

Prosessien monifaasilaskenta

Säästää energiaa ja ympäristöä

■ **VTT:ssä kehitetty ainutlaatuinen laskentaohjelmisto on avannut mahdollisuuden energiaa ja ympäristöä säästäville prosessiratkaisuille eri puolilla maailmaa.**

Päivi Ikonen

Henkilökohtaiset tietokoneet vakiinnuttivat paikkansa prosessiteollisuuden insinöörien työpöydillä 1990-luvulla. Teollisuudessa toimiva yksittäinen asiantuntija on siitä lähtien voinut etsiä ratkaisuja ongelmiinsa tietokoneen avulla.

Prosessikemian laskentaohjelmat soveltuivat tuolloin kuitenkin vain rajattuihin tarkoituksiin. Lisäksi ne edellyttivät käyttäjiltään vihkiytymistä erikoissovellusten yksityiskohtiin ja usein myös paneutumista ohjelmointitekniikoihin.

”Siksi tarvittiin uudenlainen ohjelmisto, joka mahdollistaisi kattavan kemiallisten tasapainojen laskennan mutta olisi samalla yksinkertainen käyttää”, muistelee VTT:n tutkimusprofessori **Pertti Koukkari**.

Koukkarin johtama tutkijaryhmä ryhtyikin yhdessä suomalaisen prosessiteollisuuden yritysten kanssa kehittämään uutta lähestymistapaa asiaan.

Lähtökohdaksi valittiin tuolloin vielä epätavallinen termodynaaminen systeemitarkastelu, joka reaktioyhtälöiden, tasapainovakioiden ja tilanyhtälöiden asemasta nojaa yhdisteiden muodostumisenergioiden käyttöön.

”Muodostumisenergian minimointi tasapainoon pyrkivälle sys-

teemille korvaa mekanistisen reaktioyhtälötarkastelun”, Koukkari kuvailee.

Uusi menettelytapa teki mahdolliseksi käyttää laskentamalleissa todellisuutta vastaavaa määrää faaseja ja yhdisteitä ilman tilanyhtälöiden asettamia rajoituksia. Termodynaaminen perusta antoi lisäksi mahdollisuuden yleisten muodostumisenergiatietokantojen käyttöön, joten myös tarkasteltavat aineyhdistelmät voitiin valita vapaasti.

Menestys maailmalla

Ennakkoluuloton ratkaisu osoittautui onnistuneeksi.

ChemSheet-nimen saaneesta uutuudesta tuli maailmanlaajuinen menestys ja Suomesta pian johtava maa kemiallis-termodynaamisen monifaasilaskennan soveltamisessa käytännön prosessiratkaisuihin.

VTT:n lisäksi kansainvälisesti tunnettuja sovelluksia ovat kehittäneet muun muassa Åbo Akademi ja Outotec.

ChemSheet-ohjelmalle löytyi yhteistyökumppani Saksan Aachenista, jossa sikäläisen teknillisen yliopiston spin off -yritys GTT Technologies kehitti termodynaamisia laskentaohjelmistoja ja tie-

tokantoja globaaliin levitykseen. Suomalaisohjelmisto on kuulunut tuoteperheeseen vuodesta 1999.

Myös toinen VTT:n kehittämä ohjelma, prosessiteollisuuden rumpu-uunien simulointiin erikoistunut KilnSimu kaupallistettiin yhdessä GTT:n kanssa. Molempia ohjelmia on myyty yli 20 maahan, ja niitä käyttävät sekä tutkimuslaitokset että teollisuus.

E erityisen kysytyjä kaksi suomalaisohjelmaa ovat olleet Japanin prosessiteollisuudessa, Koukkari kertoo.

”Parhaillaan niitä sovelletaan maan sementtiteollisuuden yhteisessä valmistusprosessien raakaaine- ja energiatehokkuuden nostamiseen tähtäävässä monivuotisessa hankkeessa.”

Ohjelmistojen kehittäminen ja hiominen on menestyksen myötä jatkunut. Pertti Koukkari ja VTT:n erikoistutkija **Risto Pajarre** saivat vuonna 2007 tiedelehti *Calphad Journalin* parhaan julkaisun palkinnon kehittämästään uudesta menetelmästä, joka ottaa huomioon sekä kineettisesti hitaiden reaktioiden etenemisasteen että fysikaaliset vuorovaikutustekijät Gibbsin vapaan energian minimoinnissa.

