

**Tekniikan kandidaatintyö**

**Prosessisimuloinnin hyödyt tuotanto-  
organisaatiolle**

Lappeenranta 2021

Viivi Gummerus

LUT-Yliopisto  
LUT School of Engineering Science  
Kemiantekniikan koulutusohjelma

*Viivi Gummerus*

## **Prosessisimuloinnin hyödyt tuotanto-organisaatiolle**

Kandidaatintyö

2021

Työn ohjaaja: Tutkijaopettaja Ritva Tuunila

## TIIVISTELMÄ

LUT-yliopisto  
School of Engineering Science  
Kemiantekniikan koulutusohjelma

Viivi Gummerus

### **Prosessisimuloinnin hyödyt tuotanto-organisaatiolle**

34 sivua, 3 kuvaa, 2 taulukkoa

Työn ohjaaja: Ritva Tuunila

Hakusanat: prosessisimulointi, kemianteollisuus, tuotanto-organisaatio, koulutussimulaattori, simulointiohjelmit, suunnittelu, optimointi

Tämän työn tarkoituksena oli tutkia simulointiohjelmistojen hyötyjä eri tuotanto-organisaation jäsenille sekä millaisia vaikutuksia onnistuneella simuloinnilla on. Tuotanto-organisaatioon on tässä työssä sisällytetty insinöörit, johto sekä tuotannon työntekijät. Onnistuneena simulointina voidaan pitää sellaista, mikä vastaa käyttäjänsä tarpeisiin ja jonka tuloksia voidaan hyödyntää oikeassa prosessissa. Simulointiohjelmistoilla mm. voidaan havaita erilaisia prosessissa ilmeneviä poikkeamia, joita voidaan hyödyntää vaara-analyysien teossa sekä riskien hallinnassa.

Prosessisimulointi on yksi prosessisuunnittelun vaiheista ja sen päätarkoituksena on ratkaista prosessissa esiintyviä aine- sekä energiataseita. Simulointiohjelmistoilla on muitakin käyttökohteita, joita eri tuotanto-organisaation jäsenet voivat hyödyntää. Yrityksen johto voi hyödyntää simuloinnista saatuja tuloksia päätösten teon tukena, esimerkiksi prosessin kannattavuuden arvioinnissa. Operaattorit käyttävät koulutuksessaan operaattoreiden koulutussimulaattoreita, joilla voidaan harjoitella erilaisia poikkeamatilanteita turvallisesti. Kemianteollisuuden yrityksessä kuitenkin pääkäyttö simulointiohjelmistoilla on insinööreillä. Ohjelmit tarjoavat insinööreille nopeamman ja helpomman tavan tutkia ja suunnitella prosesseja sekä niiden käyttäytymistä.

## Sisällysluettelo

<b>1</b>	<b>Johdanto .....</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Prosessisimulointi.....</b>	<b>5</b>
2.1	Simuloinnin käyttökohteet .....	7
2.2	Kemian- ja puunjalostusteollisuudessa yleisimmin käytetyt simulointiohjelmistot .....	9
<b>3</b>	<b>Simuloinnin käyttö kemianteollisuuden yrityksissä .....</b>	<b>12</b>
3.1	Simuloinnin vaikutus turvallisuuteen.....	14
3.2	Simuloinnin hyödyt tuotannon työntekijöiden näkökulmasta.....	16
3.3	Simuloinnin hyödyt insinöörien näkökulmasta.....	18
3.4	Simuloinnin hyödyt johdon näkökulmasta.....	19
<b>4</b>	<b>Esimerkkejä simuloinneista ja niiden käytöstä.....</b>	<b>21</b>
<b>5</b>	<b>Simuloinnin tulevaisuus .....</b>	<b>25</b>
<b>6</b>	<b>Johtopäätökset .....</b>	<b>28</b>
<b>7</b>	<b>Lähteet .....</b>	<b>31</b>

## 1 Johdanto

Prosessisimulointi on tärkeä osa kemianteollisuuden yritysten toimintaa. Sen avulla on mahdollista suunnitella sekä optimoida prosesseja. Simulointiohjelmistot ovat kuitenkin paljon monipuolisempia ja niiden eri käyttökohteiden arvoa on alettu ymmärtämään enemmän. Prosessisimuloinnin on yleisesti ajateltu olevan enimmäkseen insinöörien työväline energia- ja ainetaseiden laskemisessa, esimerkiksi kun suunnitellaan uutta prosessia.

Energia- ja ainetaseiden laskenta tapahtuu prosessin virtauskaavion avulla. Virtauskaaviot muodostetaan yhdistämällä prosessissa olevat laitteet energia- ja ainevirroilla. (Towler & Sinnott 2013). Kun virtauskaavio on saatu mallinnettua, voidaan jo prosessin suunnitteluvaiheessa laskea alustavia kannattavuuteen liittyviä laskelmia. Saatujen kannattavuuslaskelmien tulosten perusteella yrityksen johto voi esimerkiksi päättää kannattaako prosessiin investoida vai ei.

Onkin tärkeää tiedostaa, että simulointiohjelmistoilla voidaan tehdä muutakin kuin vain laskea kyseisiä taseita. Simulointiohjelmistoilla on tärkeä rooli riskien hallinnassa sekä vaarojen analysoinnissa (Hangos & Cameron 2001). Vaara-analyysit sekä riskien hallinta ovat erittäin tärkeitä osia prosessien kehittämisessä jo henkilöturvallisuuden takia, mutta myös yrityksen toimivuuden kannalta. Edellä mainittujen käyttökohteiden lisäksi simulointiohjelmistoja käytetään myös tutkimuksen ja kehityksen tukena sekä tuotannon suunnittelun apuna tutkittaessa prosessin kannattavuutta. Tätä voidaan hyödyntää myös silloin kun prosessi on toiminnassa. (SimulateLive.com 2017)

Tämä työ on toteutettu kirjallisuustyönä ja sen tarkoituksena on selvittää ketkä tuotanto-organisaation jäsenet voivat hyödyntää simulointiohjelmistoja sekä niiden tuloksia työssään ja miten. Tuotanto-organisaatioon sisällytetään tässä työssä Golwalkaria (2016) mukaillen tuotannon työntekijät eli operaattorit, insinöörit, tuotantopäällikkö sekä toimitusjohtaja. Työssä tarkastellaan myös, millaisia vaikutuksia onnistuneella simuloinnilla on sekä mitä

onnistunut simulointi käytännössä tarkoittaa. Tämän lisäksi selvitetään, miten simulointiohjelmistoja voidaan hyödyntää riskien hallinnassa sekä vaara-analyysien teossa.

Simulointiohjelmistoja voidaan käyttää moniin eri tarkoituksiin eri aloilla, kuten rakennusteollisuudessa, elintarviketeollisuudessa, kemianteollisuudessa ja puunjalostusteollisuudessa. Esimerkiksi rakennusalalle EQUA valmistajan toimesta on kehitetty simulointiohjelmistoja, joiden avulla voidaan simuloida muun muassa rakennuksiin liittyviä teknisiä ratkaisuja sekä energiajärjestelmiä (EQUA Simulation AB 2020). Kemianteollisuudessa simulointiohjelmistoja käytetään yleisesti eri prosessien suunnittelussa ja optimoinneissa (De Tommaso et al. 2020). Vaikka simulointiohjelmistoja voidaan hyödyntää eri aloilla, keskitytään tässä työssä kemianteollisuuden yrityksiin.

Edellä mainittujen lisäksi työn tarkoituksena on tutkia simulointiohjelmistojen tulevaisuutta sekä mihin tarkoituksiin niitä voi tulevaisuudessa käyttää, esimerkiksi miten simulointiohjelmistoja voidaan käyttää toisen ohjelmiston tai virtuaalitodellisuuden kanssa. Tämän lisäksi esitellään kolme esimerkkiä simulointiohjelmistojen käytöstä, joiden avulla voidaan hahmottaa simulointien roolia sekä niistä saatavia hyötyjä.

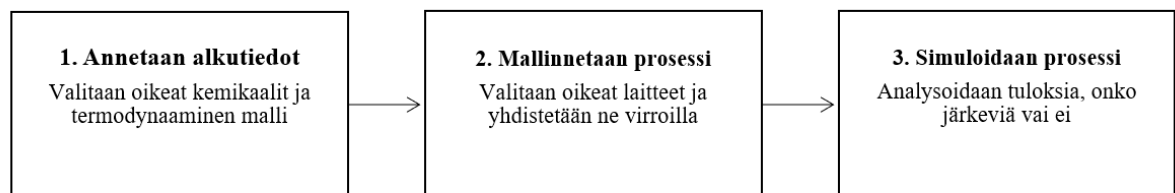
## 2 Prosessisimulointi

Prosessisimulointi on yksi tärkeimpiä työvälineitä prosessisuunnittelussa (Dimian, Baldea & Kiss 2019). Simulointiohjelmistojen käyttö painottuu prosessien suunnitteluun ja optimointiin (De Tommaso et al. 2020). Niitä käytetään prosessien mallintamisessa sekä niiden käyttäytymisen tarkkailussa tietyissä olosuhteissa tasapainotilassa (Chaves et al. 2016). Ilman simulointiohjelmoja erilaisten ongelmien ratkaiseminen hankaloituisi huomattavasti. Esimerkiksi prosessin optimointiin kuluisi huomattavasti enemmän aikaa sekä resursseja. (Upreti 2017.)

Simulointiohjelmistojen päätarkoituksena on ratkaista prosessissa esiintyviä aine- sekä energiataseita (Towler & Sinnott 2013). Tämä tapahtuu matemaattisella mallinnuksella. Simulointiohjelmoilla mallinnetaan erilaisia tutkittavia prosesseja (De Tommaso et al. 2020). Näiden matemaattisten mallien ratkaiseminen perustuu useimmiten iteratiivisiin laskentamenetelmiin. (Upreti 2017.) Iteratiivisen laskennan tarkoituksena on käydä läpi laskennallisia kierroksia niin kauan kunnes saavutetaan prosessin tasapainotila. Iteroinnissa valitaan tietty katkaisuvirta, jolle annetaan joku lähtöarvo, kuten virtatieto. Tämän jälkeen ratkaistaan prosessivirrat annettujen lähtötietojen perusteella ja verrataan katkaisuvirran arvattua ja laskettua arvoa toisiinsa. Tutkitaan arvioitujen arvojen sekä laskettujen arvojen eroa niin kauan kunnes niiden välinen ero on tarpeeksi pieni. (Chaves et al. 2016.)

