

## **Тема 4.1. Применение систем автоматизации инженерных расчетов и моделирования в нефтегазовой отрасли**

### **Применение моделирующих систем**

Выше уже было сказано об огромной инженерной значимости систем автоматизации инженерных расчетов. Сфера их применения широка и функциональные возможности таких систем чрезвычайно богаты: от прочностных расчетов конструкций до расчетов и моделирования гидродинамических процессов. Такие программы могут являться как частью САПР, так и самостоятельными приложениями.

Большинство программного обеспечения для расчетов содержит средства моделирования и визуализации и порой трудно однозначно сказать к какому классу программ относится то или иное программное обеспечение, поэтому в контексте данной лекции мы будем обобщенно называть их системами моделирования (хотя некоторые из них, имеющие широкий профиль применения, разработчики позиционируют именно как CAE).

Современные средства моделирования, которые могут быть использованы для разработки, анализа и проектирования новых производств, и для анализа работы существующих, весьма многообразны. Они позволяют автоматизировать практически все стадии инженерного труда и свести к минимуму затраты рабочего времени, трудовых ресурсов и денежных средств. При этом поставленная задача решается оптимально, с учетом накопленного опыта и данных. Совершенно очевидно, что конкурентное развитие техники и технологии невозможно без широкомасштабного использования таких средств моделирования как в проектных и исследовательских организациях, так и на производстве.

**В нефтегазовой отрасли можно выделить несколько общих направлений применения моделирования:**

- геолого-геофизические процессы поиска и разведки;
- добыча и подъем нефти и газа;
- транспортировка трубопроводным транспортом;
- технологические процессы переработки.

Каждое из направлений включает в себя несколько десятков подвидов, зачастую повторяющихся у разных направлений, например, моделирование тепловых, гидродинамических процессов, процессов фазового перехода, расчет технологических схем и т.д.

В рамках получаемой студентами специальности наибольший интерес представляет два последних, однако должное внимание будет уделено и вопросам моделирования процессов добычи и подъема, а в конце лекции кратко рассматриваются программные приложения для моделирования процессов поиска и разведки. При этом все-таки львиная доля использования систем моделирования приходится на моделирование технологических процессов переработки.

Математические модели технологических процессов нефтегазовой отрасли обычно достаточно сложны для вычислений. Для компьютерного моделирования простой технологической схемы, например, из пяти аппаратов и нескольких потоков нужно последовательно рассчитывать все единицы оборудования (аппараты) производства. Одновременно для каждого потока нужно рассчитывать его свойства – температуру, давление, расход, состав, долю пара и его энтальпию. При наличии в технологической схеме рециклических потоков необходимо реализовывать итерационные процедуры их расчетов путем последовательных приближений к решению. Это очень трудоемкий процесс, выполнение которого невозможно без применения моделирующих программ.

При разработке новых технологических процессов необходимо проанализировать множество альтернативных вариантов, и только компьютерное моделирование позволяет отбросить неподходящие варианты и за короткое время найти наилучшее решение.

Выбор более эффективных систем управления при решении задач АСУТП требует реализации динамических моделей аппаратов с простым регулированием и, возможно, более сложным, например, каскадным регулированием. Моделирующие программы позволяют реализовать динамические модели процессов совместно с регуляторами и исполнительными устройствами и

выбирать оптимальные условия для управления производствами.

Возможность реализации динамических моделей с контурами регулирования в моделирующих программах также позволяет строить на их основе тренажеры для операторов нефтегазовых производств.

В условиях действующих производств постоянно приходится искать более эффективные решения текущих производственных задач. Моделирующая программа поможет проанализировать реальную ситуацию, определить сущность проблемы и пути ее наиболее эффективного и недорогого решения.

**К наиболее важным преимуществам моделирования технологических процессов относятся:**

- организация расчетных исследований и причинно-следственного анализа для выбора оптимального варианта технологического процесса, соответствующего поставленным целям;
- нахождение оптимальных режимов работы оборудования для получения желаемой производительности установок и желаемого качества продуктов;
- оценка влияния изменения характеристик сырья, сбоев в работе и остановки оборудования на безопасность, надежность и рентабельность установки;
- возможность расчета и проверки параметров системы управления в режиме динамического моделирования;
- наблюдение за состоянием оборудования;
- оценка таких дефектов оборудования, как загрязнение теплообменников и захлебывание тарелок ректификационных колонн путем моделирования и мониторинга оборудования реальной установки.

Таким образом, разработка современных технологических процессов переработки природного углеводородного сырья и оптимальная эксплуатация действующих производств невозможна без применения моделирующих программ, имеющих высокую точность описания параметров технологических процессов и позволяющих без значительных материальных и временных затрат производить исследования этих процессов. Такие модельные исследования имеют огромное значение не только для проектирования с помощью САПР, но и для функционирования существующих производств, так как позволяет учесть влияние внешних факторов (изменение состава сырья, изменение требований к конечным и промежуточным продуктам и т.д.) на показатели действующих производств и разработать адекватную систему управления на основе динамического моделирования процесса.

Часто моделирующие программы также называют симуляторами. В общем случае **с применением современных симуляторов технологических процессов в нефтегазовой отрасли решаются следующие задачи:**

- анализ, оптимизация и синтез технологических систем нефтегазовой отрасли для проектируемых и действующих производств;
- исследование динамического поведения технологических систем для синтеза систем управления;
- разработка компьютерных систем обучения операторов нефтегазовых производств, в частности тренажерных комплексов.

### **Общие принципы моделирования в нефтяной и газовой промышленности**

В данной и последующей части лекции рассматриваются основные принципы моделирования, заложенные в эти системы, их состав и их основные характеристики, позволяющие оценить пригодность различных инструментов для решения широкого круга задач, встающих перед инженерным персоналом газовой и нефтяной промышленности.

Моделирующие программы химико-технологических процессов представляют собой универсальную программную оболочку, в которой реализуются **три основных режима работы моделирующей программы:**

- «изображение процесса» – для графического представления технологической схе-

- мы производства (рисунок 1);
- «расчеты» – для выполнения вычислений с применением реализованных в виде расчетных модулей алгоритмов решения задач компьютерного моделирования (рисунок 2);
- «диаграмма процесса» – для представления результатов выполненных расчетов в виде таблиц, графиков и диаграмм (рисунок 3).

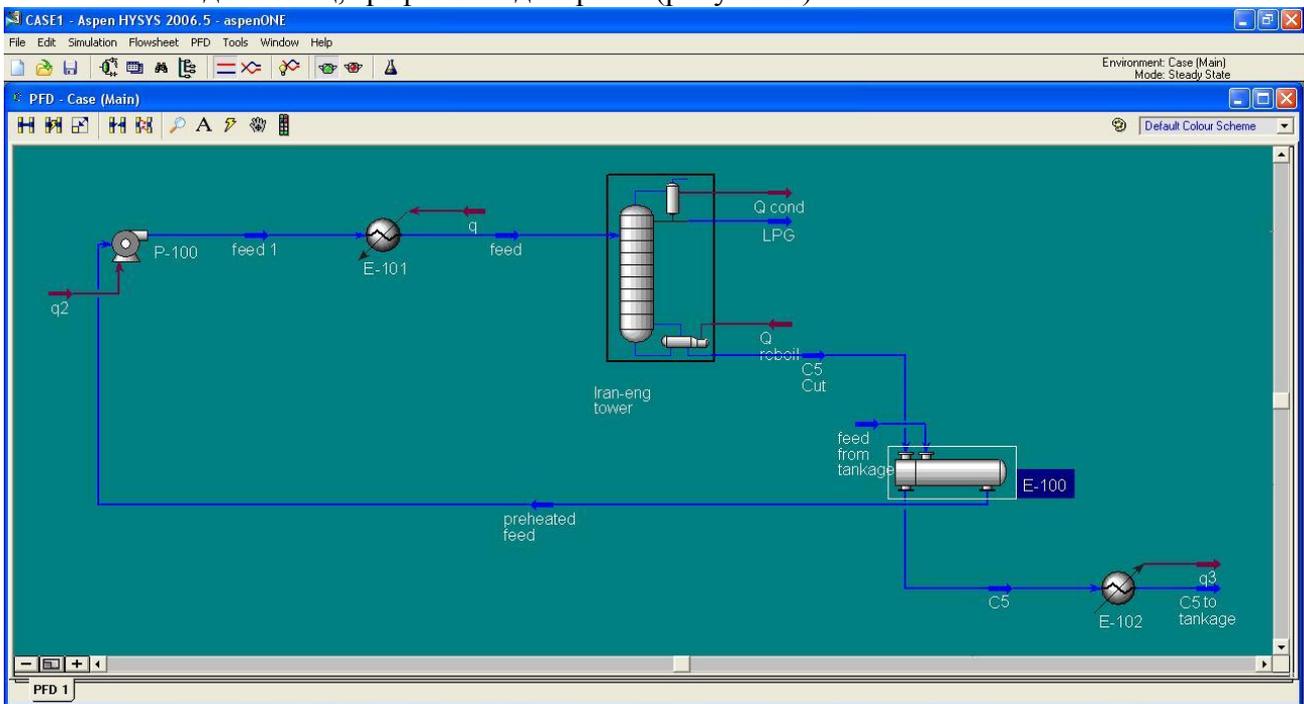


Рисунок 1. «Изображение процесса» (HYSYS)

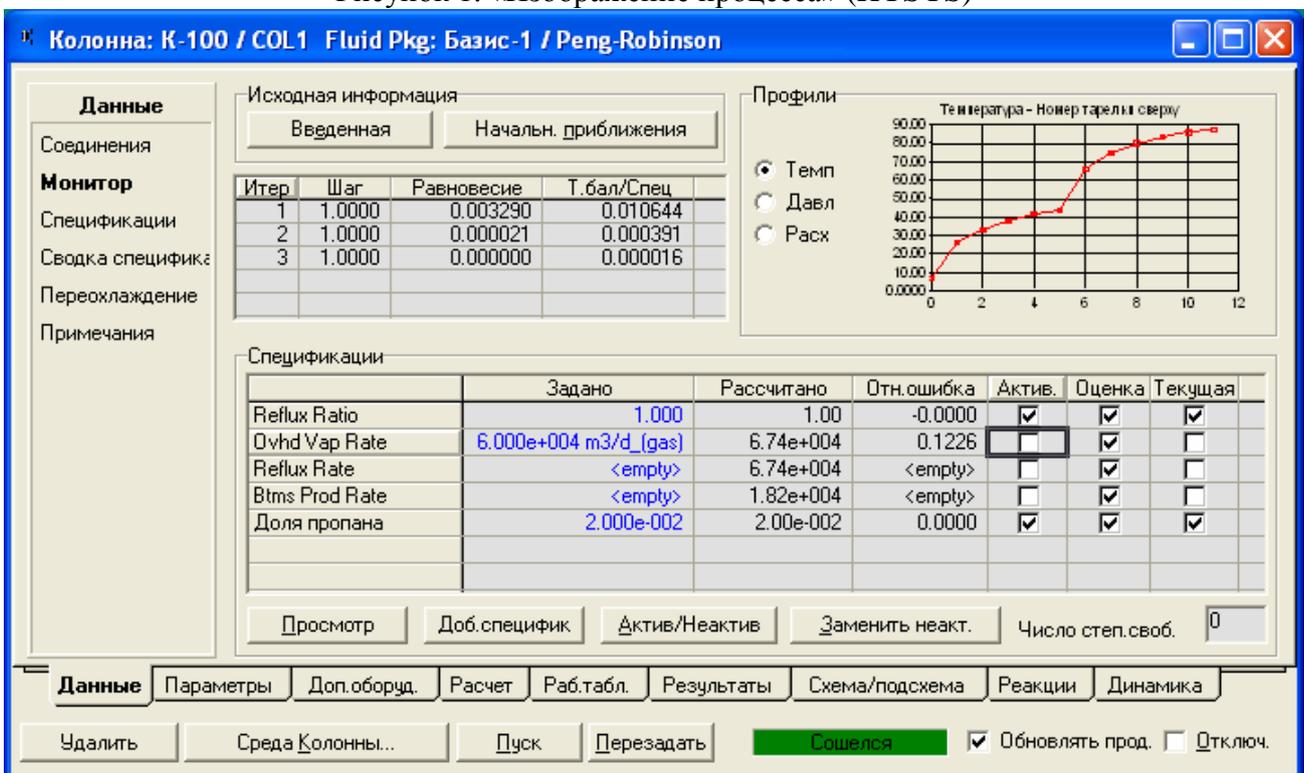


Рисунок 2. «Расчеты» (HYSYS)

Каждый из трех основных режимов требует реализации специальных модулей, с использованием которых можно построить технологическую схему любого процесса и решать комплекс задач его моделирования на компьютерах. При этом данные, необходимые для проведения расчетов, как, например, физико-химические свойства веществ, алгоритмы для вычисления свойств многокомпонентных смесей, различные алгоритмы для поверочно-оценочных и проектных рас-

четов аппаратов, включены в состав программы (пакета). Это означает, что расчетные модули используют для вычислений данные из фактографической базы данных (БД) по физико-химическим свойствам индивидуальных веществ. Для выбора алгоритмов расчета свойств многокомпонентных смесей и алгоритмов расчета аппаратов (единиц оборудования) технологической схемы в состав моделирующих программ включаются экспертные системы (ЭС), которые с учетом покомпонентного состава систем, по конкретным данным о диапазонах изменения температур и давлений производства «предлагают» сделать оптимальный выбор термодинамического метода или вычислительного алгоритма. Состав типовой системы моделирования подробнее рассмотрен далее.