Palkittu laskentatekniikka laajentaa merkittävästi termodynaamisen



Turkulaisen Process Flow Oy:n Eero Immonen (vas.) ja Kenneth Eriksson sekä VTT:n Pertti Koukkari tarkastelevat kumppanusten yhdessä kehittämiä uuden sukupolven simulointiohjelmaa kemianteollisuuden rumpu-uunien optimointiin.

VTT

menetelmän käyttöaluetta. Se on johtanut useisiin sovelluksiin sekä materiaaliteieteissä että käytännön prosessiratkaisuissa.

Enemmän vähemmästä

Parhaimmillaan monifaasilaskenta on silloin, kun kehitetään harppauksellisia parannuksia prosessien energia- ja materiaalihokkuuteen.

Ensimmäiset tulokset uusilla menetelmillä saatiin jo 1990-luvulla esimerkiksi Kemira Pigments Oy:n tuotantolaitoksissa sekä Suomessa että Yhdysvalloissa. Silloi-

sella USA:n tehtaalla kyettiin ilman merkittäviä lisäinvestointeja nostamaan tuotannon kapasiteettia jopa 40 prosenttia.

”Myös kotimaassa ollaan tyytyväisiä VTT:n kehittämien laskentaohjelmien tuomaan apuun prosessiuudistusten tukena”, vakuuttaa nykyisen Sachtleben Pigmentsin prosessikehityksen päällikkö **Joni Pärnänen**.

Sachtleben on hiljattain toteuttanut Porissa laajan kehitysohjelman, jonka tuloksena tehtaiden valmistuskapasiteetti nostettiin nykyiseen 135 000 tonniin vuodessa.

Paperinvalmistuksen kemiassa Akilleen kantapää on pitkään ollut vaikeus hallita luotettavasti koneelle tulevan massan pH-arvoa.

”Eri tavoin käsiteltyjen kuitujen vaihteleva happo-emäsaktiivisuus aiheuttaa ioninvaihtoilmiön, jonka tuloksena vettä sisältävän kuidun ja suodoksen välille syntyy sähkökemiallinen potentiaaliero”, Koukkari kuvailee ongelmaa.

Konemassan alkaliteetin hallintaan liittyvät ajettavuusongelmat korostuivat vuosituhannen alussa,

» » »

Laskentaohjelma palvelee myös jätteenpolttoa

Tiukentuvat vaatimukset jätteiden hyötykäytöstä ovat lisänneet jätteenpolttolaitosten osuutta energiantuotannossa myös Suomessa.

Vaikka jotkin jätevirrat soveltuvatkin poltettaviksi yksinään, energialaitokset käyttävät harvoin vain yhtä polttoainetta. Lähes poikkeuksetta käytössä on usean komponentin seos, jonka koostumus riippuu muun muassa eri jakeiden saatavuudesta ja hinnasta. Myös seoksen polttoarvon on oltava riittävä ja polttoprosessin häiriötön.

Tällaisten sekajakeiden polttokemia asettaa haasteita sekä laitosten operoinnille että materiaalien kestävyydelle.

Räätälöityä toimintaa

Muun muassa energiateknologian palveluja toimittavan Valmetin suunnittelijat määrittävät työnsään toimintaparametrejä bio- ja jätepolttainetta käyttäviin kattilalaitoksiin.

Työkaluna heillä on ChemSheet-ohjelman avulla toteutettu prosessisuunnittelun SteaMax-järjestelmä, jonka ansiosta asiakkaalle voidaan tarjota juuri tätä varten räätälöidyt palvelut.

”Järjestelmä perustuu Valme-

tissa koottuun tietokantaan ja on vuosien kehitystyön tulosta. Sen toisena tukijalkana on kuitenkin monifaasitermodynamiikan kautta syntynyt polttoprosessien ymmärtäminen”, kertoo **Sonja Enestam**, aiheesta itsekin Åbo Akademiassa väitellyt tekniikan tohtori.

Järjestelmän ansiosta yhtiön asiakaspalvelu voi myös ohjeistaa polttolaitoksen henkilökuntaa muuttamaan ajo-olosuhteita siten, että toiminta pysyy laatu- ja käyttöturvallisuusarvojen puitteissa.

Tärkeintä on kyetä välttämään haittavaikutukset, joita biopolttaineen ja jättejakeiden sisältämistä yhdisteistä aiheutuu. Niitä ovat käyttöhäiriöt ja laitoksen kriittisten komponenttien, esimerkiksi lämmönvaihtimien käyttöiän lyheneminen.

Korroosiota ja lämmönvaihtopintojen likaantumista aiheuttavia yhdisteitä muodostavat etenkin kloori sekä alkali- ja raskasmetallit.