Prosessin mallinnukseen liittyvät yksikköprosessien matemaattiset mallit voivat sisältää kolmea eri yhtälötyyppiä; differentiaalin algebraalinen yhtälö, epälineaarinen yhtälö sekä lineaarinen yhtälö. Näiden yksikköprosessien toimintaa kuvaavilla yhtälöillä mallinnetaan simuloinnissa muun muassa laitteiden toimintaa, fysikaaliskemiallisia ominaisuuksia sekä yhteyksiä laitteiden ja eri toimintojen välillä. Kaikki nämä tiedot yhdistetään prosessin virtauskaaviossa kytkemällä eri laitteet virtaviivojen avulla toisiinsa. (Chaves et al. 2016.) Simuloitavan prosessin kokonaismalli saadaan luotua yhdistämällä eri osaprosessien mallit.

Kaupalliset ohjelmistot sisältävät valmiita matemaattisia malleja erilaisista yksikköprosesseista. Tämän lisäksi ne tarjoavat myös toimintoja, joiden avulla käyttäjä voi käyttää ja lisätä esimerkiksi laboratoriomittausten perusteella kehitettyjä malleja silloin, kun valmiista malleista ei löydy haluttua yksikköprosessin mallia. (Towler & Sinnott 2013.) Simulointiongelman ratkaisujärjestys yleisellä tasolla voidaan esittää kuvan 1 mukaan lohkoakaaviomuodossa.



Kuva 1 Lohkokaavioesitys simulointiongelman ratkaisun järjestyksestä yleisesti. (Mukailtu Foo & Elyas 2017)

Simulointiohjelmistoilla voidaan simuloida suurempia prosessikonaisuuksia, mutta myös yksittäisten laitteiden toimintaa. Kuten kuvassa 1 on esitetty, valitaan ensimmäisessä vaiheessa ennen varsinaista simulointia käytettävät kemikaalit sekä termodynaaminen malli. Tämän jälkeen valitaan prosessissa olevat laitteet ja yhdistetään ne toisiinsa virroilla. Lopuksi ennen simulointia virtauskaaviossa olevien laitteiden ja eri virtauksien tietoihin lisätään tarvittavia arvoja, kuten prosessissa esiintyvät lämpötilat ja paineet sekä syöttövirtojen määrät. (Foo & Elyas 2017.)

Tarvittavien tietojen syöttämisen ja prosessin virtauskaavion mallintamisen jälkeen, voidaan prosessi laskea. Simuloinnin jälkeen analysoidaan saatuja tuloksia ja pohditaan niiden järkevyyttä. (Foo & Elyas 2017.) Simuloinneista saatuja tuloksia voidaan tarkastella eri tavoin, kuten kaavioilla, kuvaajilla tai pylväsdiagrammeilla. Tuloksien tarkastelumenetelmä riippuu kuitenkin prosessista ja tutkittavasta asiasta. (Upreti 2017.) Tutkittava asia voi olla esimerkiksi lämpötilan muutoksen vaikutus tietyn aineen puhtauteen. Tätä voidaan tarkastella kuvaajan avulla, missä tutkittava muuttuja esitetään lämpötilan funktiona.



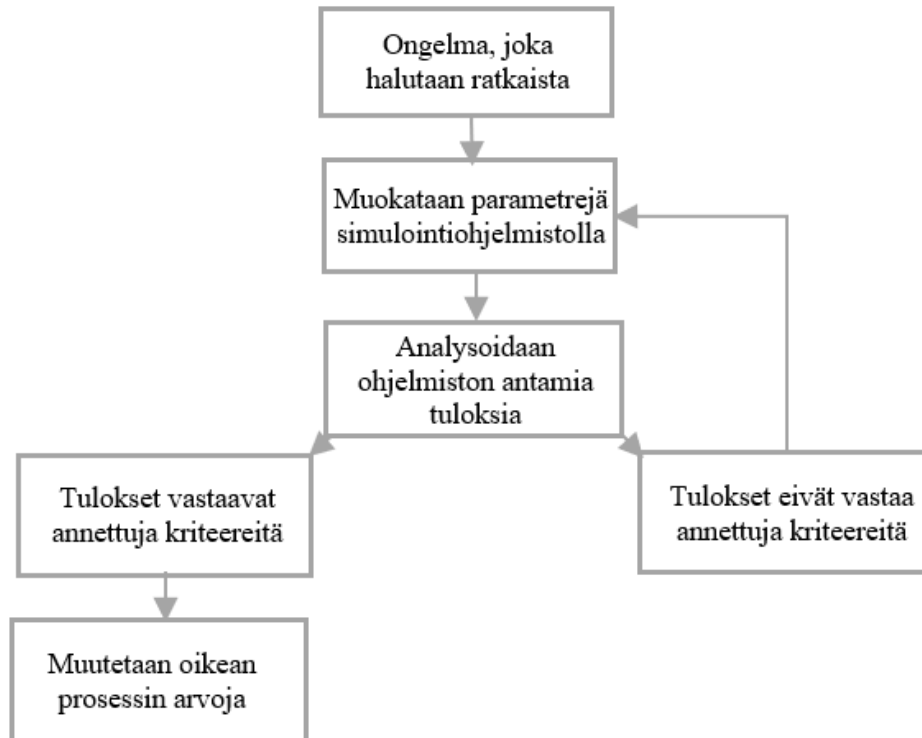
Kaupalliset kemianprosessien simulointiin tarkoitetut simulointiohjelmit sisältävät valmiita malleja useimmista kemian yksikköoperaatioista, kuten reaktoreista, tislaukolonneista sekä lämmönsiirtimistä. Monissa ohjelmistoissa on nykyisin myös malleja tyypillisistä kemian prosesseissa esiintyvistä kiintoaineprosesseista, joka laajentaa huomattavasti ohjelmiston käyttömahdollisuuksia, koska monet prosessit sisältävät myös kiintoainevirtoja. Yksikköoperaatioiden mallien lisäksi ohjelmistoihin sisältyy suurin osa termodynaamisten ja fyysisten ominaisuuksien malleista. (Towler & Sinnott 2013.) Simulointiohjelmistoihin kuuluu myös kattavat aineominaisuustietopankit, jotka sisältävät erilaisia laskennassa tarvittavia kemiallisten komponenttien aineominaisuustietoja (Foo & Elyas 2017). Ohjelmistojen sisältämät kattavat datatietopankit mahdollistavat monien erilaisten kemianteollisuuden prosessien simuloimisen ja tutkimisen.

## **2.1 Simuloinnin käyttökohteet**

Simulointiohjelmistoilla on laajasti erilaisia käyttökohteita, joita hyödynnetään kemianteollisuudessa. Peruseriaatteena voidaan pitää aine- ja energiataseiden laskemista, mutta simulointia voidaan hyödyntää taselaskentaa laajemminkin. Chaves et al. (2016) mukaan ohjelmistojen eri sovellukset ja käyttökohteet eivät ole kehittyneet täysin tyhjästä vaan ne ovat kehitetty vastamaan erilaisia tarpeita, joita kemianteollisuudesta on löytynyt. Näitä tarpeita ovat muun muassa energialähteiden parempi käyttö, kustannusten vähentäminen sekä prosessin hallinnan parantaminen. Prosessien optimoinnilla voidaan vastata tarpeeseen vähentää kustannuksia ja saavuttaa energialähteiden tehokasta hyödyntämistä. Tämän lisäksi hyvillä simulointiohjelmistoilla voidaan myös tehdä alustavia kustannuslaskelmia sekä mitoittaa laitteita. (Chaves et al. 2016.)

Eri teollisuuden aloille on kehitetty omia simulointiohjelmistoja vastaamaan niiden vaatimia tarpeita. Kemianteollisuudessa käytettyjä simulointiohjelmistoja ovat muun muassa ChemCAD, Aspen Plus, ProMax sekä Design II, kun taas puunjalostusteollisuuden tarpeisiin kehitettyjä ohjelmistoja ovat esimerkiksi Balas, FlowMac sekä Apros Paper. Prosessisimuloinnilla käyttäjä voi saavuttaa erilaisia tavoitteita, joita on hankala saavuttaa

ilman ohjelmistoa. Prosessisimuloinnin avulla voidaan tutkia prosessia turvallisesti vaarantamatta ympäristöä tai työntekijöitä. Simulointiohjelmistoilla prosessien arviointi sekä tutkiminen on myös halvempaa. (Anwar 2011.) Kuvassa 2 on esitettyä yksinkertainen kulku siitä, miten toimitaan, kun havaitaan jokin ongelma, joka halutaan ratkaista.



Kuva 2 Toimintamalliesimerkki prosessiongelman ratkaisemiseksi simuloimalla.

Ympäristön näkökulmasta eräs oleellinen prosessiin liittyvä ongelma on usein se, että prosessista pääsee liikaa päästöjä ympäristöön ja näitä päästömääriä halutaan minimoida. Simulointiongelman ratkaisuna on prosessin optimointi. Optimoinnin päätarkoituksena on verrata eri prosessiolosuhteita ja valita niiden mukaan parhain mahdollinen, joka vastaa prosessille annettuja kriteereitä (Chaves et al. 2016). Optimoinnissa valitaan tietty objekti, jota halutaan joko minimoida tai maksimoida. Usein objekti on joko kustannusten minimointi tai tuoton maksimointi. (Chaves et al. 2016, Towler & Sinnott 2013)

Ongelman ollessa tiedossa, selvitetään mitä parametrejä, kuten lämpötilaa tai painetta, voidaan muuttaa (Towler & Sinnott 2013). Uusien parametrien avulla tehtyjen simulointien

jälkeen tarkastellaan tuloksia. Mikäli tulokset eivät vastaa annettuja kriteereitä muutetaan parametrejä uudestaan. Jos taas tulokset vastaavat annettuja kriteereitä muutetaan niiden avulla oikean prosessin arvoja.

## 2.2 Kemian- ja puunjalostusteollisuudessa yleisimmin käytetyt simulointiohjelmit

Kaupallisia simulointiohjelmitoja, joita yritykset nykyisin pääasiassa käyttävät, on monia erilaisia vastaamassa eri asiakkaiden sekä eri teollisuuden alojen, kuten petrokemian- ja lääketeollisuuden tarpeisiin. Yritykset ovat päätyneet käyttämään pääsääntöisesti kaupallisia ohjelmitoja, sillä niiden käyttö tulee halvemmaksi kuin oman ohjelmiston ylläpitäminen. (Towler & Sinnott 2013.) Tässä kappaleessa esitellään yleisesti kemianteollisuudessa ja puunjalostusteollisuudessa käytettyjä kaupallisia simulointiohjelmitoja.

Kemianteollisuuden yleisimmät simulointiohjelmit on esitetty taulukossa I. Taulukossa on selitetty lyhyesti ohjelmiston kuvaus ja sen tyypillisimpiä käyttökohteita.

Taulukko I Yleisimpiä kemianteollisuudessa käytettyjä simulointiohjelmitoja (Mukailtu Foo & Elyas 2017).