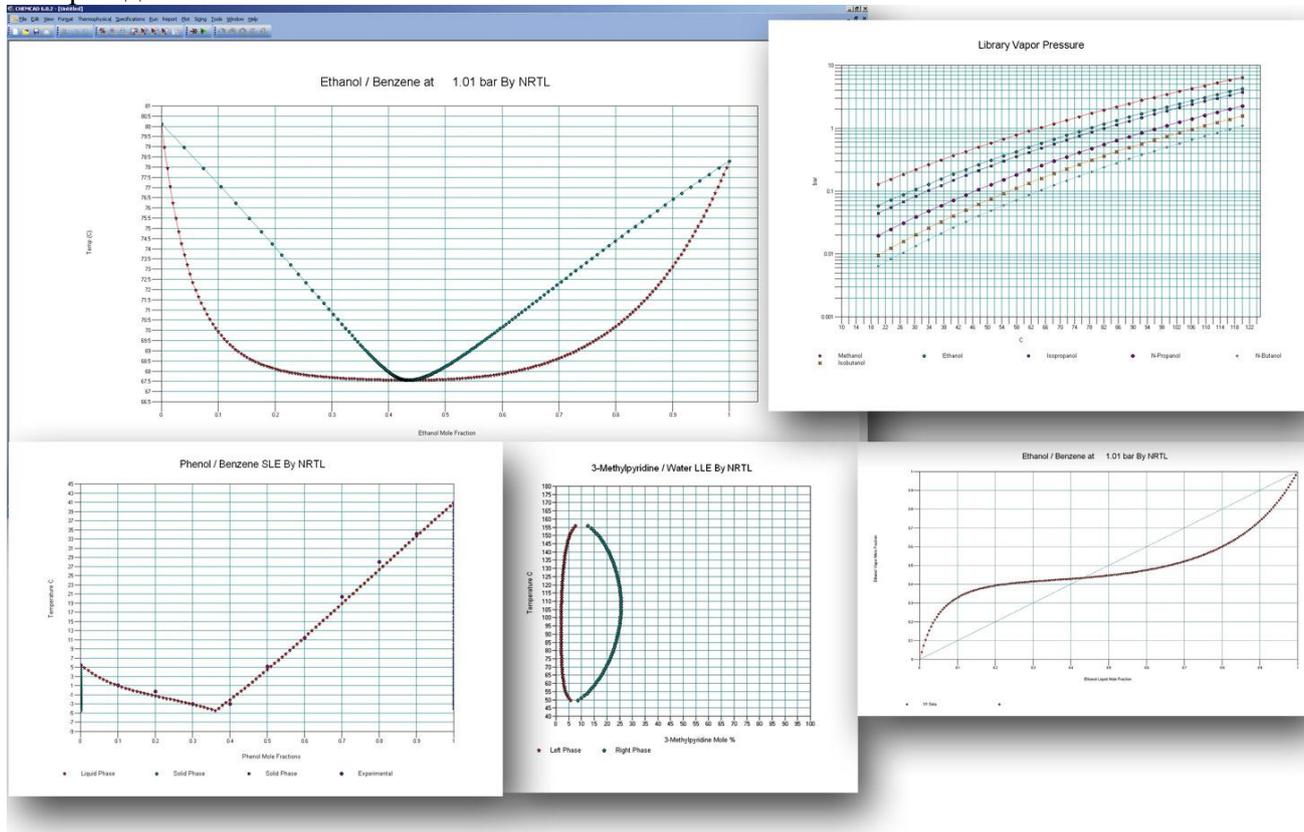


Рисунок 3. Графики процесса в ChemCAD

В основу всех средств моделирования заложены общие принципы расчетов материально-тепловых и энергетических балансов химических производств (т.е. производств, связанных с изменением агрегатного состояния, компонентного и химического состава материальных потоков). Как правило, любое производство состоит из стадий (элементов), на каждой из которых производится определенное воздействие на материальные потоки и превращение энергии. Последовательность стадий обычно описывается с помощью технологической схемы, каждый элемент которой соответствует определенному технологическому процессу (или группе совместно протекающих процессов).

Видимая часть этой схемы является набором обозначений аппаратов (единиц оборудования), связанных между собой потоками, и представляет собой определенного вида принципиальную схему химического производства, которая реализуется в основном режиме «Изображение процесса» и содержит две категории объектов (рисунок 1):

- единицы оборудования (аппараты), для расчета которых используют специальные вычислительные алгоритмы (иногда для расчета одного и того же физического аппарата предлагаются несколько возможных алгоритмов, среди которых нужно выбрать наиболее подходящий для конкретного случая);
- материальные и энергетические потоки, связывающие линиями единицы оборудования технологической схемы (информация о параметрах входных потоков в аппараты включается в число исходных данных для расчета аппаратов, а в выходных потоках из аппаратов фиксируются некоторые результаты расчетов единиц оборудования).

Невидимая часть технологической схемы, реализуемая в основном режиме «Расчеты», позволяет при выделении (нажатии на изображение) каждого аппарата и каждого входного потока всего производства задать параметры для расчета свойств потоков, режимные и конструкционные параметры для расчетов аппаратов (рисунок 4), а также параметры сходимости расчетов в используемых при этом вычислительных алгоритмах.

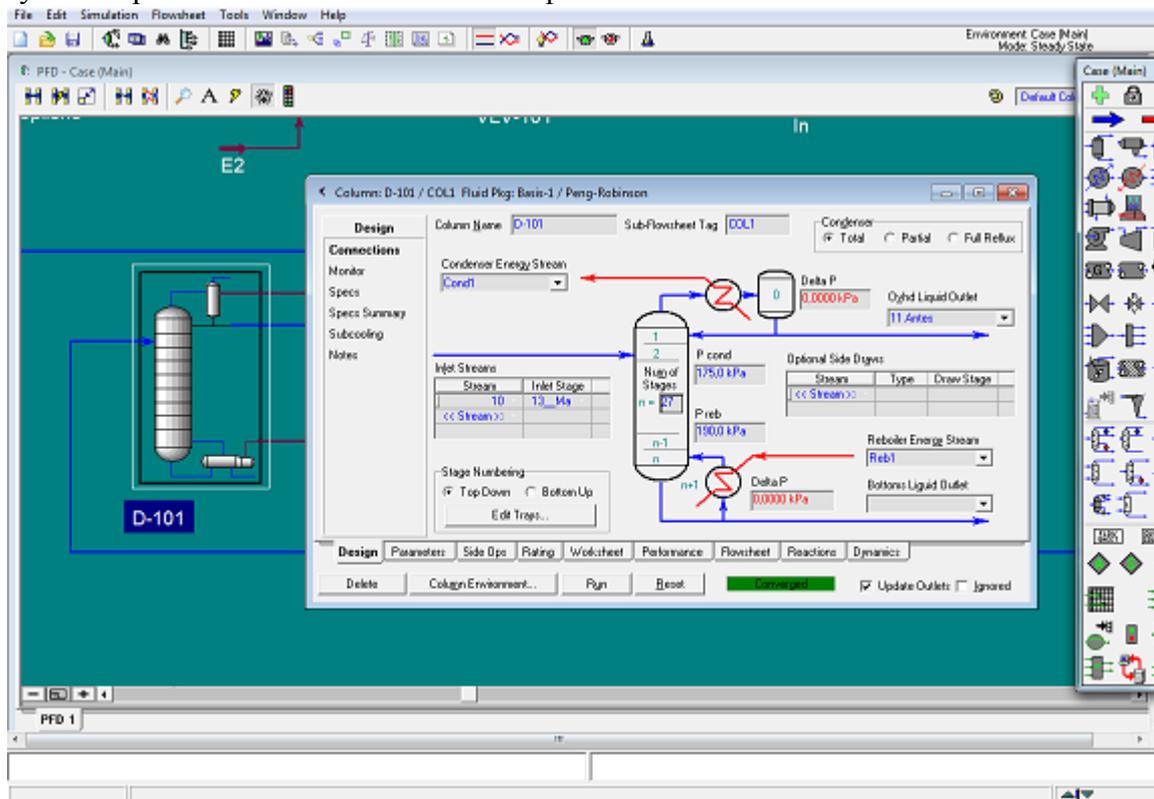


Рисунок 4. Задание параметров оборудования

Кроме этих данных, как уже отмечалось выше, для расчета аппаратов и потоков необходимы фактографические данные о свойствах индивидуальных веществ из соответствующей базы данных (БД), также следует выбрать адекватный метод расчета физико-химических свойств смесей, образуемых этими веществами.

По принципиальной технологической схеме симулятор «самостоятельно» идентифицирует рециклический (обратный) поток, задает начальные приближения для его расчета в выбранной или выбранных автоматически точках. При отсутствии некоторых физико-химических коэффициентов или констант для расчетов в базах данных моделирующей программы они могут быть определены из вводимых в программу экспериментальных данных, например, по фазовому равновесию жидкость-пар.

После задания всех параметров для вычислений выполняется расчет технологической схемы всего производства (основной режим «Расчеты»). Одним из наиболее важных результатов расчета технологической схемы всего производства является определение для него материального и теплового баланса (т.е. в целом моделирование и расчет технологической схемы основаны на применении общих принципов термодинамики и массообмена к отдельным элементам схемы и к системе в целом).

Для определения конструкционных параметров и размеров единиц оборудования могут быть реализованы алгоритмы расчетов размеров и конструкционных характеристик различных типов теплообменников, ректификационных колонн, труб и т.д.

Результаты расчетов могут быть представлены в виде отдельных таблиц или графиков (рисунок 3) для каждого аппарата или свойств любого потока, либо в виде комплексного отчета, генерируемого пользователем, или диаграммы процесса в соответствующем третьем основном режиме работы пакета моделирующей программы.

В основном режиме «Диаграмма процесса» на изображении принципиальной технологической схемы производства также можно представить некоторые рассчитанные результа-

ты свойств всех потоков и всех аппаратов.

Отметим также, что важными **требованиями, предъявляемыми к современным программам моделирования (симуляторам) являются:**

- возможность создания пользователем собственного изображения единиц оборудования (аппаратов) технологической схемы;
- наличие возможности включения в программный пакет собственных разработок, в частности, алгоритмов расчета физико-химических свойств многокомпонентных смесей и алгоритмов расчета единиц оборудования;
- интегрируемость программы с другими программными продуктами, прежде всего, с используемыми для монтажно-технологического проектирования, например, с AutoCAD.