Järjestelmä kertoo yhdisteet ja faasit, joita näistä ja muista prosessin alkuaineista muodostuu lämmönvaihtokanaviin. Lisäksi ohjelma määrittää kulloisissakin koostumuksissa turvallisesti saa-

tavan maksimin höyrylämpötilalle.

Tieto on tärkeä, sillä vaikka laitoksen hyötysuhde on suoraan verrannollinen maksimilämpötilaan, ajossa pitää kuitenkin välttää liian korkeiden lämpötilojen aiheuttamat korroosioauriot.

Nopeat toimintaohjeet

Prosessikemian ja lämmönvaihtimien toimintalämpötilat on kytketty asiakkailta koottuun laitostietokantaan.

”Siten voimme välittömästi antaa toimintaohjeita asiakkaan henkilöstölle, mikäli laitoksessa ilmenee muutoksia esimerkiksi polttoaineseoksen koostumuksessa”, Enestam kertoo.

Järjestelmän avulla yhtiön suunnittelijat voivat myös auttaa asiakkaita vaikeiden seosten käytössä.

Ohjelmasta on hyötyä jo laitosten toimitusvaiheessa.

”Tiedämme, kuinka mitoitaa lämmönvaihtimet ja valita käyttöön kustannuksiltaan edullisimman mutta silti ajo-olosuhteet kestävän teräslaadun”, kuvailee kehitysinsinöörinä Valmetissa työskentelevä **Niklas Engblom**.



kun tehtaat alkoivat enenevässä määrin käyttää kalsiittipitoisia täyteaineita ja siirtyivät neutraalijoon.

Termodynaaminen ChemSheet-tekniikka mahdollisti ioninvaihtopotentialin määrittämisen titratujen kuitunäytteiden perusteella. Sitä käytettiin laajasti neutraalikonversion toteutusvaiheessa kemikaloinnin tukena muun muassa kontrolloitaessa sulpussa esiintyvää liukoista kalsiumia.

Tämän päivän kehityshaaste on Koukkarin mukaan täyteaineen inline -valmistus, jossa karbonaatti saostetaan hiilidioksidilla suoraan paperikoneen putkilinjassa. VTT:n tutkijat ratkovat haastetta yhdessä tekniikkaa kehittävän savonlinnalaisen Wetend Technologies Oy:n kanssa.

”Wetendin pilottikokeissa saatiin kesällä merkittäviä uusia tuloksia”, Koukkari kehaisee.

Tekniikalla valmistettu täyteaine tuottaa hänen mukaansa teollisuus-

delle huomattavia etuja. Aine muodostaa lujia kuitu-karbonaattikomposiittirakenteita ja korvaa osan paperin tai kartongin arvokkaasta kuidusta. Lisäksi tehtaan vesikierto puhdistuu.

Cleantechin tukena

Myös prosessiteollisuuden tutkimus- ja kehitystyön pysyvänä tavoitteena on hiilijalanjäljen pienentäminen. Tuotantovolyymien ja tuotteiden laadun on kuitenkin säi-



Valmet

Polttoaineseoksen hallinta sujuu Valmetin SteaMax-järjestelmän avulla muun muassa Keravan lämpövoimalassa. Valmet on toimittanut yli 200 samankaltaista leijukerroslaitosta eri puolille maailmaa.

lyttävä ennallaan – ja muutosten myötä mielellään jopa parannuttava.

Tutkimuksen avulla pyritään säilyttämään prosessin toimintaparametrit samalla, kun fossiilinen lähtöaine korvataan uusiutuvalla tai kierrätetyllä materiaalilla.

”Hyvä esimerkki on sinkin kierrätyksessä laajasti sovellettu rumpu-uuniteknikka, jossa prosessin uusi, laskentaan perustuva ajotapa voi vähentää fossiilisen hiilen käyttöä jopa 40 prosenttia”, Koukkari kertoo.

Uusia ympäristöä ja energiaa säästäviä ratkaisuja kehitetään nykyään etenkin cleantech-sovelluksiin. Koukkarin mukaan isotkaan parannukset eivät tule monifaasikemian tutkijoille yllätyksenä.

”Pääosa edelleen käytössä olevien prosessien perusratkaisuista on kehitetty aikana, jolloin nykyisiä tietokonepohjaisia menetelmiä ei ollut käytettävissä”, konkaritutkija muistuttaa. □



Kotimaista laatua
pohjasta pintaan



www.kiilto.com