<b>Simulointiohjelmito</b>	<b>Kuvaus</b>	<b>Käyttö</b>
<b>AspenONE Engineering</b> (Aspentech 2021)	AspenONE Engineering ei itsessään ole simulointiohjelmito, mutta se on kokonaisuus, joka sisältää muun muassa Aspen Plus ja Aspen HYSYS ohjelmitot. AspenONE Engineering on Aspen Technology Inc. omistama.	Eri ohjelmistojen avulla käyttäjä voi muun muassa optimoida ja suunnitella prosesseja. Näiden lisäksi Aspen Economic Evaluation ohjelmiston avulla käyttäjä voi arvioida esimerkiksi kustannuksia.
<b>UniSim Design</b> (Honeywell 2021)	UniSim Design on Honeywellin omistama simulointiohjelmito, jolla voi luoda steady state simulaatioita.	Ohjelmistolla voidaan muun muassa luoda steady state malleja prosesseista.

<p><b>ChemCAD</b> (Chemstations 2021)</p>	<p>ChemCAD-ohjelmisto on Chemstations Inc. omistama. Siinä on 6 ohjelmistoa, jotka voidaan ostaa yhdessä tai erikseen riippuen käyttäjän tarpeista. ChemCAD:n avulla voidaan luoda steady state simulointeja sekä dynaamisia simulointeja.</p>	<p>ChemCAD-ohjelmiston avulla voidaan mm. mitoitaa laitteita, laskea termodynaamisia ominaisuuksia sekä tehdä turvallisuusanalyysyjä.</p>
<p><b>Design II</b> (Winsim 2020)</p>	<p>Design II on WinSim Inc. omistama simulointiohjelmisto, joka on suunniteltu simuloimaan kemiallisia- sekä hiilivetyprosesseja.</p>	<p>Ohjelmisto soveltuu tavallisten toimintojen lisäksi mm. lämmönvaihdivien mitoitukseen.</p>
<p><b>SuperPro Designer</b> (Intelligen 2020)</p>	<p>SuperPro Designer on Intelligen Inc. omistama ohjelmisto. Sitä käytetään mm. biotekniikan, elintarvike- ja lääketieteellisuuden aloilla.</p>	<p>Ohjelmistolla voidaan mallintaa sekä jatkuvatoimisia että panostoimisia prosesseja.</p>
<p><b>ProMax</b> (Bryan Research &amp; Engineering 2021)</p>	<p>ProMax on Bryan Research &amp; Engineering omistama ohjelmisto, jolla voidaan simuloida öljy ja kaasuprosesseja.</p>	<p>ProMax-ohjelmiston avulla voidaan mm. arvioida paineen laskua sekä lämmönsiirtoa. Sen avulla voidaan myös ennustaa esim. öljylaitosten päästöjä.</p>

Puunjalostusteollisuudessa käytettyjä simulointiohjelmitoia on esiteltyä taulukossa II. Taulukossa on lyhyt kuvaus ohjelmistosta sekä sen käyttökohteista.

Taulukko II Yleisimpiä puunjalostusteollisuuden simulointiohjelmistoja

<b>Simulointiohjelmisto</b>	<b>Kuvaus</b>	<b>Käyttö</b>
<b>Balas</b> (VTT Technical Research Centre in Finland 2013)	Balas on VTT:n kehittämä steady-state simulointiohjelmisto kemian prosesseille sekä sellu- ja paperiteollisuudelle.	Ohjelmistoa käytetään mm. aine- ja energiataseiden laskemisessa, lämmön talteenoton analyyseissä sekä 'mitä jos' analyysien teossa.
<b>FlowMac</b> (Papermac AB 2013)	FlowMac on PaperMac AB:n kehittämä ohjelmisto sellu- ja paperiteollisuuden tarpeisiin.	Ohjelmiston pääperiaate on prosessien mallinnus, joiden avulla voidaan tehdä erilaisia päätöksiä. Sen avulla voidaan mm. arvioida paperin ominaisuuksia sekä kustannuksia.
<b>Apros Paper</b> (VTT Technical Research Centre of Finland 2020)	Apros Paper ohjelmiston omistaa Fortum sekä VTT. Se tarjoaa dynaamista simulointia paperiteollisuudessa sekä selluteollisuudessa.	Apros Paper ohjelmistolla voidaan mallintaa erilaisia paperi- ja selluteollisuuden prosesseja. Sillä voidaan mm. seurata kuidun käsittelyn historiatietoja sekä tehdä paperin ja sellun laatumallinnusta.

Kuten taulukoista I sekä II huomataan, on simulointiohjelmistoja kehitetty paljon vastaamaan erilaisia käyttötarpeita. Taulukoissa I ja II on mainittu joidenkin simulointiohjelmistojen olevan joko steady-state tai dynaamisia ohjelmistoja tai molempia. Ne vaikuttavat simulointiohjelmistojen tarjoamiin toimintoihin. Steady-state simuloinnissa prosessia tarkastellaan sen normaalissa tasapainotilassa (Yang, S. Yang, L. & He 2001).

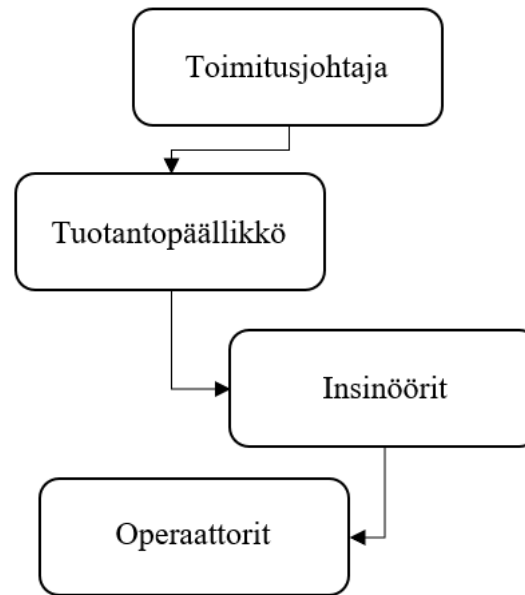
Dynaamisella simuloinnilla voidaan simuloida ajasta riippuvaa prosessia ja sen käyttäytymistä. Dynaamisten simulaattoreilla käyttäjä voi muun muassa simuloida prosessin

käynnistystä sekä mahdollisia vikatilanteita. Niitä käytetään myös paljon ohjausjärjestelmien suunnittelussa sekä turvallisuustutkimuksissa. (Towler & Sinnott 2013.) Dynaamisella simuloinneilla voidaan siis tutkia prosessin käyttäytymistä myös normaalista poikkeavissa olosuhteissa.

### **3 Simuloinnin käyttö kemianteollisuuden yrityksissä**

Prosessisimulointiohjelmistoja käytetään laajasti kemian- sekä petrokemianteollisuuden aloilla. Simulointiohjelmistoja käytetään yleisesti tehtaan suunnittelussa sekä prosessien optimoinnissa, mutta niitä hyödynnetään myös operaattoreiden koulutuksessa. (Patle, Manca, Nazir & Sharma 2019.) Puunjalostusteollisuuden tarpeisiin on kehitetty omia simulointiohjelmistoja, sillä kemianteollisuuteen kehitetyt simulointiohjelmistot eivät näihin ole vastanneet. Kemianteollisuuteen kehitetyissä kaupallisissa simulointiohjelmistoissa on usein huomioitu vain ne yksikköprosessit sekä termodynaamiset ominaisuudet, joita kemian prosesseissa tarvitaan (Foo & Elyas 2017). Puunjalostusteollisuuden prosessit ja osa käytettävistä kemikaaleista sekä komponenteista poikkeavat näistä.

Teollisuuden alasta riippumatta, on prosessisimulointi aina samanlaista kaikissa tuotanto-organisaatioissa. Kuvassa 3 on esitettyä tuotanto-organisaation rakenne Golwalkaria (2016) mukailen. Tässä työssä keskitytään vain prosessisimuloinnin kannalta kiinnostaviin tuotanto-organisaation jäseniin eli toimitusjohtajaan, tuotantopäällikköön, insinööreihin sekä operaattoreihin. Toimitusjohtaja ja tuotantopäällikkö käsitellään yhdessä yrityksen johtona.



Kuva 3 Tuotanto-organisaation rakenne hyvin yksinkertaistettuna ottaen huomioon vain tuotantoon liittyvät henkilöt. (Mukaiilu Golwalkar 2016)

Tarkasteltaessa, miten yrityksen eri jäsenet voivat hyödyntää simulointiohjelmistoja ja miten ne vaikuttavat heihin, voidaan päätellä suurimman vaikutuksen kohdistuvan insinööreihin. Simulointiohjelmistoilla voidaan suunnitella sekä kehittää prosesseja, joissa tehtävissä insinööreillä on merkittävä rooli. Näiden lisäksi simulointiohjelmistoja hyödynnetään operaattoreiden koulutuksessa ja johdon päätösten teon tukena sekä markkinoinnin suunnittelussa. (Anwar 2011.) Simulointia voidaan käyttää vaara-analyysien tekemisessä ja riskien hallinnan apuna, jolloin simuloinnin voidaan katsoa hyödyntävän koko tuotanto-organisaatiota.

### 3.1 Simuloinnin vaikutus turvallisuuteen

Prosessisimulointia voidaan hyödyntää kemianteollisuudessa koko yrityksen turvallisuuden parantamisessa. Simulointiohjelmistojen avulla pystytään selvittämään prosessiin liittyviä tärkeitä turvallisuusasioita, kuten reaktorin maksimipaine tai maksimilämpötila. Janošovský et al. (2017) mukaan iso osa riskien ja vaarojen analysoinnista ja hallinnasta tapahtuu yleensä tehtaan ja prosessien suunnittelemisen aikana, mutta niiden tärkeys on hyvä muistaa myöhemminkin. On hyvä tarkastella prosesseissa esiintyviä riskejä sekä vaaroja koko tehtaan elinkaaren aikana, jotta prosesseja voidaan optimoida turvallisemmiksi. (Janošovský et al. 2017)

Kemianteollisuuden prosesseissa käsitellään hyvin paljon erilaisia kemikaaleja, jotka voivat olla hyvinkin myrkyllisiä sekä syttyviä. Kemikaaleihin liittyvät riskit voivat olla vaarallisia näiden ominaisuuksien takia. Esimerkiksi vuodon seurauksena voi syttyä tulipalo, jos vuotava aine on helposti syttyvää. On myös mahdollista, että pienestä vahingosta syntyy vielä vakavampi tai suurempi vahinko. (Towler & Sinnott 2013.) Esimerkiksi pienestä kemikaalin vuodon seurauksena syttyneestä palosta voi syntyä suurempi palo, jos kemikaalin vuotoa ei saada tyrehdytettyä ajoissa. Riskien hallinta on siis haastavaa, sillä kaikkia mahdollisia tapahtumia ei pystytä ennustamaan.