### Состав моделирующих программ

В настоящий момент состав моделирующих программ подчиняется требованию модульности. Во многом это связано с существованием стандарта CAPE-OPEN (Open Computer Aided Process Engineering) – специально разработанного стандарта в системе компьютеризированного моделирования технологического производства, предназначенного для согласования между собой компонентов универсальных моделирующих программ различных разработчиков. Он основывается на общепризнанных в программировании технологиях COM и CORBA. Непосредственно сам стандарт CAPE-OPEN является открытым, мультиплатформенным, унифицированным и бесплатно распространяемым.

Проект CAPE-OPEN начал свое развитие в 1997 году, а в 1999 году вышла первая версия стандарта. Основная цель, преследуемая его разработчиками, заключалась в обеспечении взаимодействия моделирующих программ разных производителей и, возможно в дальнейшем, распределенных на различных ЭВМ. Упрощенная, типичная схема универсальной моделирующей программы, компоненты которой созданы в соответствии со стандартом CAPE-OPEN, приведена на рисунке 5.

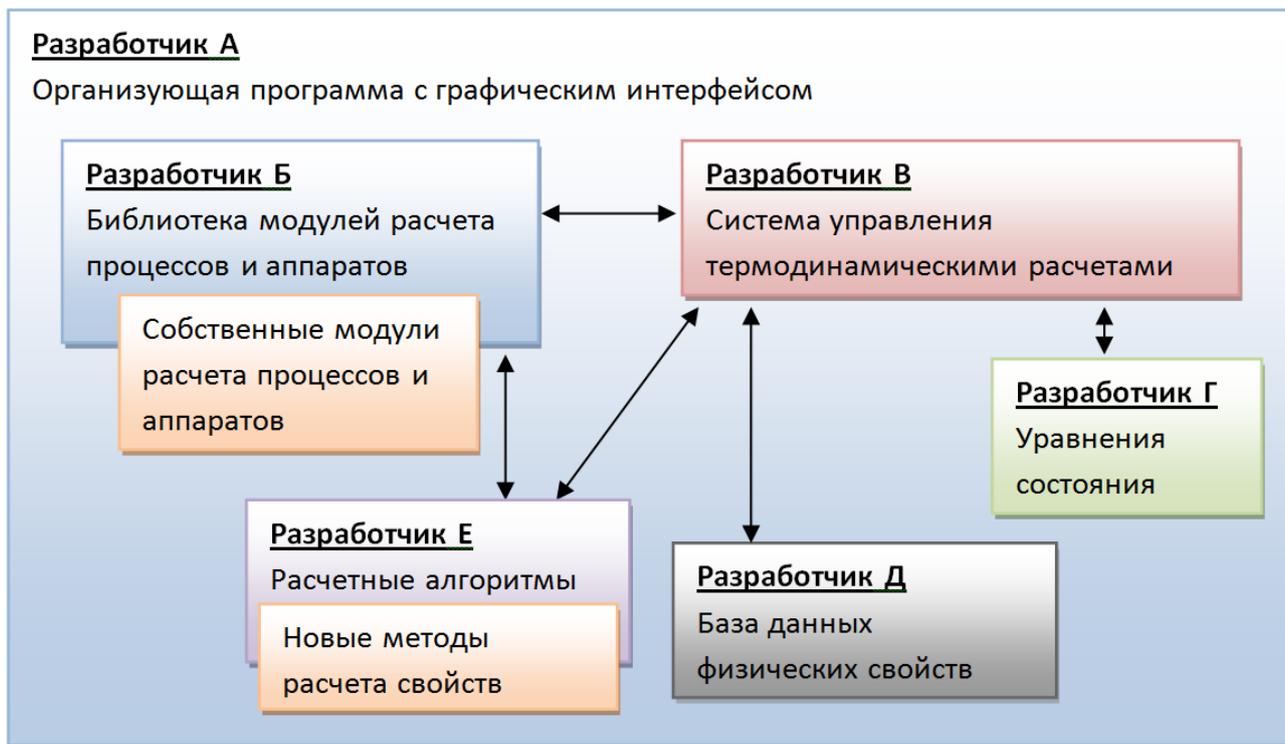


Рисунок 5. Схема типичной универсальной моделирующей программы (с позиций стандарта CAPE-OPEN)

Следует отметить, что в настоящее время к проекту CAPE-OPEN присоединились и в той либо иной мере его поддерживают следующие производители программного обеспечения:

ANSYS, Aspen Technology (Aspen Plus, HYSYS), Heat Transfer Research Inc. (HTRI), SimSci-Esscor (PRO/II), Virtual Materials Group (VMGSim. VMGThermo) и многие другие.

**Большинство систем моделирования включает набор следующих основных подсистем,** обеспечивающих решение задачи моделирования химико-технологических процессов:

- набор термодинамических данных по чистым компонентам (база данных) и средства, позволяющие выбирать определенные компоненты для описания качественного состава рабочих смесей;
- средства представления свойств природных углеводородных смесей, главным образом – нефтей и газоконденсатов, в виде, приемлемом для описания качественного состава рабочих смесей, по данным лабораторного анализа;
- различные методы расчета термодинамических свойств, таких как коэффициент фазового равновесия, энтальпия, энтропия, плотность, растворимость газов и твердых веществ в жидкостях и фугитивность паров;
- набор моделей для расчета отдельных элементов технологических схем процессов;
- средства для формирования технологических схем из отдельных элементов;
- средства для расчета технологических схем, состоящих из большого числа элементов, определенным образом соединенных между собой.

#### Термодинамические данные по чистым компонентам

Эти данные необходимы для расчета термодинамических свойств, таких как коэффициент фазового равновесия, энтальпия, энтропия, плотность, растворимость газов и твердых веществ в жидкостях и фугитивность паров. Они включают:

- критические параметры и фактор ацентричности;
- молекулярная масса;
- плотность в точке кипения или при стандартных условиях;
- температура кипения при атмосферном давлении;
- константы для расчета идеально-газовой теплоемкости или идеально-газовой энтальпии, энергии Гиббса, теплоты образования и сгорания, вязкости, поверхностного натяжения и т.п.

Обычно, моделирующие системы имеют встроенные базы данных свойств чистых компонентов. Число чистых компонентов обычно превышает 1000, что дает возможность использовать программу практически для любых случаев. На практике, при решении задач, характерных для газовой и нефтяной промышленности, используются не более 50 компонентов.

#### Средства представления и анализа свойств нефтей и газовых конденсатов

Эти средства необходимы, чтобы на основе данных лабораторных исследований свойств нефтей, газоконденсатов и нефтепродуктов получить необходимые данные для адекватного представления этих смесей в моделирующей системе. Потоки углеводородов могут быть определены (заданы) с помощью лабораторных данных разгонки (рисунок 6). Обычно эти данные состоят из собственно данных разгонки (ИТК, ASTM D86, ASTM D1160 или ASTM D2887), данных по удельному весу (средний удельный вес и, возможно, кривая удельного веса) и, если возможно, данных по молекулярному весу, содержанию легких компонентов, а также данных по специальным товарным свойствам, таким как температура застывания и содержание серы. Эта информация используется для генерации набора дискретных псевдокомпонентов, которые потом применяются для представления состава каждого потока, характеризуемого кривой разгонки.

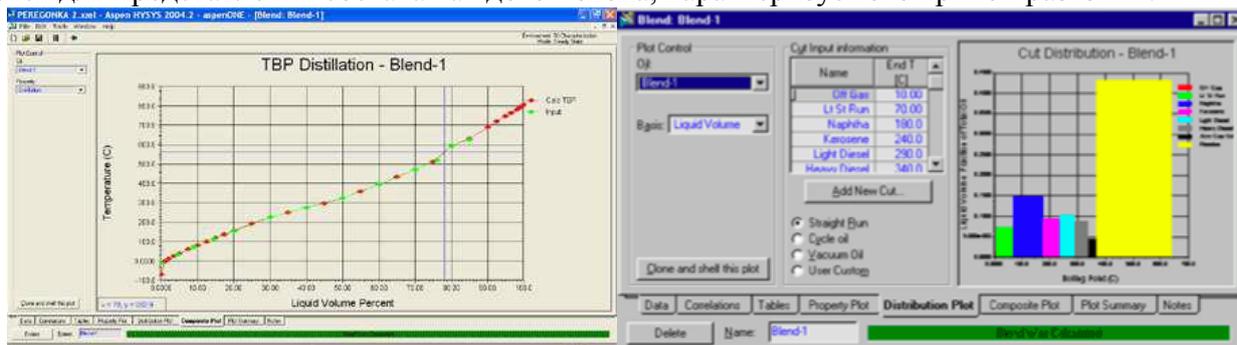


Рисунок 6. Представление состава углеводорода по данным разгонки

## Методы расчета термодинамических свойств

Обычно моделирующая система включает различные методы расчета термодинамических свойств, таких как коэффициент фазового равновесия, энтальпия, энтропия, плотность, растворимость газов и твердых веществ в жидкостях и фугитивность паров. Данные методы включают в себя:

- обобщенные корреляции, такие как метод расчета коэффициентов фазового равновесия Чао-Сидера и метод расчета плотности жидкости API;
- уравнения состояния, такие как метод расчета Соава-Редлиха-Квонга для коэффициента фазового равновесия, энтальпий, энтропий и плотностей;
- методы коэффициентов активности жидкости, такие как метод NRTL (Non-Random Two-Liquid – неслучайное двухжидкостное) для расчета коэффициента фазового равновесия;
- методы фугитивности паров, такие как метод Хайдена-О’Коннела для димеризующихся веществ;
- специальные методы расчета свойств специфических систем компонентов, таких как спирты, амины, гликоли и системы кислой воды.

Наиболее часто для моделирования процессов обработки природного газа и нефти используются уравнения состояния Пенга-Робинсона и Соава-Редлиха-Квонга и их модификации. Эти методы позволяют решить большую часть технологических проблем, возникающих при моделировании задач нефтегазопереработки.

## Средства моделирования процессов

От состава средств моделирования отдельных процессов зависят функциональные возможности всей моделирующей системы. Как правило, **все моделирующие системы включают средства для моделирования следующего набора процессов:**

- сепарация газа и жидкости (двух несмешивающихся жидкостей);
- однократное испарение и конденсация;
- дросселирование;
- адиабатическое сжатие и расширение в компрессорах и детандерах;
- теплообмен двух потоков;
- нагрев или охлаждение потока;
- ветвление и смешение потоков;
- процессы в дистилляционных колоннах с возможностью подачи и отбора боковых материальных и тепловых потоков:
  - а) абсорберы;
  - б) конденсационные (укрепляющие) колонны;
  - в) отпарные (исчерпывающие) колонны;
  - г) дистилляционные колонны.

Все программы позволяют моделировать сложные дистилляционные системы со стриппингами, боковыми орошениями, подогревателями и т.д., т.е. решать наиболее сложные задачи первичной переработки нефти. Большинство задач дистилляции применительно к процессам переработки природного газа и конденсата, имеющимся на действующих производствах, с помощью рассматриваемых пакетов решаются успешно и с высокой скоростью.

Такого набора процессов достаточно для моделирования основного круга задач газопереработки. Системы моделирования могут содержать также средства для моделирования процессов, расширяющих сферу их использования на химическую и нефтехимическую промышленность:

- теплообмен в многопоточных теплообменниках;
- химические процессы в реакторах (в т.ч. стехиометрический, с минимизацией энергии Гиббса, равновесный, полного вытеснения и смешения);
- процессы в экстракторах жидкость-жидкость;
- процессы с твердой фазой (кристаллизаторы, центрифуги, фильтры, сушилки и т.д.).

Часто в моделирующих системах имеются средства для написания несложных программ

для моделей пользователями. При этом используется достаточно простой макроязык.

### Средства построения технологических схем из отдельных элементов

**По способу построения технологических схем** из отдельных элементов моделирующие программы можно разделить на **системы с графическим интерфейсом** и **системы с табличным кодированием**. Первые позволяют формировать схемы непосредственно на экране компьютера, выбирая элементы из списка и соединяя их в определенном порядке (рисунок 7). Табличное кодирование предусматривает последовательный выбор элементов и назначение входным и выходным потокам адресов из общего списка потоков моделируемой схемы. Естественно, первый способ наиболее удобен.

