Řízená simulace.....	132
5.6.3 Použití FORTRANských příkazů v programu MAX (In-Line FORTRAN).....	134
5.6.4 Stanovení vlastní sekvence výpočtu.....	141
5.7 SIMULAČNÍ PROGRAM ASPEN PLUS.....	142
5.7.1 Úvod.....	142
5.7.2 Jednotkové moduly.....	142
5.7.3 Fyzikálně-chemické vlastnosti	143
5.7.4 Postup při zadávání simulační úlohy v programu ASPEN PLUS.....	149
6. PŘÍKLADY SIMULAČNÍCH ÚLOH.....	157
6.1 PŘÍKLAD 1 - JEDNODUCHÁ REKTIFIKACE.....	157
6.2 PŘÍKLAD 2 - SYSTÉM REKTIFIKAČNÍCH KOLON.....	160
6.3 PŘÍKLAD 3 - VYUŽITÍ ZBYTKOVÉHO TEPLA	164
6.4 PŘÍKLAD 4 - JEDNODUCHÝ REAKTOR (PEC NA SPALOVÁNÍ SÍRY).....	168
6.5 PŘÍKLAD 5 - POROVNÁNÍ REAKTORŮ RŮZNÉHO TYPU (SIMULACE VÝROBY AKROLEINU)...	172
6.6 PŘÍKLAD 6 - OPTIMALIZACE REAKČNÍHO UZLU (CHLORACE UHLOVODÍKŮ).....	176
6.7 PŘÍKLAD 7 - SYSTÉMY S ELEKTROLYTY (VÝROBA DUSIČNANU DRASELNÉHO).....	180
7. ŘEŠENÍ KOMPLEXNĚJŠÍCH SIMULAČNÍCH ÚLOH.....	186
7.1 TECHNOLOGIE KYSELINY DUSIČNÉ	186
7.2 PROVOZ PRO ZKAPALŇOVÁNÍ A DĚLENÍ VZDUCHU.....	194
LITERATURA	214
REJSTŘÍK.....	216