Vaikka riskien hallinta ja vaara-analyysien teko on haastavaa, on niiden tekeminen erittäin tärkeää. Kaikkia riskejä ei saada poistettua, mutta niiden vähentämiselläkin voidaan tehdä prosessista turvallisempi. Vaara-analyysien ja riskien hallinnan avulla voidaan minimoida riskejä, mitä kemianteollisuuden yrityksissä piilee. Mitä turvallisempi työympäristö sitä vähemmän prosessista aiheutuvia tapaturmia tapahtuu (Towler & Sinnott 2013). Työtapaturmat sekä erilaiset vahinkotilanteet voivat olla myös kalliita yritykselle (Lee, Cameron & Hassall 2019). Niiden minimointi voi vähentää yrityksen kustannuksia.

Simulointiohjelmistojen avulla voidaan mallintaa erilaisia tilanteita simuloimalla prosessi eri olosuhteissa sekä tarkkailla tietyn parametrin vaikutusta prosessin käyttäytymiseen (Janošovský et al. 2019). Simuloinnilla voidaan turvallisesti selvittää, jonkun prosessissa olevan laitteen, kuten reaktorin maksimipaine, jonka se kestää. Tämän avulla pystytään



määrittämään hälytysrajat prosessille. Jos prosessissa oleva laite ylittää annetut rajat, tulee siitä hälytys ja asiaan ehditään reagoimaan (Towler & Sinnott 2013). Tämän kaltaista koetta ei voida suorittaa turvallisesti todellisessa prosessissa.

Janošovskýn et al. (2019) ovat esittäneet tutkimuksen, jonka tarkoituksena oli lisätä ymmärrystä siitä, miten simulointiohjelmistoja voidaan käyttää yhtenä poikkeamatarkastelujen työvälineenä. Tutkimuksessa käytetyn simulointiohjelmiston lisänä hyödynnettiin simulointidatan analyysimoduulia, jonka avulla havaittiin HAZOP-poikkeamia prosessista. (Janošovskýn et al. 2019) HAZOP-poikkeama-analyysissä käsitellään enimmäkseen erilaisia operatiivisia riskejä, joita prosessista mahdollisesti löytyy. Analyysi tehdään ryhmässä, joka sisältää eri tuotanto-organisaation jäseniä. Riskien tunnistamisen avulla voidaan parantaa riskien hallinnassa käytettyä strategiaa. Strategian parantamisen avulla mahdollistetaan muun muassa turvallisemmat työolosuhteet tuotannon työntekijöille. (Starr 2018.)

Edellä mainitussa tutkimuksessa esitetyn toimintamallin toimintaa tutkittiin teollisuusmittakaavassa olevan ammoniakkin valmistusprosessilla. Valmistusprosessin simulointiin käytettiin Aspen HYSYS ohjelmistoa. Simulointiohjelmistolla suoritettiin useita eri simulaatioskenaarioita. Näiden skenaarioiden tarkoituksena oli mallintaa erilaisia mahdollisia poikkeamia eri kohdissa prosessia. Simulointiskenaarioissa tutkittiin muun muassa tietyn materiaalivirran lämpötilaa, painetta ja mooliosuuksia sekä niiden poikkeamia. Simulointiohjelmistolla tehtiin myös herkkyysoanalyysijä, joiden avulla tutkittiin annettujen muuttujien vaikutusta prosessiin. Simuloinneista saatuja tuloksia analysoitiin simulaatiodatan analyysimoduulilla, jonka avulla pystyttiin havaitsemaan prosessissa mahdollisesti tapahtuvia poikkeamia. Havaituista poikkeamista muodostettiin HAZOP-poikkeamataulukko. Taulukkoon oli listattu vain syyt ja seuraukset, joten esimerkiksi riskin vakavuuden määrittämisen täytyisi tehdä erillinen HAZOP-tiimi. (Janošovský et al. 2019)

Simulointiohjelmiston ja analyysimoduulin yhdistelmän avulla pystyttiin selvittämään tiettyjä ennusteita prosessin käyttäytymisestä. Tutkimuksessa todettiin, että tämän kaltaisia tuloksia voidaan hyödyntää prosessin käyttövaiheessa, mutta myös jo tehtaan

suunnitteluvaiheessa. Saatuja tuloksia voidaan myös hyödyntää alustavina tietopohjina yrityksen HAZOP-poikkeama-analyyseissä. (Janošovský et al. 2019)

Itse simulointiohjelmistoilla ei siis voida tehdä vaara-analyysyjä prosesseista, mutta niitä voidaan hyödyntää turvallisuuden parantamisessa. Simulointiohjelmita käytetään apuna havaitsemaan prosessissa esiintyviä turvallisuuteen liittyviä riskejä, joita hyödynnetään vaara-analyysien sekä riskien hallinnan apuna ja sitä kautta vaikutetaan koko tehtaan turvallisuuteen.

### **3.2 Simuloinnin hyödyt tuotannon työntekijöiden näkökulmasta**

Simulointiohjelmistoilla on paljon eri käyttökohteita ja yhtenä käyttökohteena onkin tuotannon työntekijöiden koulutus. Operaattoreiden koulutus on erittäin tärkeää ja sen tärkeys ilmeneekin silloin, kun mietitään aihetta turvallisuus- ja ympäristökysymysten kautta (Patle et al. 2019). Mahdollisten onnettomuuksien seuraukset voivat olla vaarallisia niin työntekijöille kuin ympäristöllekin, jos ympäristölle haitallista kemikaalia pääsee ilmaan tai maaperään.

Nykyisin prosessien ollessa monimutkaisia operaattorit kohtaavat uudenlaisia haasteita työssään, kuten prosessin hälytyksien ja parametrien samanaikainen tarkkailu. Uudenlaisten haasteiden takia voi syntyä mahdollisia vahinkotilanteita, esimerkiksi vaatimus arvioida useita eri tietoja ja tapahtumia samanaikaisesti voi johtaa inhimillisiin virheisiin. Erilaisten vahinkojen seurauksena voi syntyä laitevaurioita sekä pahimmassa tapauksessa jopa kuolemantapauksia. Vahinkojen seuraukset voivat myös ulottua ympäristöön ja tehtaan ulkopuolisiin henkilöihin. Yritykselle vahingoista seuraa erilaisia kustannuksia, kuten prosessin alasajosta tai laitevaurioista johtuvia. Vahinkotilanteiden välttämisen takia on tärkeää, että operaattorit koulutautuvat ja päivittävät tietojansa. (Nazir, Manca & Colombo 2012)

Koulutuksessa käytetyt operaattoreiden koulutussimulaattorit ovat dynaamisia simulointiohjelmita. Tämä siksi, että koulutuksessa harjoitellaan erilaisia tapahtumia,

kuten prosessin käynnistystä tai epänormaaleja tilanteita. (Yang, S. Yang, L. He 2001.) Koulutussimulaattoreilla voidaan harjoitella erilaisia tilanteita ja erityisesti mahdollisia poikkeamia prosessissa. Harjoittelun avulla operaattoreiden reagointinopeus sekä erilaisten toimintastrategioiden kehittäminen mahdollistuu. Etenkin, kun operaattori käy tarpeeksi monta kertaa tietynlaisia tilanteita läpi. Toistojen avulla saadaan tekeminen niin sanotusti automatisoitumaan. (Edmonds 2016.) Tekemisen automatisoitumisen seurauksena tuotannon työntekijät ovat valmiimpia oikeassa tilanteessa eivätkä mieli liian pitkää aikaa seuraavaa toimenpidettään.

Monilla simulointiohjelmistojen valmistajilla, kuten Aspentech:lla on erillisiä ohjelmistoja operaattoreiden kouluttamiseen. Aspentech:n koulutussimulaattorin avulla operaattorit voivat harjoitella erilaisia poikkeavia tilanteita, kuten prosessin käynnistystä sekä alasajoa (Aspen Technology Inc. 2021). Prosessin käynnistyksen sekä erilaisten poikkeamatilanteiden harjoittelu turvallisesti tai kannattavasti ei onnistuisi ilman koulutussimulaattoreita. Koulutuksen lisäksi simuloinneilla voidaan vaikuttaa tuotannon työntekijöihin ja heidän työolosuhteisiinsa muun muassa riskien hallinnan ja optimoinnin avulla.

Simuloinnin ollessa onnistunut ja sen avulla saatu prosessista vakaampi ja turvallisempi, on sillä vaikutusta kaikille prosessin kanssa työskenteleville. Simuloinnilla voidaan vaikuttaa prosessin turvallisuuteen jo prosessin suunnitteluvaiheessa (Janošovský et al. 2017). Suunniteltaessa prosessista turvallinen sekä vähennetään riskejä jo alussa, on tuotannon henkilökunnan turvallisempi operoida prosessia. Simulointiohjelmistoilla voidaan arvioida erilaisia prosessissa esiintyviä riskejä, jotka vaikuttavat terveyteen tai turvallisuuteen (Dimian, Bildea & Kiss 2019). Prosessin suunnitteluvaiheen lisäksi prosessien optimoinnilla voidaan parantaa prosessien turvallisuutta (Chaves et al. 2016). Prosessin turvallisuuden parantamisella on merkittävä vaikutus tuotannon työntekijöiden työolosuhteisiin ja turvallisuuteen.

### 3.3 Simuloinnin hyödyt insinöörien näkökulmasta

Yleisesti ottaen simulointiohjelmistot on alun perin tarkoitettu insinöörien työkaluiksi, jotta voidaan mallintaa monimutkaisiakin prosesseja mahdollisimman lyhyessä ajassa (Chaves et al. 2016). Simulointiohjelmistot ovat hyvin tärkeitä työkaluja, kun suunnitellaan uutta prosessia. Pelkän prosessin suunnittelun lisäksi simulointiohjelmistojen avulla voidaan myös arvioida prosessin kannattavuutta taloudellisesti pääomakustannuksien ja käyttökustannuksien kautta sekä arvioida prosessiin liittyviä riskejä, jotka voivat olla haitaksi työntekijöiden terveydelle tai turvallisuudelle. (Dimian et al. 2019.)

Vaikka simulointiohjelmistot ovat monipuolisia toiminnoiltaan, on insinöörin silti hyvä tehdä alustavia laskelmia esimerkiksi Excelin avustuksella ennen uuden prosessin simulointia. Alustavien laskujen perusteella voidaan tehdä alustavia arviota prosessille ja sen käyttäytymiselle. Alustavat laskut auttavat myös simulointimallin tekemisessä. (Towler & Sinnott 2013.)