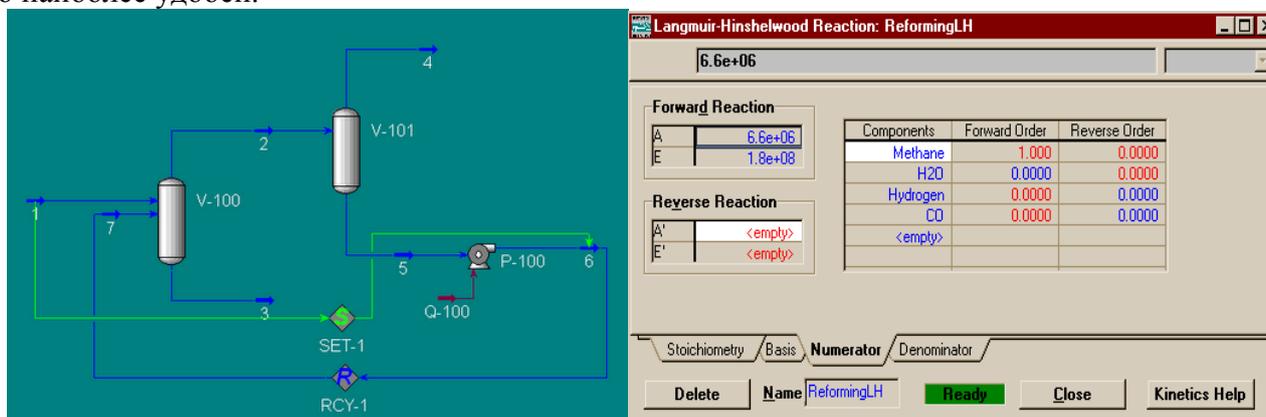


Рисунок 7. Графическое и табличное представление данных

И в первом, и во втором случае интерфейс пользователя во всех пакетах позволяет работать с графом потоков и агрегатов посредством обращения и редактирования специальной таблицы, содержащей заданные пользователем алфавитно-цифровые идентификаторы потоков и их характеристики.

### Средства расчета технологических схем

Любая задача моделирования эквивалентна большой системе нелинейных одновременно решаемых уравнений. Эта система включает расчет всех необходимых термодинамических свойств для всех потоков, расходов и составов с применением выбранных моделей расчета свойств и процессов. В принципе, возможно решение всех этих уравнений одновременно, но в моделирующих системах обычно используется другой подход: каждый элемент схемы решается с применением наиболее эффективных алгоритмов, разработанных для каждого случая.

При расчете системы взаимосвязанных аппаратов последовательность расчета элементов определяется автоматически (или может быть задана пользователем). При наличии рециклов создается итерационная схема, в которой рецикловые потоки разрываются и создается последовательность сходящихся оценочных значений. Эти значения получаются замещением величин, рассчитанных при предыдущем просчете схемы (Метод Простого Замещения) или путем применения специальных методов ускорения расчета рециклов – Вегштейна (Wegstein) и Бройдена (Broyden).

### Динамическое моделирование

**По изменению параметров модели по времени** моделирующие программы можно разделить на системы, **поддерживающие статическое** и **динамическое моделирование** (рисунок 8). При статическом моделировании соотношение параметров происходит до определенного момента времени. В случае динамического моделирования параметры модели претерпевают непрерывные изменения во времени. Возможность проводить расчеты в динамическом режиме позволяет гораздо лучше понять сущность моделируемых процессов. Можно собрать и испытать схему регулирования, исследовать пусковые режимы, получить представление о реально работающем процессе и поведении объекта в нестандартных ситуациях, о влиянии изменения рабочих параметров на качество продуктов.

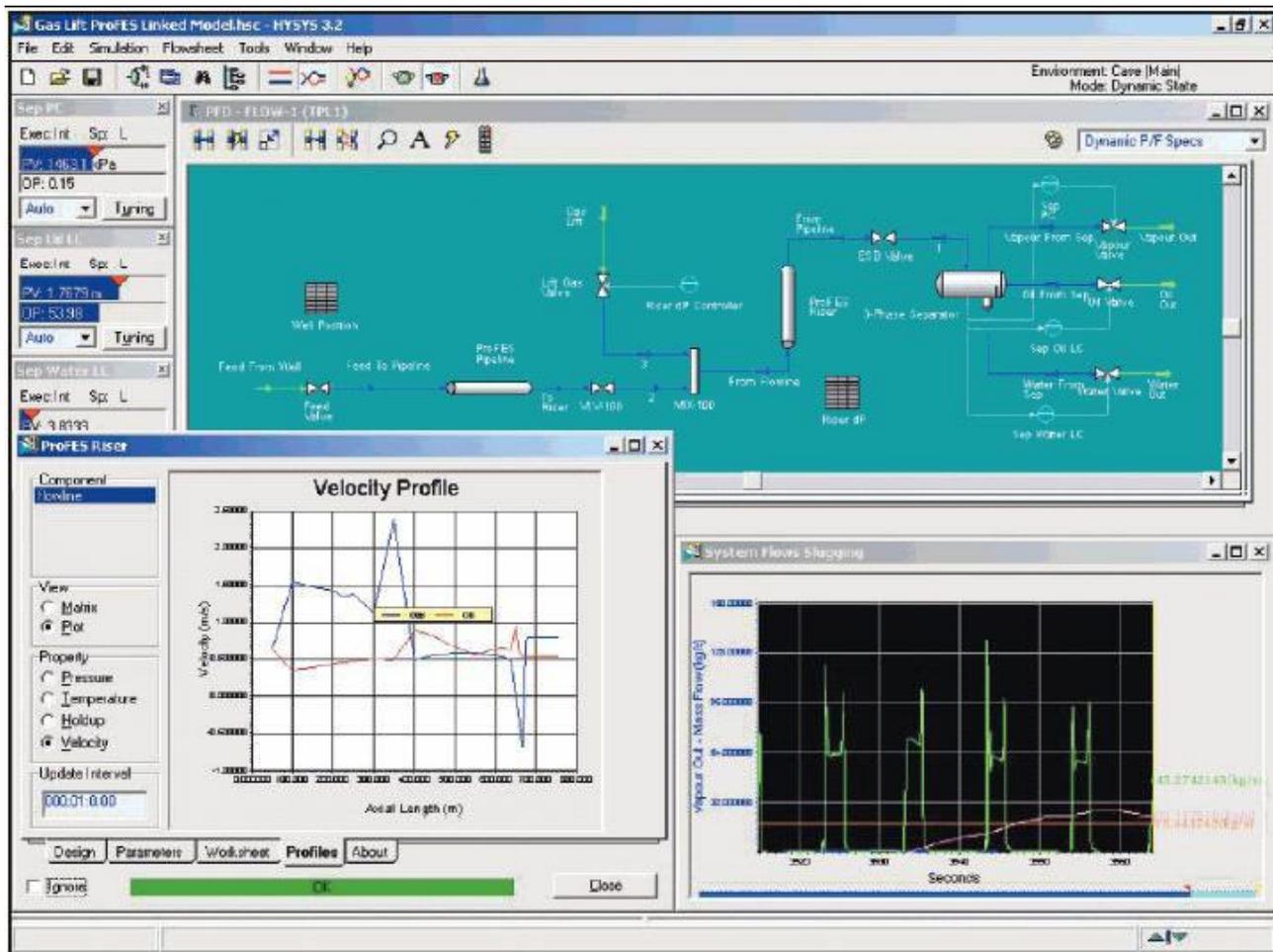


Рисунок 8. Динамическое моделирование (HYSYS Dynamics)

### Конструкция аппаратов

Многие моделирующие программы позволяют, после выполнения стадии расчета технологической схемы или отдельного аппарата, выполнять расчеты гидравлических и основных конструктивных характеристик сепарационного оборудования, емкостей, теплообменной аппаратуры (рисунок 9), тарельчатых и насадочных ректификационных колонн, а также выполнять оценку стоимости изготовления каждого аппарата. Это очень важно для выполнения стадии, как для проектных работ, так и предпроектных исследований, так как позволяет оптимизировать капиталоемкость разрабатываемой технологии.

Необходимо отметить, что основные модули симуляторов процессов были разработаны много лет назад. Например, база данных индивидуальных веществ; основные термодинамические методы расчетов свойств индивидуальных веществ и их смесей; модули расчетов единиц оборудования (аппаратов) для получения органических веществ, промышленных газов и вспомогательного оборудования нефтехимических производств (воды, пара, топлива, воздуха, электричества), а также система модулей для формирования отчетов, – все это входит в программный пакет любой моделирующей программы.

В то же время для решения таких задач, как, например, подробные расчеты разделения твердое-жидкое; теплообменников совместно с моделированием всей технологической схемы; свойств систем электролитов для неорганических производств и утилизации отходов с целью обеспечения экологической безопасности; периодической ректификации и нестационарных режимов работы колонн непрерывной ректификации; нестационарных режимов работы химических реакторов и других обычно оформляют в виде дополнительных программных модулей программы, которые интегрированы с основным (базовым) модулем пакета моделирующей программы (например, см. рисунок 5). Последнее замечание будет проиллюстрировано примерами далее.

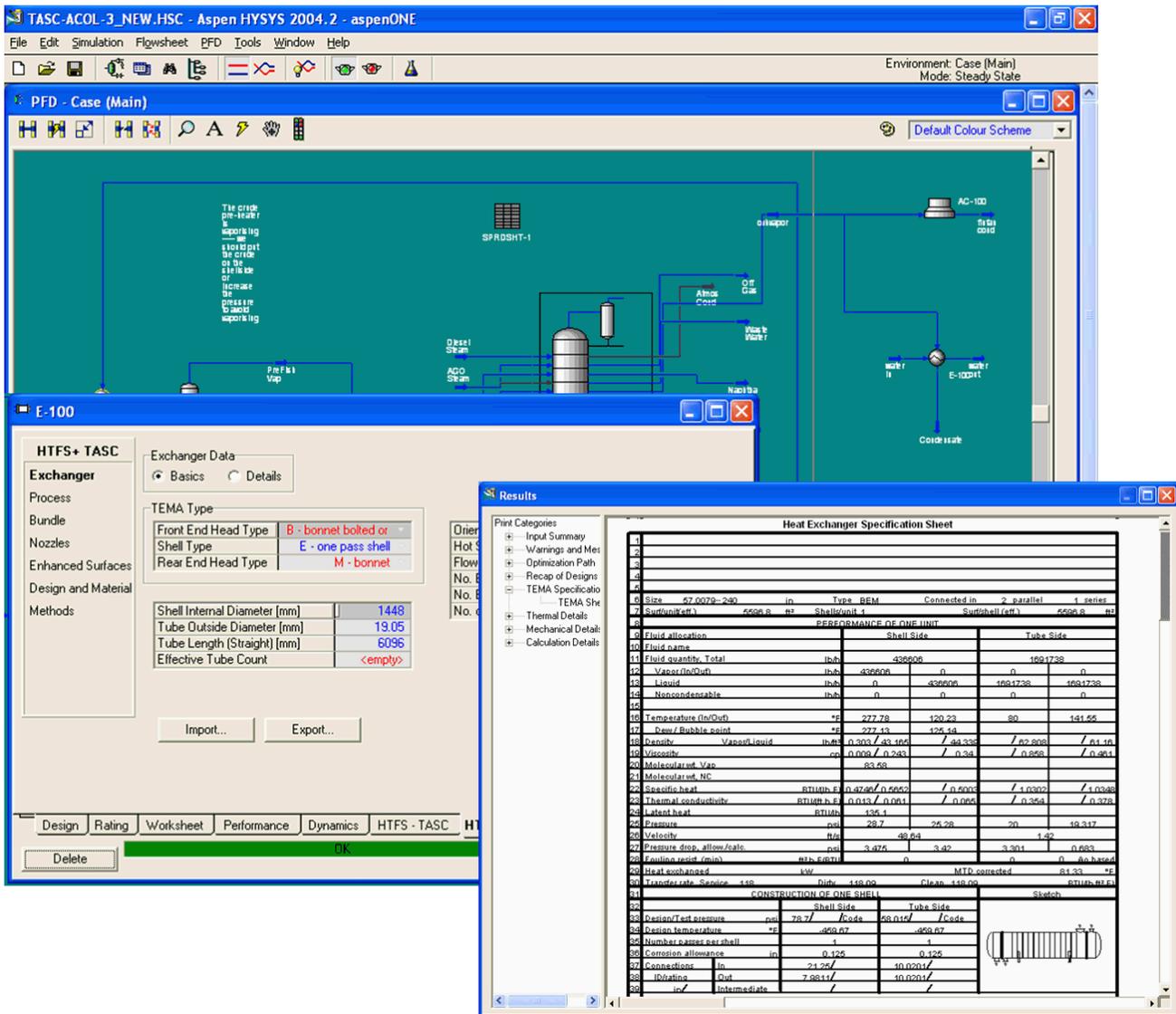


Рисунок 9. Расчет теплообменника и его результат

### Режимы работы моделирующей программы

Режим «Работа с файлами» позволяет создавать новые задания, сохранять их в памяти компьютера и обеспечивать стыковку с другими программными продуктами.