Prosessien suunnittelun lisäksi insinöörit voivat hyödyntää simulointiohjelmistoja muillakin tavoin, esimerkiksi kun halutaan säilyttää yrityksen kilpailukykyä markkinoilla. Kemianteollisuuden yritysten on tärkeää olla mahdollisimman tuottavia sekä ympäristöystävällisiä. Simulointiohjelmistojen sekä optimoinnin avulla insinöörit pystyvät kehittämään prosesseja haluttuun suuntaan. (Pattison & Baldea 2014.) Yleensä optimoinnin tarkoituksena on minimoida kustannuksia, päästöjä tai energian kulutusta. Toisaalta voidaan myös pyrkiä maksimoimaan toiminnan tuottavuutta. (Chaves et al. 2016.) Kun prosessi saadaan optimoitua kannattavammaksi tai ympäristöystävällisemmäksi voidaan ajatella simuloinnin olleen onnistunut. Se vastaa käyttäjän kysymyksiin sekä tarpeisiin ja tuloksia voidaan hyödyntää yrityksen toiminnan parantamisessa.

Simulointiohjelmistojen avulla voidaan myös ratkaista prosessin käyttöön ja toimintaan liittyviä ongelmia. On hyvin harvinaista, että prosessi toimii täysin samoin kuin sen on suunniteltu toimivan. Tämä voi johtua siitä, ettei suunnittelun aikana ole riittävällä tarkkuudella otettu huomioon ympäristöolosuhteita, joita on muutenkin yleensä täysin mahdoton suunnitella sekä mallintaa etukäteen. Alkuperäisen raaka-aineen saatavuus on

voinut huonontua ja on täytynyt valita jokin muu raaka-aine. Simulointiohjelmistojen avulla voidaan vastata suunnittelun tai prosessin käynnissä olon aikana ilmeneviin ongelmiin helpommin. Simulointiohjelmistojen avulla voidaan tutkia suhteellisen nopeasti, miten olosuhteiden muutokset vaikuttavat prosessin käyttäytymiseen. (Chaves et al. 2016)

Voidaankin todeta, että prosessisimulointiohjelmit ovat erittäin tärkeitä työkaluja insinööreille niiden monipuolisten käyttökohteiden, kuten prosessin suunnittelun ja optimoinnin takia. Simulointiohjelmistojen avulla insinöörien työ helpottuu ja nopeutuu. Insinöörien ei tarvitse laskea kaikkia prosessiin liittyviä laskuja itse. Simulointiohjelmit suorittaa laskelmat, joiden tuloksia insinööri tulkitsee.

Simulointiohjelmistojen käyttö tulevaisuudessa tulee todennäköisesti kasvamaan, sillä niiden kehittämisen myötä voidaan vastata uusien prosessien, kuten bioprosessien tarpeisiin. Bioprosessit tuovat mukanaan uudentyyppisiä monimutkaisia prosesseja sekä uusia yksikköprosesseja, joille on tarvetta kehittää uusia laskentamalleja. Näiden lisäksi myös tekniikan ja koneiden laskentatehon parantumisella vaikutetaan ohjelmistojen käyttöön ja saadaan simulointien tarkkuutta parannettua. (De Tommaso et al. 2020.)

### **3.4 Simuloinnin hyödyt johdon näkökulmasta**

Yrityksen johdon näkökulmasta prosessisimulointi ja sillä saadut tulokset toimivat pääasiassa päätösten teon tukena. Yrityksen johto, kuten toimitusjohtaja, voi hyödyntää simulointien tuloksia prosessin suunnitteluvaiheessa esimerkiksi arvioimalla kannattaako suunniteltu prosessi toteuttaa. Johto voi myös tehdä päätöksiä liittyen laitteiden saatavuuteen sekä prosessista aiheutuneista kustannuksista. (Dimian et al. 2019.)

Monilla eri simulointiohjelmitoilla on erillisiä kustannuslaskentaohjelmistoja, joilla voidaan tehdä kustannusarvioita eri laitteiden, kuten kompressoreiden tai lämmönvaihdinten kustannuksista (Feng & Rangaiah 2011). Kustannuslaskelmien tuloksia voidaan hyödyntää investointipäätösten tukena, kun mietitään, kannattaako vanha laite vaihtaa uuteen ja milloin tai mikä laitevaihtoehdosta on kannattavin.

Johdon tehtävänä on yrittää mahdollisuuksien mukaan vähentää sekä välttää turhia prosessista aiheutuvia kustannuksia. Niitä voivat olla veden tai raaka-aineen liiallinen käyttö tarpeeseen nähden. Tämän kaltaisiin ongelmiin voidaan vastata optimoimalla prosessia. (Golwalkar 2016.) Edellä mainittujen lisäksi simulointiohjelmistoilla voidaan vastata muihinkin päätöksiin ja tavoitteisiin.

Kemianteollisuuden yritysten tarkoituksena on tuottaa markkinoille tuotteita, joita eri asiakkaat ostavat. Asiakkaita voivat olla tavalliset ihmiset, jotka ostavat erilaisia tuotteita, kuten polttoainetta tai maalia, mutta myös toiset yritykset. Kemianteollisuuden yrityksiä on suuri määrä ja uusia tulee koko ajan. (Golwalkar 2016.) Kuten jo insinöörien näkökulmaa pohdittaessa todettiin, on kemian- ja petrokemian yrityksillä paljon keskinäistä kilpailua sekä erilaisia säädöksiä, joita tulee noudattaa. Näihin liittyen yritysten on tärkeää parantaa taloudellista asemaansa sekä vähentää ympäristön kuormitusta. Yksi työkaluista, mitä voidaan käyttää apuna saavuttamaan nämä tavoitteet, on simulointi. (Pattison & Baldea 2014.)

Ympäristön suojeleminen on tärkeä aihe varsinkin kemianteollisuuden yrityksissä. Vahingon tapahtuessa ympäristöön voi päästä hyvinkin haitallisia aineita. Tutkittaessa prosessista lähteviä päästöjä, voidaan niitä analysoida simulointiohjelmistojen avulla, kuten ProMAX -simulointiohjelmiston avulla. ProMAX -simulointiohjelmiston avulla voidaan selvittää prosessista lähteviä BTEX sekä VOC päästöjä, jotka ovat tyypillisiä öljyn jalostuksessa. Ohjelmiston avulla voidaan myös tutkia kasvihuonepäästöjä sekä selvittää miten prosessiin tehtävät muutokset vaikuttavat erilaisiin prosessista syntyviin päästöihin. (Bryan Research & Engineering 2021.) Simulointiohjelmistolla tehtyjen päästöanalyysien tuloksia voi johto käyttää päätöstensä tukena vähäpäästöisemmän prosessin saavuttamiseksi. Päästöanalyyseistä saatuja tuloksia voidaan myös hyödyntää tuotteiden markkinoinnissa sekä kilpailukyvyyn parantamisessa, kun esitellään vähäpäästöisempää prosessia asiakkaille.

## 4 Esimerkkejä simuloinneista ja niiden käytöstä

Tässä kappaleessa esitetään kolme esimerkkiä, joiden avulla voidaan hahmottaa simulointiohjelmistojen roolia eri tarkoituksissa. Ensimmäisessä esimerkissä tarkastellaan tapausta, jossa käytettiin simulointiohjelmistoja apuna uuden biodieselin prosessin suunnittelussa. Prosessin suunnittelu kuului VTT:n sekä Metropolia Ammattikorkeakoulun projektiin, jonka tarkoituksena oli hyödyntää suunnittelun ja kehitystoiminnan tukena uusimpia simulointimenetelmiä suomalaisessa yhteiskunnassa entistä paremmin. Hankkeessa toteutettiin erilaisia esimerkkitapauksia, joista yksi käsitteli biodieselin puolipanostyyppistä valmistusprosessia. (Leppävuori et al. 2009)

Biodieselin prosessin suunnittelun tarkoituksena oli löytää yksi ratkaisu yhteiskunnassa syntyvän jätteen käsittelyyn. Esimerkkitapauksessa etsittiin kaupallista ratkaisua siihen, kuinka voidaan mahdollisesti tehdä biodieseliä ja biokaasua tästä jätteestä sekä mahdollisuuksien mukaan korvata esimerkiksi polttoaineena käytettävä öljy. Tarkastelun tukena käytettiin prosessisimulointia ChemCAD ja Siemens Simatic -ohjelmistoilla. Simulointimallin käyttökohteita olivat prosessin suunnittelu sekä kustannuslaskelmien tekeminen. Simulointien lisäksi prosessista rakennettiin pilot-laitteisto, johon on käytetty kirjallisuudesta ja laboratoriokokeista saatuja tietoja. (Leppävuori et al. 2009)

Simulointien tarkoituksena oli optimoida prosessia niin, että laiteinvestoinnit pystyttäisiin minimoimaan. Hankkeen aikana ei kuitenkaan ehditty lopullista optimointia toteuttamaan. Transesteröintiosasta oli muodostettu simulointimalli, jonka mukaan tehty koe prosessi oli saatu koeajovaiheeseen ja reaktorin transesteröinti- ja esteröintiosalla oli tehty prosessikokeita. (Leppävuori et al. 2009)

Esimerkkitapauksen prosessi oli monimutkainen ja mahdollisia vaihtoehtoja prosessin toteutukselle oli paljon. Vaikka prosessin lopullista optimointia ei pystytty tässä esimerkkitapauksessa toteuttamaan toteavat Leppävuori et al. (2009), että simulointiohjelmistoista sekä simuloinnista voi olla hyötyä, kun lähdetään suunnittelemaan sekä optimoimaan monimutkaista bioprosessia. Tämä ei kuitenkaan ole täysin yksinkertaista,

sillä lähtötietoja sekä aineominaisuustietoja ei käytetyissä ohjelmistojen tietokannoissa ollut riittävästi saatavilla bioprosesseille. Leppävuori et al. (2009) mukaan Aspen-simulointiohjelmistossa olisi ollut paremmat aineominaisuustiedot saatavilla, mutta kyseinen ohjelmisto ei ollut käytettävissä. (Leppävuori et al. 2009)

Edellä mainitun projektin avulla huomattiin, että simulointiohjelmistoja voidaan käyttää apuvälineenä uuden prosessin suunnittelussa sekä helpottamaan monimutkaisen prosessin mallinnusta. Tapauksessa kävi myös ilmi se, että uusien bioprosessien laskentaan tarvittavia aineominaisuustietoja on vielä monissa ohjelmistoissa vain rajoitetusti saatavilla. Onkin tärkeä valita käytettävät ohjelmistot huolellisesti. Vaikka kaikkia tarvittavia tietoja ei ollut saatavilla, pystyttiin prosessista tehdä alustavia simulointeja, jolloin sitä voitiin tutkia ja myöhemmin etsiä optimaalisimmat olosuhteet olemassa olevien tietojen perusteella.

Prosessien suunnittelun lisäksi tiettyjen laitteiden optimointi on tärkeää yrityksen toiminnan ja kannattavuuden parantamiseksi. Toisessa esimerkissä käydään läpi, miten simulointiohjelmoilla voidaan optimoida prosessia tarkoituksena vähentää laitteista syntyviä kustannuksia. Esimerkissä käydään läpi tislausprosessin optimointia, sillä tislaus on yksi kemianteollisuuden yleisimmistä ja paljon energiaa kuluttavista yksikköprosesseista. Niiden ylläpito sekä käyttökustannukset voivat olla suurempia kuin muiden käynnissä olevien prosessien. (Taqvi et al. 2016.)