В режиме «Изображение процесса» выполняется графическое изображение принципиальной технологической схемы производства со всеми единицами оборудования (аппаратами) и соединяющими их потоками. Для этой цели используется палитра стандартных пиктограмм, соответствующих типовым аппаратам химической технологии (рисунок 10).

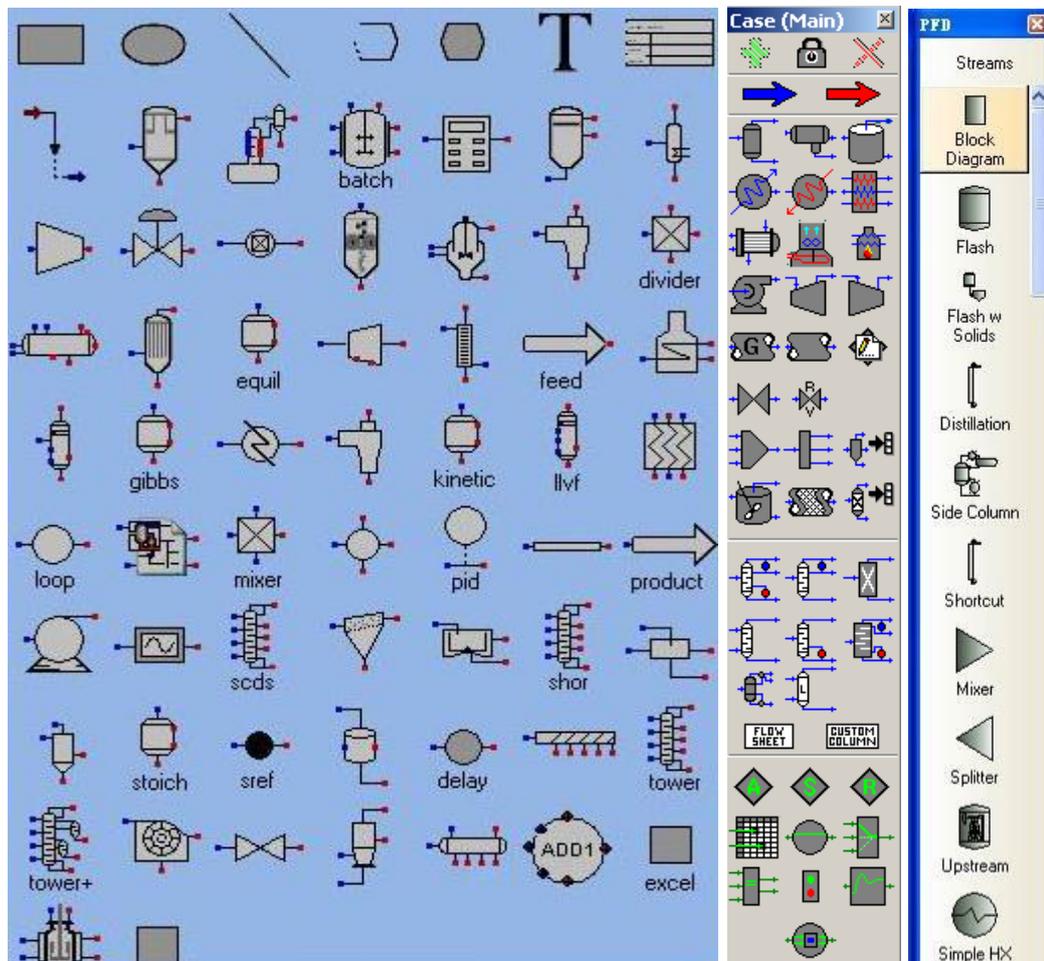


Рисунок 10. Фрагменты палитр стандартных пиктограмм аппаратов химической промышленности (на примере слева-направо: ChemCAD, HYSYS, PRO II)

Режим «Свойства веществ» служит для выбора химических компонентов (веществ), составляющих потоки процесса (рисунок 11). При этом базой данных (БД) индивидуальнх веществ моделирующей программы представляются все необходимые для расчетов свойства выбранных компонентов.

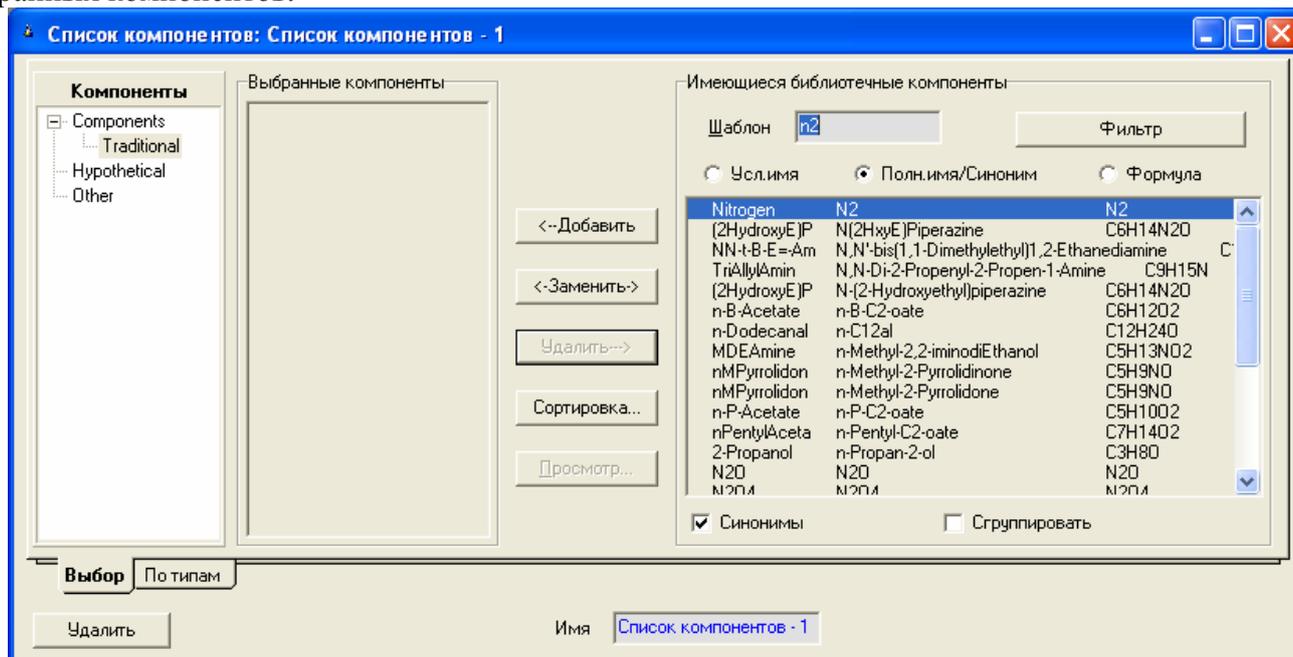


Рисунок 11. Выбор компонентов потока

В режиме «Свойства смесей» рассчитываются физико-химические (рисунок 12) и другие термодинамические свойства многокомпонентных смесей (фазовые равновесия, плотности жид-

кости и пара и др.). Как правило, для расчета одного и того же свойства многокомпонентной смеси программой предлагается несколько методов (рисунок 13), среди которых необходимо выбрать наиболее подходящий.

Скриншот окна «Смесь: Blend-1». В центре таблицы «Физические свойства компонент»:

| Компонент | СТК [C] | Мол.масса | Плотность [kg/m3] | Вязкость1 [cP] | Вязкость2 [cP] |
|-----------|---------|-----------|-------------------|----------------|----------------|
| NBP_45    | 45.04   | 83.99     | 629.7             | 0.13214        | 6.2502e-00:    |
| NBP_57    | 56.98   | 97.76     | 643.4             | 0.13840        | 6.6184e-00:    |
| NBP_72    | 72.20   | 110.9     | 655.7             | 0.14571        | 7.0426e-00:    |
| NBP_86    | 86.15   | 124.2     | 666.5             | 0.15518        | 7.5819e-00:    |
| NBP_100   | 99.64   | 136.7     | 679.4             | 0.16825        | 8.3095e-00:    |
| NBP_114   | 113.7   | 142.7     | 692.2             | 0.18481        | 9.2043e-00:    |
| NBP_127   | 126.7   | 150.3     | 705.9             | 0.20825        | 0.10423        |
| NBP_142   | 142.3   | 161.6     | 716.4             | 0.23753        | 0.11872        |
| NBP_156   | 155.5   | 169.5     | 722.0             | 0.27570        | 0.13656        |
| NBP_169   | 169.2   | 177.7     | 726.6             | 0.33283        | 0.16131        |
| NBP_183   | 183.1   | 189.1     | 731.6             | 0.40967        | 0.19202        |
| NBP_197   | 197.1   | 201.0     | 737.4             | 0.50913        | 0.22804        |
| NBP_211   | 210.9   | 214.1     | 747.2             | 0.63717        | 0.26884        |
| NBP_225   | 224.7   | 227.9     | 749.9             | 0.79454        | 0.31041        |
| NBP_239   | 238.8   | 241.8     | 751.1             | 0.98111        | 0.34939        |
| NBP_253   | 252.7   | 256.0     | 755.2             | 1.2071         | 0.39021        |

В нижней части окна видны кнопки «Удалить», «Имя: Blend-1» и статусная строка «Смесь [Blend] рассчитана».

Рисунок 12. Состав смеси и ее свойства

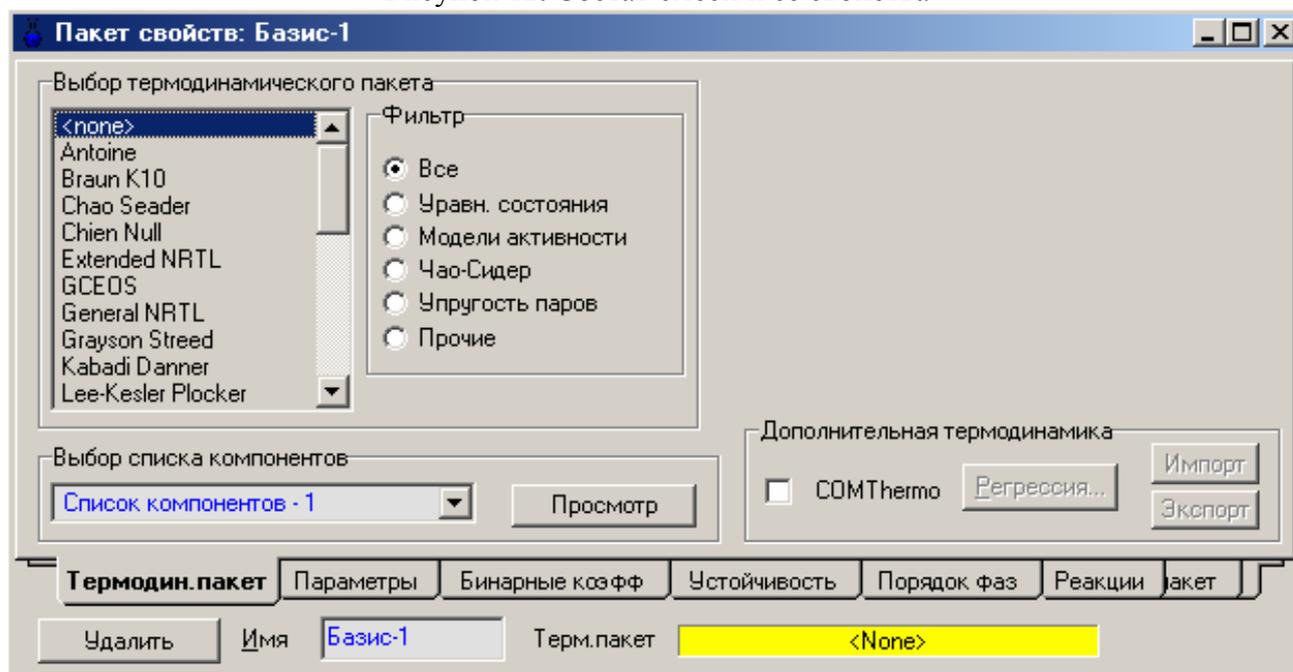


Рисунок 13. Выбор методики термодинамического расчета для смеси

Режим «Задание данных» служит для задания исходных данных для расчета свойств входных потоков (рисунки 14, 18) производства и необходимых данных для расчета всех единиц оборудования (аппаратов) (рисунок 15) технологической схемы процесса.