Taqvi et al. (2016) esittivät tutkimuksessaan, miten voidaan mallintaa sekä optimoida asetonin valmistusprosessi käyttämällä Aspen Plus sekä Aspen Dynamics ohjelmistoja. Tutkimuksessa simulointi aloitettiin muodostamalla virtauskaavio Aspen Plus ohjelmistoon. Simulointia varten kaikki tarvittavat laitteet sekä tiedot syötöistä ja muista virtauksista lisättiin virtauskaavioon ja sen tietoihin. Virtaustietojen lisäksi muita tarvittavia tietoja olivat muun muassa laiteparametrit, kuten lämpötila ja paine sekä kolonnin kokoon liittyvät tiedot, kuten korkeus, halkaisija ja kolonnin pohjien lukumäärä. Alustavat toimintaparametrien arvot oli saatu pilot-kokeen perusteella. Tämän jälkeen simulointia varten valittiin termodynaaminen malli, joka oli tässä tapauksessa NRTL malli (Nonrandom Two liquid), koska se kuvaa parhaiten höyry-nestetasapainotietoja. Prosessia mallinnettiin myös matemaattisesti, muodostamalla muun muassa ainetaseen yhtälö. (Taqvi et al. 2016)



Steady-state-laskennan jälkeen aloitettiin optimoinnin suunnittelu ja toteutus sekä siirrettiin Aspen Plus ohjelmistolla tehty steady state malli prosessista Aspen Dynamics ohjelmistoon, jotta saatiin dynaaminen malli. Tislauskolonnista, joka koostui ei-ideaalisesta kolonnista, tehtiin erilaisia oletuksia. Tutkimuksessa oletettiin muun muassa kaasun ja nesteen olevan termisessä tasapainossa keskenään. Optimointia varten valittiin optimoitavat parametrit sen mukaan, mikä parhaiten auttaisi kustannusten vähentämisessä. Tässä tapauksessa haluttiin minimoida tislauskolonnin yhteydessä olevan kiehuuttimen lämpötehoa, sillä siihen sisältyi suurin osa kyseisen tislausprosessin syntyvistä käyttökustannuksista. (Taqvi et al. 2016)

Ennen optimointia Aspen Plus ohjelmistolla analysoitiin tislauskolonnin lämpötilan, paineen sekä mooliosuuden profiileja suhteessa kolonnien pohjiin, joita oli 15. Profiilien avulla tutkittiin, miten tislauskolonnissa olevan seoksen komponentit, lämpötila sekä paine muuttuivat suhteessa kolonnin pohjien lukumäärään. Kun nämä oli määritelty ja moolipuhkaus oli halutussa pitoisuudessa, määritettiin kolonnin optimaalinen syöttöpohja. Tutkimuksen mukaan optimaalinen syöttöpohja oli pohja 10. Sen avulla saatiin pienin energiankulutus, jolla saavutettiin tisleenä vaadittua 98 % asetonia. (Taqvi et al. 2016) Optimoinnin avulla löydettiin optimaalisimmat olosuhteet kyseiselle tislausprosessille, jotta haluttu tuotepuhkaus saavutettiin minimikäyttökustannuksilla. Tämän kaltainen optimointi auttaa johtoa, kun pitää tehdä päätöksiä budjetoinnista ja prosessien kannattavuudesta.

Kolmannessa esimerkissä keskitytään prosessien turvallisuuden parantamiseen käyttämällä apuna Aspen HYSYS -simulointiohjelmistoa. Yleensä vaara-analyseissä, kuten HAZOP-tutkimuksissa tietty tiimi käy läpi erilaisia poikkeamia ja niiden seurauksia. Saatujen tuloksien perusteella ehdotetaan, miten riskiä voidaan vähentää. Se on siis aikaa vievää ja perustuu pääasiassa tiimissä olevien asiantuntijoiden tietoihin. Dynaamisten simulointiohjelmistojen käyttö voi auttaa siinä, että poikkeama- ja vaara-analyysien tekemistä saadaan nopeutettua sekä minimoitaisiin inhimillisten virheiden tapahtumista. (Kummer & Varga 2019)

Kummer ja Varga (2019) esittivät toimintaympäristön, jossa Aspen HYSYS -simulointiohjelmisto ja MATLAB-laskentaohjelmisto yhdistetään OPC-liitännän (Open Platform Communication) avulla. Liitäntä mahdollisti sen, että prosessista saadut

mittausdatat ja toimintaparametrit voitiin analysoida MATLAB:ssa. Tutkimuksessa prosessin poikkeamatiedot lähetettiin MATLAB:sta Aspen HYSYS ohjelmistoon ja simuloinneista saadut tiedot lähetettiin MATLAB:iin analysoitavaksi. Ehdotettua toimintaympäristöä testattiin tyhjötilausprosessilla, jossa valmistettiin fenolia kumeenista. Tutkimuksen tarkoituksena oli esittää keino, jonka avulla voidaan helpottaa prosessista löytyvien poikkeamien analysointia. Tutkimuksessa haluttiin tuoda myös esille sitä, kuinka dynaamista simulaattoria voidaan käyttää apuna prosessiturvallisuuden parantamisessa. (Kummer & Varga 2019)

Tutkimuksessa analysoitiin tyhjökolonnin dynaamista käyttäytymistä sekä eri säätimissä mahdollisesti esiintyviä vikoja. Säätiminä käytettiin viritettyjä PI-säätimiä (Proportional-Integral), joiden virityksen teki Aspen HYSYS Autotuner moduuli. Tutkimuksessa käytettyä PI-säädintä testattiin simuloimalla virtauksen, pinnankorkeuden, lämpötilan ja paineen säätöä. Työssä keskityttiin vain prosessissa olevien säätimien vikoihin, vaikka muitakin vikoja on voinut olla. Työssä vikojen havaitseminen toteutettiin muuttamalla tietyksi ajaksi ohjearvoa. (Kummer & Varga 2019)

Tuloksia tutkittiin muun muassa kuvaajien perusteella, joissa tutkittavan parametrin muutos esitettiin ajan funktiona. Samassa kuvaajassa esitettiin jokainen säädin. Saatujen tulosten perusteella erityisiä vaaratilanteita ei havaittu, mutta painesäädin aiheuttaisi suurimmat seuraukset kumeenihydroperoksidin matalassa konsentraatiossa, joten tutkimuksen perusteella siihen tulisi kiinnittää eniten huomiota. Kumeenihydroperoksidin konsentraation muutokset voivat vaikuttaa tuotteen saantoon ja sitä kautta vähentää tuottoja, mutta se voi myös aiheuttaa vaaratilanteita seuraavassa yksikössä. Tämän lisäksi todettiin, että tutkimuksen perusteella ehdotettu toimintaympäristö toimi hyvin. Sitä on mahdollista käyttää myös monimutkaisempien prosessien analysoinnissa. Ehdotettu toimintaympäristö voi olla hyödyllinen työkalu esimerkiksi öljyteollisuudessa käytettynä sen monimutkaisten teknologioiden takia. (Kummer & Varga 2019)

Esimerkistä huomataan, että ehdotetun toimintaympäristön avulla voidaan analysoida prosessissa olevia poikkeamia. Tämän avulla poikkeamiin voidaan puuttua ja näin parantaa prosessien turvallisuutta. Kuten aikaisemmin on todettu, prosessien poikkeamia voidaan

tutkia HAZOP-tutkimusten avulla, mutta se on aikaa vievää yksinään ja ehdotetun kaltainen toimintatapa voi nopeuttaa sitä.

Samankaltaista toimintatapaa on esitelty myös aikaisemmin kappaleessa, jossa pohdittiin simulointiohjelmistojen vaikutuksesta turvallisuuteen, missä Janošovský et al. (2019) esittivät ASPEN HYSYS -ohjelmiston yhdistämisen simulointidatan analyysimoduuliin. Molemmissa esimerkeissä haluttiin lisätä ymmärrystä siitä, miten simulointiohjelmit voivat olla hyödyllisiä turvallisuuden parantamisessa. Kuitenkin toteutus esimerkeissä oli eri ja käytetty simulointiohjelmisto oli yhdistetty eri ohjelmiin eri tavoin. Voidaan kuitenkin todeta, että vaikka toteutus olikin erilainen, saavutettiin molemmilla tavoilla turvallisempi prosessi sekä pystyttiin hyödyntämään simulointiohjelmistoa.

## **5 Simuloinnin tulevaisuus**

Prosessisimuloinnilla on tärkeä rooli tulevaisuudessa varsinkin insinöörien työkaluina. Kun halutaan ympäristöystävällisempiä prosesseja, kestävämpiä tuotteita sekä vähemmän jätettä, voidaan simulointiohjelmistoja käyttää apuna saavuttamaan nämä tavoitteet. Tietokoneiden kapasiteettien kasvaessa, pystytään myös käyttämään oikeastaan mitä tahansa konetta optimointiongelmien ratkaisemisessa. Ohjelmistot eivät kuitenkaan vielä ole täydellisiä ja niiden eri käyttökohteissa on vielä kehitettävää tulevaisuudessa. (De Tommaso et al. 2020)

Tulevaisuudessa ympäristöystävällisyyden ja kestävyuden lisäksi on muitakin huomioon otettavia aiheita. Prosessien monimutkaistuessa ja turvallisuusvaatimusten kasvaessa operaattoreiden koulutuksen kehittäminen on tulevaisuudessa vielä nykyistäkin tärkeämpää. Hyvän koulutuksen avulla voidaan vähentää teollisuusvahinkoja, jonka seurauksena muun muassa rahan menettäminen vahinkoihin vähenee. Saadaan siis vähennettyä turhia kustannuksia ja parannettua prosessiturvallisuutta. Tässä kappaleessa otetaan kantaa simulointiohjelmistojen tulevaisuuteen turvallisuuden ja operaattoreiden koulutuksen näkökulmasta.

Uusia keinoja kouluttaa operaattoreita on etsitty simulointiohjelmistojen tueksi. Yksi menetelmä on yhdistää virtuaalitodellisuus operaattoreiden koulutussimulaattoreiden kanssa. Virtuaalitodellisuudella tarkoitetaan eräänlaista visualisointi menetelmää, jota sovelletaan yhä enemmän laitosten turvallisuustarkoituksia varten. Vaikka koulutussimulaattoreiden avulla voidaan tehdä paljon koulutukseen liittyen, mahdollistaa virtuaalitodellisuuden yhdistäminen paljon tehokkaamman oppimisympäristön operaattoreille. (Patle et al. 2019) Yhdistelmä tarjoaa operaattoreille mahdollisimman todentuntuisen kokemuksen, kuitenkin turvallisessa ympäristössä toteutettuna. Jos koulutuksessa käytettävässä virtuaaliprosessissa tapahtuisi vahinko, ei seurauksena synny vaaraa koulutuksessa oleville henkilöille tai ympäristölle. (Manca et al. 2012.)