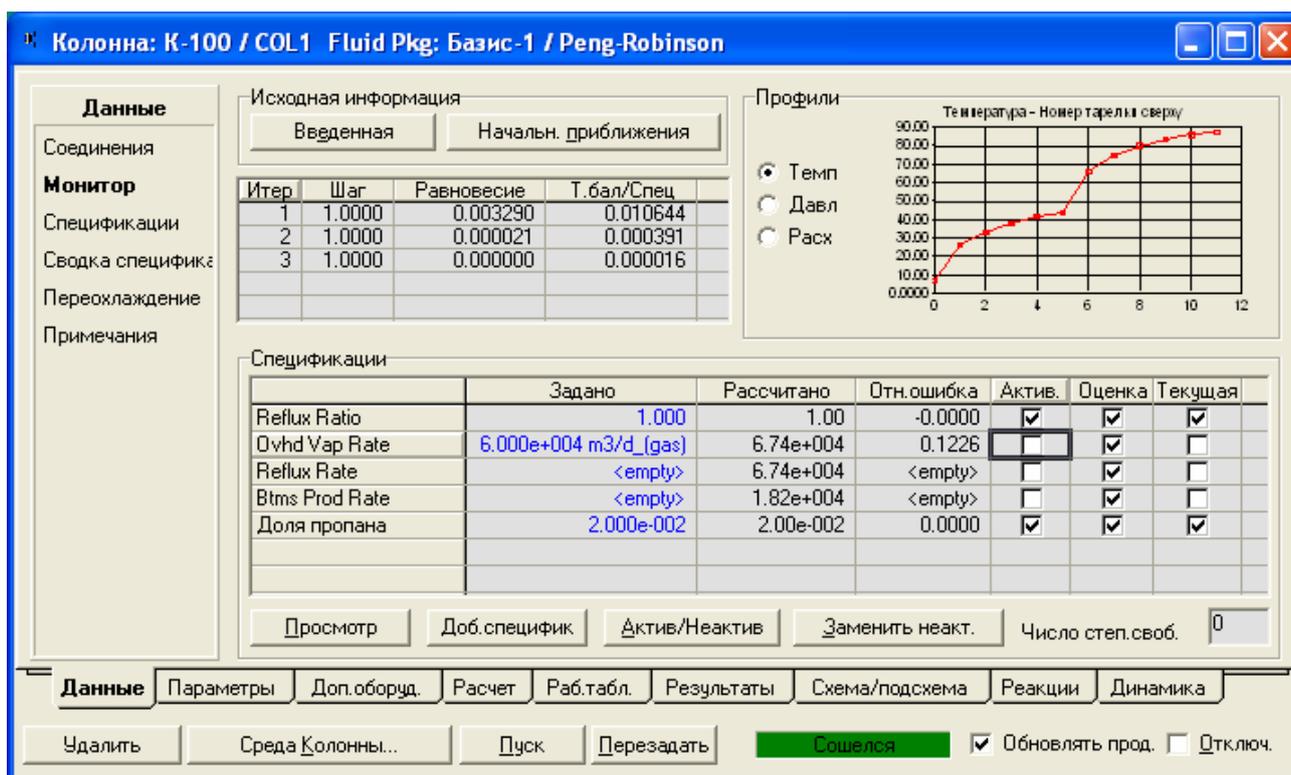


Рисунок 16. Расчет технологических аппаратов (колонны)

В режиме «Вспомогательные расчеты» определяются, как правило, из экспериментальных данных, параметры процессов, отсутствующие в соответствующих базах данных программы и необходимые для расчетов. К ним, например, относятся параметры бинарного взаимодействия для расчетов фазового равновесия жидкость-пар или параметры уравнения Аррениуса для вычисления кинетических констант химических реакций.

Режим «Конструкционные расчеты» используется для определения размеров и конструктивных характеристик аппаратов, например, ректификационных колонн с тарелками и насадками различных типов. Также могут быть найдены типоразмеры (в соответствии с разными стандартами – США, Германии, Франции и России) теплообменников различных типов – кожухотрубных (рисунок 17), воздушных, пластинчатых и «труба в трубе».

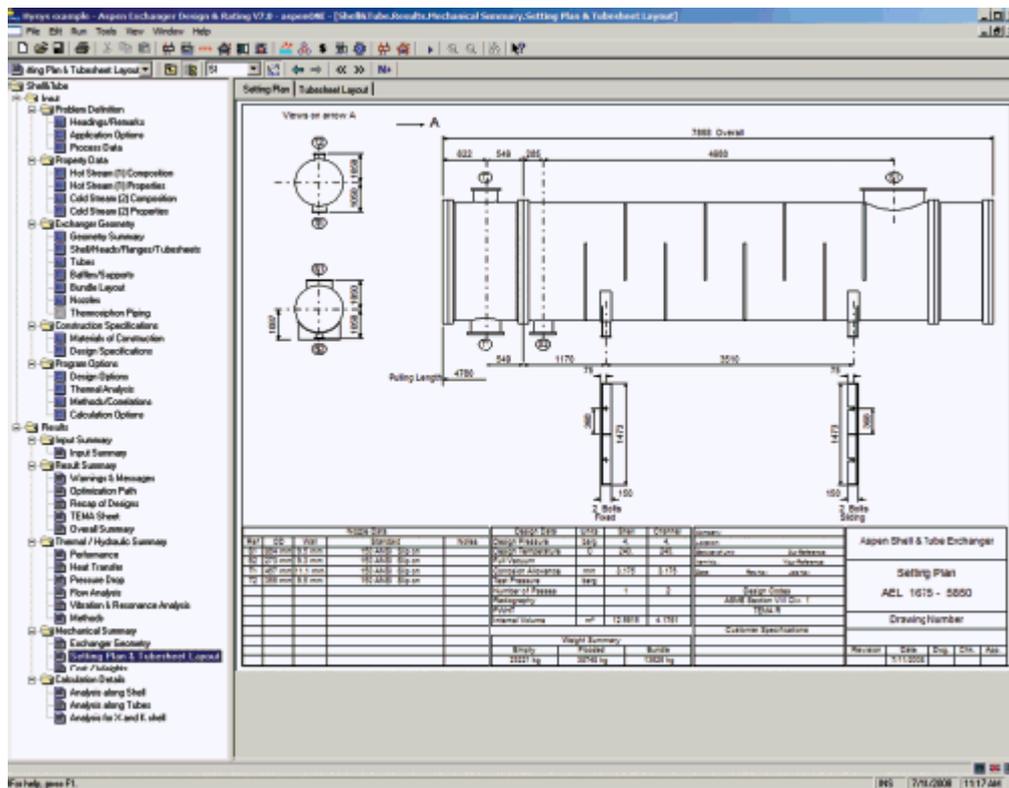


Рисунок 17. Расчет конструкционных параметров теплообменника

В режиме «Таблицы результатов» результаты всевозможных расчетов, сведенные в удобные таблицы, предоставляются пользователю в распоряжение для просмотра, оценки и анализа рассчитанных результатов (рисунок 19). При желании можно получить распечатку этих таблиц.

По аналогии, в режиме «Графики результатов» (рисунок 20) можно получить графическое изображение результатов расчетов, например, для фазовых диаграмм жидкость-пар, жидкость-жидкость и профилей изменения концентраций компонентов в ректификационной колонне.

Режим «Результирующий отчет» служит для формирования текстового отчета о результатах расчетов, в котором указаны как исходные данные для расчетов, включая конфигурацию технологической схемы процесса, так и результаты расчетов с материальными и тепловым балансами всего производства (рисунок 9).

В режиме «Диаграмма процесса» результаты расчетов для потоков и аппаратов представляются на изображении технологической схемы процесса (рисунок 21).

### Этапы работы моделирующей программы

Моделирование химико-технологического процесса с использованием моделирующей программы включает в себя девять основных этапов, для выполнения которых используются различные программные модули:

- создание нового задания;
- выбор единиц измерения;
- построение технологической схемы (рисунки 1, 7, 8);
- выбор компонентов (рисунок 11);
- выбор термодинамических моделей (рисунок 13);
- задание параметров потоков питания (рисунок 14);
- задание параметров единиц оборудования (рисунок 15);
- запуск программы компьютерного моделирования (рисунки 16, 18);
- просмотр и печать результатов (рисунки 19-21).

#### Создание нового задания

Задается имя папки задания, куда будут помещены все файлы, относящиеся к данному заданию.

#### Выбор единиц измерения

Обычно может быть выбран один из четырех стандартных вариантов системы измерения физических величин:

- СИ;
- модифицированная СИ;
- метрическая система;
- британская система.

Возможно реализовать любую комбинацию этих систем измерений. Для российских пользователей наиболее удобной является модифицированная система СИ. Выбранная система измерения физических величин распространяется на все задание. При этом в процессе работы для отдельных единиц оборудования (аппаратов) и потоков она может быть изменена, а затем восстановлена в первоначальном виде.

### **Построение технологической схемы**

Технологическая схема химического производства обычно изображается с использованием стандартных пиктограмм единиц оборудования (аппаратов) и соединяющих их линий – потоков (рисунки 1, 7, 8). В моделирующую программу обычно включены около пятидесяти пиктограмм аппаратов, и каждой пиктограмме единицы оборудования соответствует алгоритм поверочно-оценочного и/или проектного расчета аппарата. Все пиктограммы аппаратов имеют имя, соответствующее реализованному алгоритму расчета, и несколько вариантов изображений, из которых пользователь может сделать подходящий выбор. Если предлагаемые пиктограммы аппаратов не устраивают пользователя, он с помощью специального графического драйвера, встроенного в программу, может создать собственное изображение аппарата или аппаратов.

Модуль, позволяющий создавать изображения технологических схем химических производств, является одним из трех основных модулей моделирующей программы.

### **Выбор компонентов**

В моделирующую программу встроена фактографическая база данных (БД) по свойствам индивидуальных веществ, необходимых для расчета технологических схем нефтехимических производств. В БД компонентов представлены до 80 свойств-констант и свойств-зависимостей более чем для 2500 индивидуальных веществ. Для свойств-зависимостей приводятся вид и коэффициенты уравнений, описывающих эти зависимости, как, например, для уравнения Антуана, описывающего зависимость давления насыщенного пара индивидуального вещества от температуры.

Выбор компонентов выполняется либо по номеру в БД, либо по брутто-формуле химического соединения, либо по названию вещества (рисунок 11). Включение вещества в список компонентов технологической схемы производства означает, что все его свойства могут быть использованы моделирующей программой в процессе выполнения расчетов. При отсутствии вещества в БД его свойства в программе либо могут быть рассчитаны по структурным составляющим молекулы (в основном, для органических веществ), либо в базу данных могут быть введены пользовательские данные о свойствах вещества.