Patle et al. (2019) totesivat tekemänsä kirjallisuuskatsauksen perusteella, että virtuaalitodellisuuden yhdistäminen operaattoreiden koulutussimulointiohjelmistojen kanssa tekisi koulutuksesta paljon tehokkaampaa, mitä pelkkä koulutussimulaattori mahdollistaisi. Koulutuksen parantamisen myötä myös operointien turvallisuus kasvaisi, jonka seurauksena vahinkojen määrä saadaan vähenemään. Yhdistelmän toteutuksen ei kuitenkaan todettu olevan täysin ongelmaton ja yhtenä suurena haasteena onkin VR-OTS:n, eli virtuaalitodellisuuden ja koulutussimulaattorin yhdistelmän ylläpito sekä kehittäminen jatkuvasti muuttuvien vaatimuksien myötä. (Patle et al. 2019)

Operaattoreiden koulutuksen kehittämisen lisäksi prosessiturvallisuuden kehittäminen ja parantaminen on aina ollut ja tulee tulevaisuudessakin olemaan hyvin tärkeä aihe kemianteollisuuden yrityksille. Se vaikuttaa jokaiseen tuotanto-organisaatiossa työskentelevään. Yhtenä prosessiturvallisuuden pohjana on operaattoreiden jatkuva koulutus uusia moderneja koulutussimulaattoreita hyödyntäen. Ne ovatkin tärkeimpiä osia prosessiturvallisuuden parantamisessa. Prosesseissa syntyvät vaara- ja poikkeamatilanteet voivat aiheuttaa myös merkittäviä ympäristövahinkoja, jolloin yrityksen maine voi kärsiä vaaratilanteen takia tai pahimmassa tapauksessa tilanteeseen voi liittyä kuolemantapauksia. Tämän takia on tärkeä jatkaa vaara- sekä poikkeamatilanteisiin puuttumista. Apuna voidaan käyttää Teollisuus 4.0 ideologiaa sekä toimintatapoja. (Lee et al. 2019)

Teollisuus 4.0:lla tarkoitetaan teollista vallankumousta, joka on edelleen käynnissä. Sen tarkoituksena on luoda älykkäämpiä koneita, jotka ovat yhteydessä toisiinsa. Näiden avulla voidaan luoda niin sanottuja ”Smart factories”, joissa eri koneet suorittavat tehtaassa olevia rutiinitöitä sekä tekevät mahdollisia päätöksiä erilaisissa poikkeavissa tilanteissa. Yksi tärkeimmistä Teollisuus 4.0 liittyvistä teknologioista on simulointi. (Gunal 2019) Teollisuus 4.0 käsitteitä ja ideologiaa voidaan hyödyntää kemianteollisuudessa ja prosessisimuloinnissa varsinkin teknologioiden yhdistämisessä.

Prosessiturvallisuuden parantamisessa on jo ollut käytössä monia Teollisuus 4.0 liitettyjä teknologioita, kuten digitaalinen mallinnus. Näissä olevat mallit eivät ole kuitenkaan olleet yhteydessä toisiinsa. Tämä on tuonut omia haasteita, kun on haluttu yhdistää eri ohjelmistojen tuottamia dataa. Yrityksissä on siis ollut valmiiksi työvälineitä prosessiturvallisuuden parantamisessa, kuten dynaaminen simulointi. Sen avulla on voitu tunnistaa riskejä jo prosessin suunnitteluvaiheessa. Onkin huomattu, että merkittävien vahinkojen ilmeneminen viimeisen vuosikymmenen ajan ei ole vähentynyt. Tämän kaltaiseen ongelmaan voidaan saada Teollisuus 4.0 avulla apua hyödyntämällä sen yhtä toimintamallia yhdistää nykyisiä teknologioita toisiinsa. (Lee et al. 2019)

Lee et al. (2019) esittivät tutkimuksessaan, miten prosessiturvallisuutta voidaan parantaa Teollisuus 4.0 ideologiaa hyödyntäen. Tarkoituksena olisi yhdistää simulointimallit reaaliaikaiseen dataan sekä muihin digitaalisiin kaksosiin, jotta tietoa voidaan välittää ohjelmistosta toiseen paremmin ja helpommin. Pääajatuksena on luoda tietylainen ekosysteemi, jossa käytettävät simulointimallit sekä muut hyödylliset mallit linkitetään toisiinsa käyttäen yhteistä kieltä. Tämä vähentäisi datan siirrosta aiheutuvaa virhettä ja nopeuttaisi prosessia. Yhdistettyjen ohjelmistojen avulla mahdollistetaan reaaliaikainen optimointi ja vikojen havaitseminen sekä parempi itseohjautuvuus prosessissa. Digitaalisella kaksosella tarkoitetaan ohjelmistoa, joka näyttää digitaalisessa muodossa tarkan mallin fyysisestä järjestelmästä, kuten prosessista. Yksi tärkeimpiä digitaalisia kaksosia prosessiturvallisuuden kannalta on operaattoreiden koulutussimulaattorit. Niiden käytön myötä voidaan huomattavasti vähentää vahinkotilanteiden tapahtumista. (Lee et al. 2019)

Lee et al. (2019) mukaan Teollisuus 4.0 konseptia ajatellen koulutussimulaattoreiden dynaamiset mallit sekä niiden hyödyntäminen tuo uusia mahdollisuuksia prosessien vaaratilanteiden arvioinneissa. Varsinkin kun koulutussimulaattoreiden toimintoja lähdetään kehittämään enemmän jatkokäyttöä ajatellen. Yhdistetyt mallit sekä ohjelmistot voivat vähentää inhimillisiä virheitä datan siirrossa sekä nopeuttaa optimointia sen tapahtuessa reaaliaikaisesti. Vaara-analyysien teko myös helpottuisi reaaliaikaisen vikojen havaitsemisen seurauksena ja näin voidaan parantaa prosessiturvallisuutta. Tulevaisuudessa olisikin hyvä jatkaa simulointiohjelmistojen kehittämistä monipuolisemmiksi. On myös tärkeä ymmärtää niiden tärkeys sekä kuinka niitä voidaan yhdistää muiden ohjelmistojen kanssa, sillä ne ovat ja tulevat tulevaisuudessakin olemaan erittäin tärkeitä työkaluja kemianteollisuuden yrityksissä.

## 6 Johtopäätökset

Tämän kandidaatintyön tarkoituksena oli tutkia kuinka eri tuotanto-organisaation jäsenet voivat hyödyntää simulointiohjelmistoja sekä millainen vaikutus onnistuneilla simuloinneilla voi olla. Tässä työssä kartoitettiin myös, miten simuloinneilla voidaan vaikuttaa prosessin turvallisuuteen. Onnistuneena simulointina voidaan pitää sellaista simulointia, joka vastaa käyttäjänsä tarpeisiin. Esimerkiksi prosessin turvallisuuden parantaminen tai prosessista lähtevien päästöjen vähentäminen ovat tällaisia tarpeita. Optimoimalla prosessia voidaan prosessista saada turvallisempi tai ympäristöystävällisempi. Prosessin optimoinnilla saavutetaan tavoitteet ja simulointia voidaan pitää näin onnistuneena.

Simulointiohjelmistojen monipuolisten käyttökohteiden myötä niitä voi hyödyntää monet tuotanto-organisaation jäsenet. Tässä työssä tuotanto-organisaation jäseniksi luokitellaan operaattorit, insinöörit, tuotantopäällikkö sekä toimitusjohtaja. Vaikka simulointiohjelmistot on alun perin tehty insinöörien työvälineiksi prosessin aine- ja energiataseiden laskemiseksi, taipuvat ne tämän tutkimuksen mukaan moneen muuhunkin. Tutkittaessa

simulointiohjelmistojen eri käyttökohteita ilmeni, että johto voi hyödyntää simuloinneista saatuja tuloksia päätöstensä teon tukena. Simulointiohjelmistojen avulla tehtyjen kustannusarvioiden tai päästöarvioiden tulosten perusteella voidaan perustella, onko jokin suunniteltava prosessi kannattava tai ympäristöystävällinen. Päästöanalyyseistä saatuja tuloksia hyödyntämällä voidaan markkinoida yrityksen tuotteita ympäristöystävällisinä.

Tämän tutkimuksen perusteella ilmeni myös, että yksi simuloinnin merkittävimmistä käyttökohteista on operaattoreiden koulutus. Operaattoreille on kehitetty eri simulointiohjelmistojen valmistajien toimesta operaattoreiden koulutussimulaattoreita, joiden avulla operaattorit pääsevät harjoittelemaan normaalista poikkeavia tilanteita turvallisesti ja kannattavasti virtuaaliympäristössä. Tällaisia poikkeavia tilanteita ovat muun muassa prosessin käynnistys tai alasajo sekä harvoin esiintyvät vaaratilanteet. Työssä selvitettiin myös koulutussimulaattoreiden tulevaisuuden näkymää kirjallisuuskatsauksen avulla. Sen mukaan koulutussimulaattoreiden kehittäminen sekä niiden yhdistäminen muiden ohjelmistojen ja virtuaalitodellisuuden kanssa luovat tulevaisuudessa uusia mahdollisuuksia, kuten paremmat oppimisympäristöt.

Vaikka tuotannon työntekijät ja johto voivat hyödyntää monipuolisesti simulointiohjelmistojen tarjoamia toimintoja, selvisi tutkimuksen perusteella, että pääsääntöinen käyttö on kuitenkin insinööreillä. Insinöörit käyttävät simulointiohjelmitoja apuna muun muassa prosessien suunnittelussa ja optimoinneissa. Simulointiohjelmistojen käyttö helpottaa ja nopeuttaa insinöörien työtä, sillä simulointiohjelmisto ratkaisee monimutkaiset prosesseihin liittyvät laskut.

Edellä mainittujen käyttökohteiden lisäksi prosessisimuloinnista saatuja tuloksia voidaan hyödyntää vaara-analyyseissä ja riskien hallinnassa, jotka vaikuttavat koko tuotanto-organisaation turvallisuuteen. Itse simuloinneilla voidaan tutkia esimerkiksi eri laitteiden maksimipaineita, joiden avulla voidaan luoda hälytysjärjestelmä tietylle laitteelle. Laitteen saavuttaessa maksimipainetta, saadaan ilmoitus ja asiaan ehditään reagoimaan ajoissa.