Следует отметить, что для расчетов свойств электролитов и неорганических молекул в БД включены и свойства ионов – анионов и катионов. Компонентами многокомпонентной смеси в случае таких расчетов в соответствии с теорией электролитов могут быть не только молекулы, но и анионы и катионы слабых и сильных электролитов.

В программу также обычно включен модуль определения свойств «псевдокомпонентов» для непрерывных нефтяных смесей, позволяющий решать задачу моделирования нефтяных ректификационных колонн по экспериментальным данным о кривой разгонки.

### **Выбор термодинамических моделей**

На этом этапе с использованием специальных модулей рассчитываются следующие свойства многокомпонентной смеси:

- равновесие пар (газ)-жидкость-твердое вещество и пар (газ)-жидкость-жидкость-твердое вещество;
- энтальпия системы, желательна с учетом теплоты смешения жидкости;
- плотность и поверхностное натяжение жидкости;
- вязкость и жидкости и пара;

- теплопроводности жидкости и пара.

Для расчета каждого из перечисленных свойств многокомпонентной смеси моделирующей программой предлагается множество методов (рисунок 13), например, для расчета равновесия жидкость-пар (газ) ChemCad предлагает 38 методов. Выбор оптимального метода в каждом конкретном случае требует глубоких знаний в области химической термодинамики. Для решения неформализованной задачи выбора метода в моделирующие программы иногда включаются экспертные системы, которые для смеси с заданным набором компонентов и определенным составом для фиксированного диапазона температур и давлений осуществляют выбор метода расчета свойств многокомпонентной системы.

#### **Задание параметров потоков питания**

Для расчета технологической схемы производства необходимы данные только для входных потоков всего производства (потоков питания). Параметры выходных потоков из каждого аппарата получаются в результате их расчета и являются входными потоками для следующих за ними единиц оборудования, с которыми они непосредственно связаны.

При задании параметров входных потоков (потоков питания) необходимо задать их общий расход и состав (рисунок 14) (возможно задание расходов каждого компонента отдельно, так как в программах автоматически осуществляется их суммирование и определение состава потока). Одновременно в соответствии с правилом Гиббса должны быть заданы значения двух из трех параметров – давления, температуры и доли пара в потоке. По указанным данным в программе автоматически определяется значение незаданного параметра потока питания и энтальпия потока.

#### **Задание параметров единиц оборудования**

Необходимо задать исходные данные для расчета каждого аппарата (рисунок 15). Эти данные можно разделить на три типа:

- обязательные технологические и конструкционные параметры, количество которых равно числу степеней свободы решаемой при расчете системы уравнений;
- технологические параметры, являющиеся начальными приближениями итерационных алгоритмов расчета (задание их необязательно);
- параметры сходимости расчетов, которые заданы «по умолчанию» (их задание означает изменение значений приближений, заданных «по умолчанию»).

В таблице 1 приведены типовые аппараты, алгоритмы расчета которых включены практически во все моделирующие программы. Для расчета каждого из этих аппаратов необходимо задавать свой собственный набор исходных данных.

Представленные в таблице модули расчета разделены на модули, предназначенные для расчета стационарных и нестационарных режимов процессов. В последнем случае для расчетов всегда необходимо задавать длительность протекания переходного процесса по времени. При расчете стационарных режимов процессов с рециклическими потоками желательно также задавать начальные приближения для отсутствующих параметров рециклического потока.

Анализ модулей для расчета стационарных режимов процессов показывает, что для расчета химических реакторов используются три алгоритма:

- стехиометрический реактор (приближенный расчет);
- равновесный реактор;
- кинетический реактор.

Последний позволяет выполнять расчеты как для реакторов с мешалкой (модель идеального смешения), так и для трубчатых реакторов (модель идеального вытеснения). В нем также могут быть реализованы различные тепловые режимы (изотермический, адиабатический и политропический), а для трубчатого реактора – еще и различные режимы движения теплоносителя в рубашке – прямоток или противоток.

Таблица 1 – Некоторые расчетные модули моделирующей программы

| <b>Для расчета стационарных процессов</b> |                       |
|---|-----------------------|
|   | Компрессор            |
|   | Экспандер             |
|   | Делитель потока       |
|   | Сепаратор компонентов |

|              |   |
|--------------|---|
| Основные     | Печь  |
|              | Теплообменник   |
|              | Смеситель   |
|              | Жидкостный насос  |
|              | Клапан  |
|              | Двухфазный равновесный испаритель жидкость-пар          |
|              | Трехфазный равновесный испаритель жидкость-жидкость-пар |
|              | Многоцелевой резервуар                                  |
|              | Жидкостный экстрактор                                   |
|              | Трубопровод   |
|              | Статический контроллер обратного/прямого действия       |
| Реакторы     | Стехиометрический                                       |
|              | Равновесный   |
|              | Кинетический  |
| Ректификация | Периодическая   |
|              | Приближенная  |
|              | С теоретическими тарелками                              |
|              | Для нефтяных смесей                                     |
|              | С массопередачей и химической реакцией                  |

Таблица 1 – продолжение

|   |                                  |
|---|----------------------------------|
| Аппараты с твердой фазой                            | Рукавный фильтр                  |
|   | Фильтрующая центрифуга           |
|   | Дробилка                         |
|   | Кристаллизатор                   |
|   | Отстойная центрифуга             |
|   | Циклон                           |
|   | Сушильный аппарат                |
|   | Электрофильтр                    |
|   | Вакуум-фильтр                    |
|   | Гидроциклон                      |
|   | Грохот                           |
|   | Скруббер Вентури                 |
|   | Промывной аппарат                |
| <b>Для расчета нестационарных режимов процессов</b> |                                  |
| Основные  | Реактор с мешалкой               |
|   | Колонна ректификации и абсорбции |
|   | ПИД-регулятор                    |
|   | Динамический регулирующий клапан |
|   | Динамический резервуар           |
|   | Емкость для сбора продуктов      |
|   | Модуль запаздывания по времени   |

Для расчета ректификации можно использовать пять модулей, хотя периодическая ректификация не относится к процессам со стационарным режимом. Из оставшихся четырех модулей приближенный расчет по методике Фенске-Андервуда следует считать предварительным. Точный расчет с теоретическими тарелками неприемлем для практической реализации для дискретных многокомпонентных смесей, хотя может применяться для непрерывных нефтяных систем с «псевдокомпонентами». Для последних более предпочтителен специальный модуль для расчета нефтяных колонн. Модуль точного расчета ректификации и абсорбции с массопередачей и химической реакцией следует считать наиболее приемлемым, так как в нем учитываются конструкции тарелок и типы насадок, а также химические превращения в паровой (газовой) и жидкой фазах.

При рассмотрении модулей для расчета стационарных режимов процессов следует обратить внимание на наличие модулей для расчета аппаратов с твердой фазой.

Для расчетов нестационарных режимов реакторов с мешалкой и ректификационных (абсорбционных) колонн в технологические схемы производств включаются соответствующие им расчетные модули, а также модули для расчета динамических регулирующих клапанов и ПИД-регуляторов, динамических резервуаров, емкостей для сбора продуктов и модуль запаздывания по времени. Все это позволяет проводить исследования системы управления процессом с различными типами регуляторов и регулирующих клапанов (исполнительных устройств).

### **Запуск программы компьютерного моделирования**

При запуске моделирующей программы может быть решен следующий комплекс задач компьютерного моделирования:

- расчет отдельных единиц оборудования (аппаратов, рисунок 17);
- расчет технологической схемы процесса, в том числе с рециклическими потоками (рисунок 18);
- расчет технологической схемы процесса со статическими контроллерами обратного/прямого действия;
- анализ параметрической чувствительности производства;
- оптимизация химико-технологического процесса;
- расчет динамических режимов процессов.

Перед запуском программы в меню «Параметры сходимости» устанавливается допустимая

погрешность вычислений при расчете рециклических потоков и выбирается метод решения системы нелинейных уравнений, необходимый для этих целей (либо метод простых итераций, либо метод Вегштейна, либо метод главных собственных значений). Также устанавливается максимальное число итераций, режим расчета стационарного или нестационарного процесса и формат вывода на монитор компьютера промежуточных результатов итерационных вычислений.

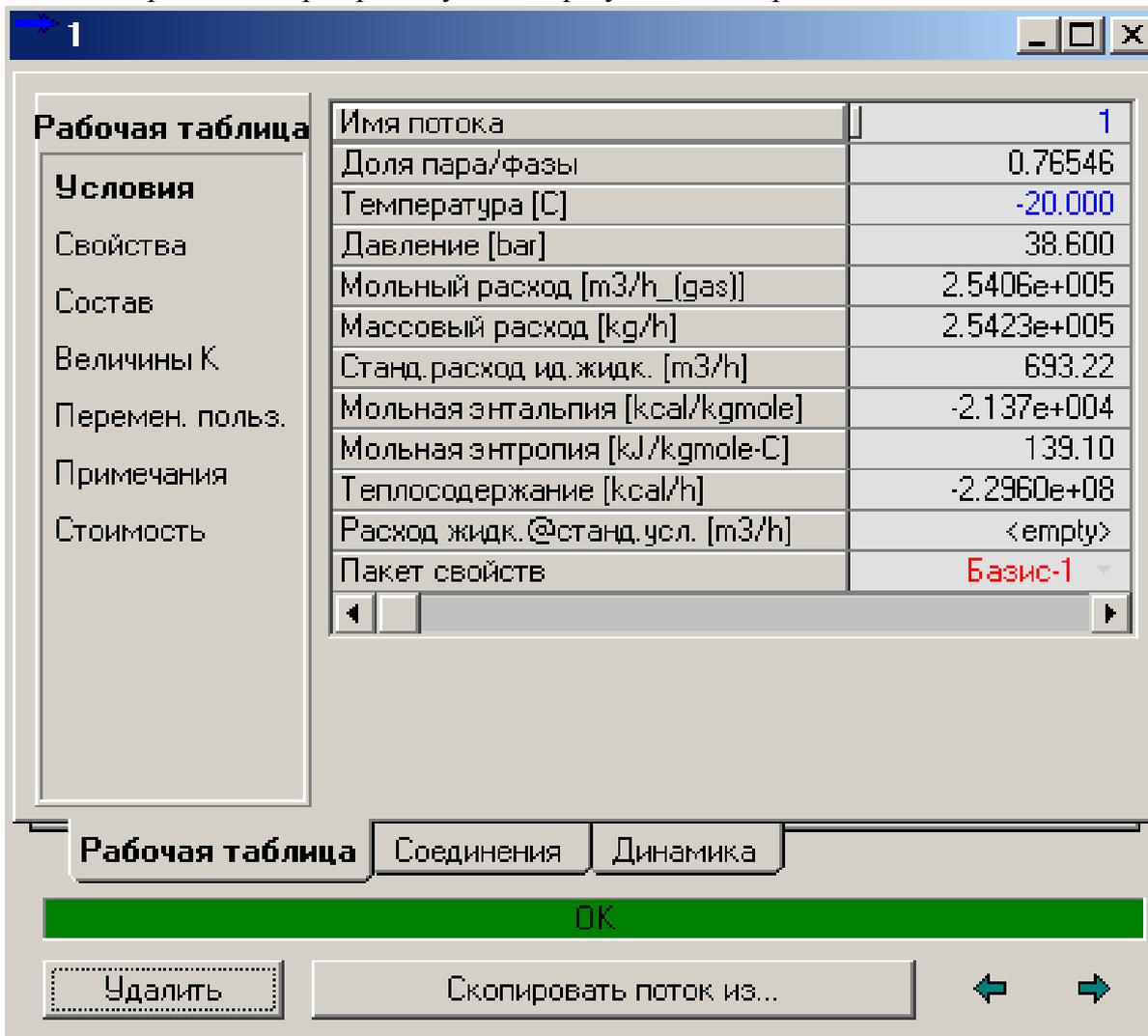


Рисунок 18. Расчет потока

*Расчет отдельного аппарата* может быть выполнен в любое время с известными для единицы оборудования данными для входных потоков и данными для технологических и конструктивных параметров аппаратов.