Työssä esiteltiin myös kaksi esimerkkitapausta, joissa yhdistettiin Aspen HYSYS -simulointiohjelmisto kahteen eri ohjelmistoon. Tarkoituksena oli löytää prosessissa olevia vaaranpaikkoja ja käyttää saatuja tuloksia HAZOP-tutkimuksissa. Ensimmäisessä

esimerkkitapauksessa simulointiohjelmisto yhdistettiin simulointidatan analyysimoduuliin ja toisessa MATLAB-laskentaohjelmistoon. Molemmissa esimerkkitapauksissa saatiin selville, että simulointiohjelmiston yhdistäminen mahdollisti prosessissa olevien vaaranpaikkojen analysoinnin helpommin ja nopeammin sekä saatujen tulosten avulla pystyttiin parantamaan prosessin turvallisuutta. Vaikka simulointiohjelmitoja voidaan käyttää yksinään riskien hallinnan apuna, selvisi tutkimusten perusteella niiden yhdistämisen muiden ohjelmistojen kanssa olevan tehokkaampaa isommassa mittakaavassa.

Tässä työssä tutkittiin myös simulointiohjelmistojen tulevaisuuden näkymää yleisesti, sillä simulointi tulee olemaan aina vain tärkeämpi osa prosessien suunnittelussa. Erityisesti tietokoneiden kapasiteettien kasvaessa koneiden suorituskyky paranee ja monimutkaisemmatkin simuloinnit voidaan suorittaa vaivattomammin. Tulevaisuudessa myös käynnissä olevan teollisen vallankumouksen, Teollisuus 4.0, ideologia yhdistää eri ohjelmistot toisiinsa yhteisen kielen avulla tuo paljon mahdollisuuksia kemianteollisuuden yrityksissä. Teollisuus 4.0 liittyvän tutkimuksen perusteella selvisi, että tämän seurauksena voidaan välttää turhia datan siirrosta aiheutuvia virheitä ja tieto on helposti saatavilla yhdessä paikkaa. Tämän avulla pystytään myös parantamaan prosessien turvallisuutta.

Tässä tutkimuksessa ilmenevistä näkökulmista katsoen onkin tarpeellista, että simulointiohjelmistojen käyttökohteiden arvo ymmärretään entistä paremmin. Simulointiohjelmitoilla on sekä tulee olemaan tärkeä rooli eri tuotanto-organisaation jäsenille, erityisesti ohjelmistojen kehittämisen myötä. Jatkotutkimuksissa olisi hyvä tutkia eri simulointiohjelmistojen yhdistämistä muiden ohjelmistojen kanssa sekä miten simulointiohjelmitoja voidaan kehittää vielä paremmin vastaamaan uusien monimutkaisten prosessien, kuten bioprosessien tarpeita.



## 7 Lähteet

Anwar H.M.I., 2011. Simulation of Solid Processes by Aspen Plus. Diplomityö. Lappeenrannan teknillinen yliopisto. Lappeenranta. 106 s.

Aspen Technology Inc. 2021. Aspen Operator Training. [Verkkodokumentti]. [Viitattu 16.1.2021]. Saatavilla: <https://www.aspentech.com/en/products/engineering/aspen-operator-training>

Aspen Technology Inc. 2021. AspenONE Engineering. [Verkkosivu]. [Viitattu 26.2.2021]. Saatavilla: <https://www.aspentech.com/en/products/pages/aspenone-engineering>

Bryan Research & Engineering. 2021. ProMax-Main. [Verkkodokumentti]. [Viitattu 21.2.2021]. Saatavilla: <https://www.bre.com/ProMax-Main.aspx>

Chaves, I., López, J., Zapata, J., Robayo, A., Niño, G., 2016. Process Analysis and Simulation in Chemical Engineering. Springer International Publishing, Sveitsi. ISBN 978-3-319-14812-0

Chemstations Inc. 2021. ChemCAD brochure detail. [Verkkodokumentti]. [Viitattu 13.1.2021]. Saatavilla: [https://www.chemstations.com/content/CHEMCAD\\_brochure\\_detail.pdf](https://www.chemstations.com/content/CHEMCAD_brochure_detail.pdf)

De Tommaso, J. Rossi, F. Moradi, N. Pirola, C. Patience, G. & Galli, F. 2020. Experimental methods in chemical engineering: Process simulation. Canadian journal of chemical engineering. Vol. 98, s. 2301-2320. ISSN: 0008-4034

Dimian, A. C. Bildea, C. S. & Kiss, A. A. 2019. Applications in design and simulation of sustainable chemical processes. Amsterdam, Netherlands; Elsevier. ISBN: 0-444-63886-5

Edmonds, J. 2016. Human Factors on the Chemical and Process Industries – Making it Work in Practise, Elsevier: Saint Louis. ISBN: 978-0-1280-3878-9

EQUA Simulation AB. 2020. Simulointiohjelmisto. [Verkkodokumentti]. [Viitattu 25.2.2021]. Saatavilla: <https://www.equa.se/fi/about-us/building-performance-simulation>

- Feng, Y. & Rangaiah, G. P. 2011. Evaluating Capital Cost Estimation Programs. *Chemical Engineering*. pp. 22-29. ISBN: 978-3-319-28253-4
- Foo, D.C.Y. & Elyas, R. 2017. Introduction. *Chemical Engineering Process Simulation*. Elsevier: Amsterdam. pp. 3-21. ISBN: 978-0-12-803871-0
- Golwalkar, K. R. 2016. *Production Management of Chemical Industries*. 1<sup>st</sup> ed. Springer International Publishing. Sveitsi. ISBN: 978-3-319-28253-4
- Gunal, M. M. 2019. *Simulation for Industry 4.0 Past, Present, and Future*. 1<sup>st</sup> ed. 2019. [Online]. Cham: Springer International Publishing. ISBN: 978-3-030-04137-3
- Hangos, K.M. & Cameron, I.T. 2001, *Process modelling and model analysis*, Academic Press, San Diego.
- Honeywell International Inc. 2021. Products. [Verkkosivu]. [Viitattu 26.2.2021]. Saatavilla: [https://www.honeywellprocess.com/enUS/online\\_campaigns/unisimdesign/Pages/products.html#proj0](https://www.honeywellprocess.com/enUS/online_campaigns/unisimdesign/Pages/products.html#proj0)
- Intelligen Inc. 2020. SuperPro Designer Product Features. [Verkkosivu]. [Viitattu 26.2.2021]. Saatavilla: <https://www.intelligen.com/products/superpro-product-features/>
- Janošovský, J., Danko, M., Labovský, J. & Jelemenský, Ľ 2017, The role of a commercial process simulator in computer aided HAZOP approach, *Process Safety and Environmental Protection*, vol. 107, pp. 12-21. ISSN: 0957-5820
- Janošovský, J., Danko, M., Labovský, J. & Jelemenský, Ľ 2019, Software approach to simulation-based hazard identification of complex industrial processes, *Computers & Chemical Engineering*, vol. 122, pp. 66-79. ISSN: 0098-1354
- Kummer, A. & Varga, T. 2019. Process simulator assisted framework to support process safety analysis. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*. vol. 58, pp. 22-29. ISSN: 0950-4230

- Lee, J., Cameron, I. & Hassall, M. 2019, Improving process safety: What roles for Digitalization and Industry 4.0?. *Process Safety and Environmental Protection*, vol. 132, pp. 325-339. ISSN: 0957-5820
- Leppävuori, J. Olin, M. Valli, A. Lahti, S. Hasari, H. Koistinen, A. & Leppänen, S. 2009. SISU – Simuloinnin ja suunnittelun uudet sovellustavat ja liiketoiminta. Yliopistopaino: Helsinki. ISSN 1797-8203
- Manca, D. Totaro, R. Nazir, S. Brambilla, S. Colombo, S. 2012. Virtual and Augmented Reality as Viable Tools to Train Industrial Operators. *Computer Aided Chemical Engineering*, vol. 31, pp. 825-829. ISSN: 1570-7946
- Nazir, S. Manca, D. & Colombo, S. 2012. The Role of Situation Awareness for the Operators of Process Industry. *Chemical Engineering Transactions*. vol. 26, pp. 303-308 DOI: 10.3303/CET1226051
- PaperMac AB. 2013. FlowMac. [Verkkosivu]. [Viitattu 26.2.2021]. Saatavilla: <http://www.papermac.se/FlowMac>
- Patle, D.S., Manca, D., Nazir, S. & Sharma, S. 2019. Operator training simulators in virtual reality environment for process operators: a review. *Virtual Reality*. vol. 23, no. 3, s. 293-311. ISSN: 1359-4338
- Pattison, R.C. & Baldea, M. 2014, Equation-oriented flowsheet simulation and optimization using pseudo-transient models, *AIChE Journal*, vol. 60, no. 12, pp. 4104-4123.
- SimulateLive.com, 2017. Process simulation as the key discipline of chemical engineering. [Verkkosivu]. [Viitattu 21.2.2021]. Saatavilla: <https://simulatelive.com/simulate/steady-state/process-simulation-as-the-key-discipline-of-chemical-engineering>
- Starr, T. 2018. Process Hazard Analysis Handbook - Advanced Edition. Icarus-ORM. ISBN: 978-1-5231-2396-4
- Taqvi, S.A., Tufa, L.D. & Muhadizir, S. 2016, Optimization and Dynamics of Distillation Column Using Aspen Plus®, *Procedia Engineering*, vol. 148, pp. 978-984.

Technical Research Centre of Finland. 2013. Balas Overview. [Verkkosivu]. [Viitattu 26.2.2021]. Saatavilla: <http://virtual.vtt.fi/virtual/balas/>

Towler, G. P. & Sinnott, R. K. 2013. Chemical engineering design: principles, practice, and economics of plant and process design. 2nd ed. Oxford; Butterworth-Heinemann. ISBN: 978-0-08-096660-1

Upreti, S.R. 2017, Process modeling and simulation for chemical engineers: theory and practice. 1st ed. Wiley, New York. ISBN: 978-1-5231-1476-4

VTT Technical Research Centre of Finland. 2020. Apros Paper – Pulp and Paper Process Models. [Verkkosivu]. [Viitattu 26.2.2021]. Saatavilla: [https://www.apros.fi/wp-content/uploads/sites/27/2020/09/62-Apros\\_-\\_Pulp\\_and\\_Paper\\_Process\\_Models.pdf](https://www.apros.fi/wp-content/uploads/sites/27/2020/09/62-Apros_-_Pulp_and_Paper_Process_Models.pdf)

WinSim Inc. 2020. Winsim's design II for windows process simulation solution. [Verkkosivu]. [Viitattu 26.2.2021]. Saatavilla: <https://www.winsim.com/design.html>

Yang, S.H., Yang, L. & He, C.H. 2001. Improve Safety of Industrial Processes Using Dynamic Operator Training Simulators. *Process Safety and Environmental Protection*. vol.79. no.6. pp.329-338. ISSN:0957-5820