Для *расчета технологической схемы без рециклических потоков* достаточно задать данные для всех входных потоков технологической схемы и все технологические параметры, необходимые для расчета всех единиц оборудования. При неправильном задании параметров для расчета отдельных аппаратов (либо недостаточном числе параметров, либо большем их числе, чем следует из числа степеней свободы решаемой системы уравнений) моделирующая программа самостоятельно «указывает» на ошибки задания параметров.

При *расчете технологической схемы с рециклическими потоками* необходимо выбрать один из трех возможных алгоритмов расчета рециклических потоков и желательно задать начальное приближение для вычисления параметров рециклического потока.

Применение *статического контроллера обратного действия* при расчете технологических схем позволяет обеспечить выполнение требований к производству в целом (например, получения продукта определенного состава) за счет изменения выбранного управляющего параметра до тех пор (например, расхода одного из потоков технологической схемы или его температуры), пока условие, заданное для определенного технологического параметра – требование к производству в целом, не будет выполнено. По-существу, в этом случае реализуется также ите-

рациональный расчет с последовательным изменением значения управляющего параметра, которое должно привести к выполнению предварительно заданных требований к производству.

*Анализ параметрической чувствительности производства* на компьютере представляет собой многократный расчет технологической схемы с оценкой влияния изменения входных переменных и параметров, определяющих состояние процесса, на выходные результирующие переменные, характеризующие состояние процесса. Для изменения входных переменных и параметров задают физически обоснованный интервал их изменения и шаг, с которым в заданном интервале должны изменяться входные переменные. В результате могут быть выявлены управляющие параметры, обеспечивающие получение продуктов требуемого качества при расчете технологической схемы со статическим контроллером обратного действия, и оптимизирующие переменные, наиболее сильно влияющие на целевые функции при решении задачи оптимизации.

*Задача оптимизации* химико-технологического процесса может решаться в моделирующей программе для всей технологической схемы с ограничениями первого рода (задается диапазон изменения оптимизирующих переменных) и второго рода (устанавливаются ограничения на технологические и другие параметры производства). При этом в программе существует возможность выбора критерия оптимальности (целевой функции) и одного из нескольких включенных в пакет алгоритмов оптимизации. По-существу, в результате с применением программ моделирования удается решать различные задачи нелинейного программирования для технологической схемы химического производства.

*Расчет динамических режимов процессов*, как правило, выполняется с использованием дополнительных модулей пакета – модулей для расчета колонны периодической ректификации, динамического реактора с мешалкой, динамической колонны абсорбции и ректификации. Алгоритмы, включенные в эти модули, представляют собой реализацию известных численных методов для решения жестких систем дифференциальных уравнений. В этом случае всегда необходимо задавать продолжительность во времени моделирования нестационарных режимов исследуемых процессов и шаг решения, который обычно специфицирован в программе «по умолчанию». В технологические схемы для расчета динамических режимов процессов обычно включаются ПИД-регуляторы, динамические регулирующие клапаны, динамические резервуары и др., которые позволяют проводить исследования и оптимизацию нестационарных режимов процессов совместно с системами управления.

### **Просмотр, анализ и печать результатов**

Анализ результатов расчетов с использованием пакетов моделирующих программ – важнейшая задача компьютерного моделирования. Основное требование к полученным результатам расчетов – их физическая обоснованность, т.е. соответствие реальным условиям работы нефтегазового производства.

Для просмотра результатов расчетов, полученных с использованием программы, в них предусматривается несколько возможностей:

- некоторые результаты расчетов представляются в экранном меню аппаратов, куда вводятся исходные данные для расчетов (рисунки 15, 16);
- исходные данные для расчетов и полученные результаты вычислений представляются в виде таблиц (рисунок 19);
- результаты расчетов могут быть представлены в виде различных графиков, которые могут создаваться в программе (рисунок 20);
- в режиме «*Диаграмма процесса*» результаты расчетов приводятся непосредственно на изображении технологической схемы процесса (рисунок 21) рядом с соответствующими единицами оборудования и потоками (одновременно рядом с изображением технологической схемы может быть приведена таблица с некоторыми свойствами отдельных или всех потоков);
- полный текстовый отчет обо всех используемых для расчетов исходных данных и результатах, полученных с применением моделирующих программ, приводится в режиме «*Результирующий отчет*» (структура и размер результирующего отчета генерируются в программе пользователем).

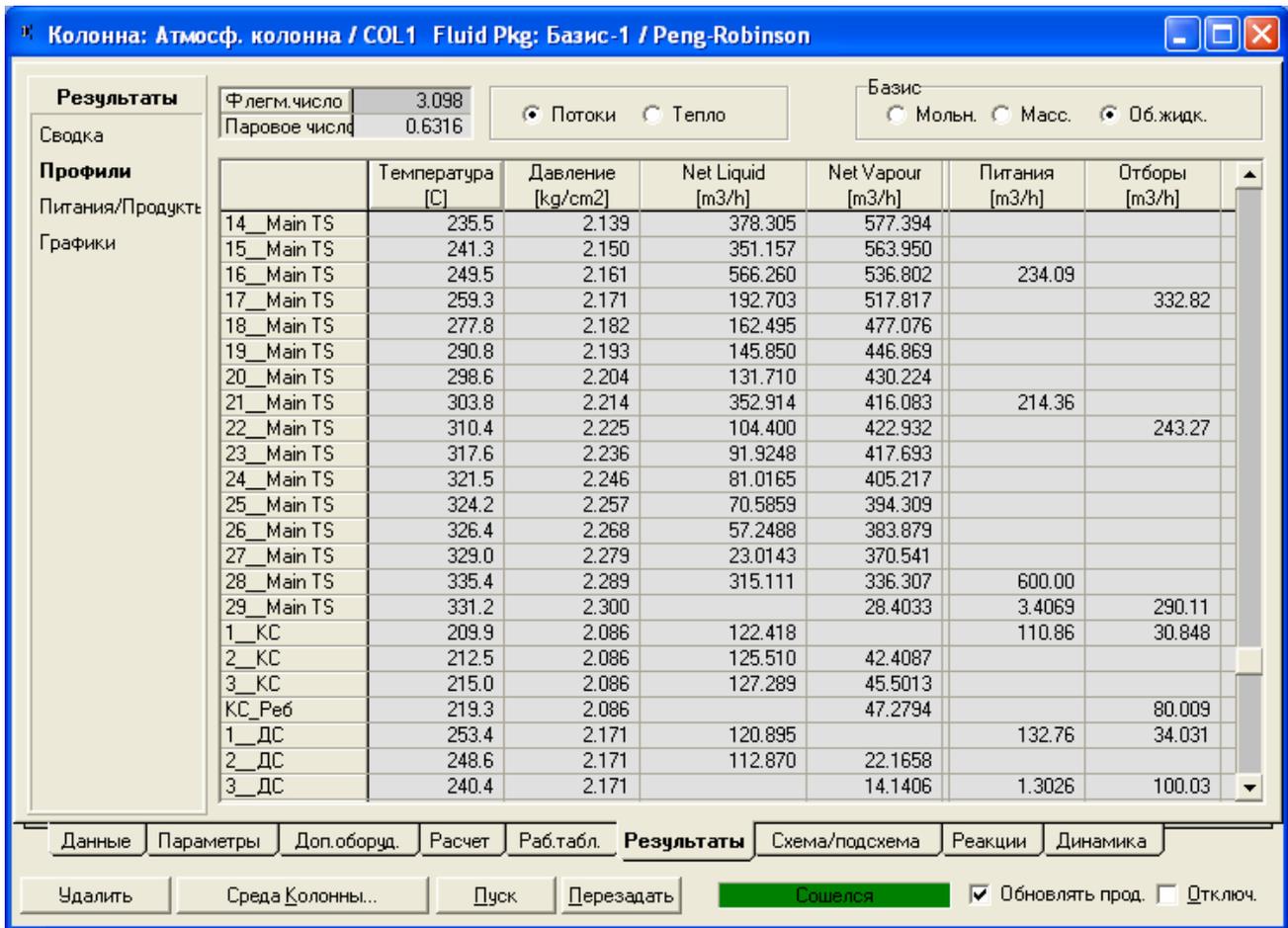


Рисунок19. Табличное представление результатов расчета колонны

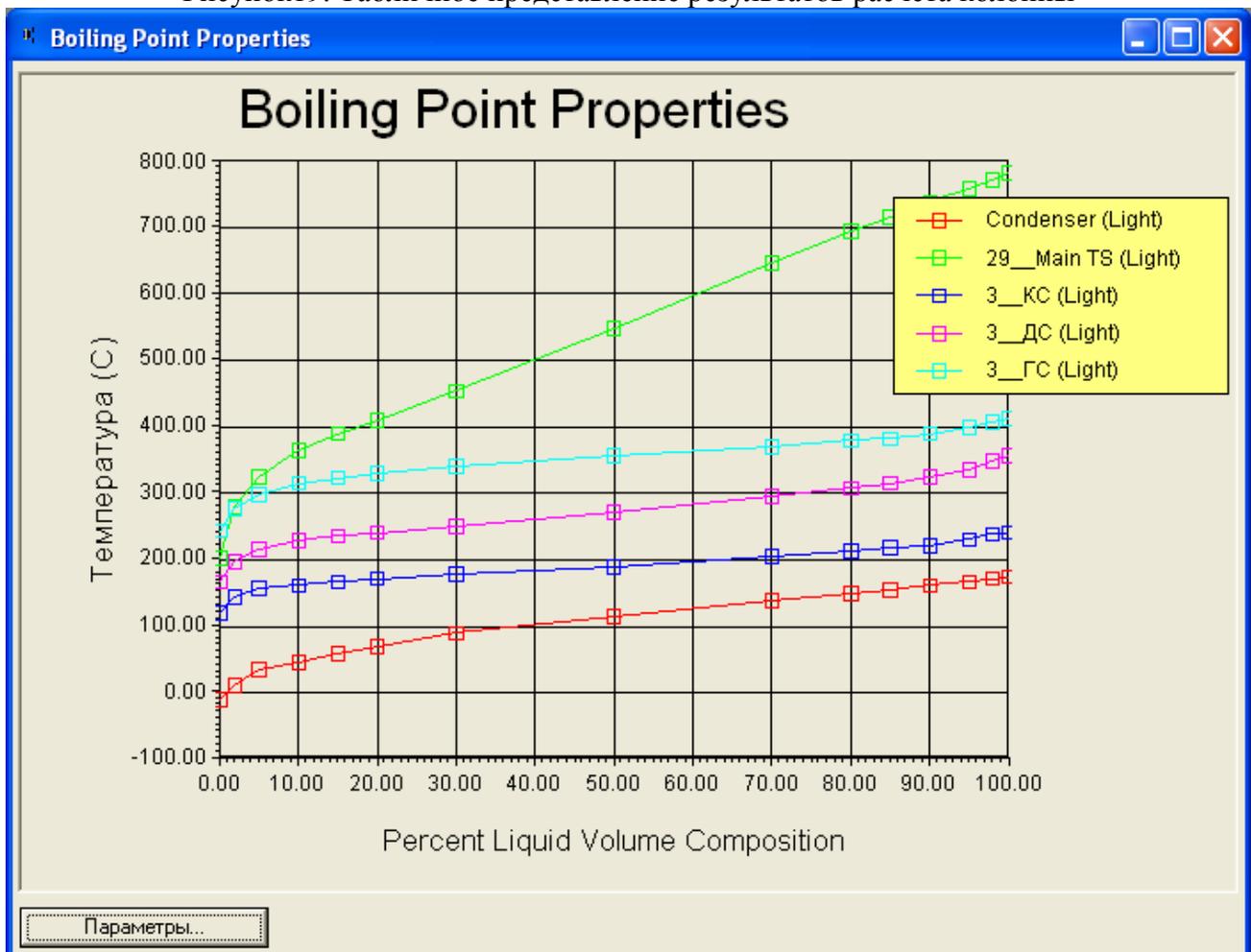


Рисунок 20. Представление результатов в виде графиков

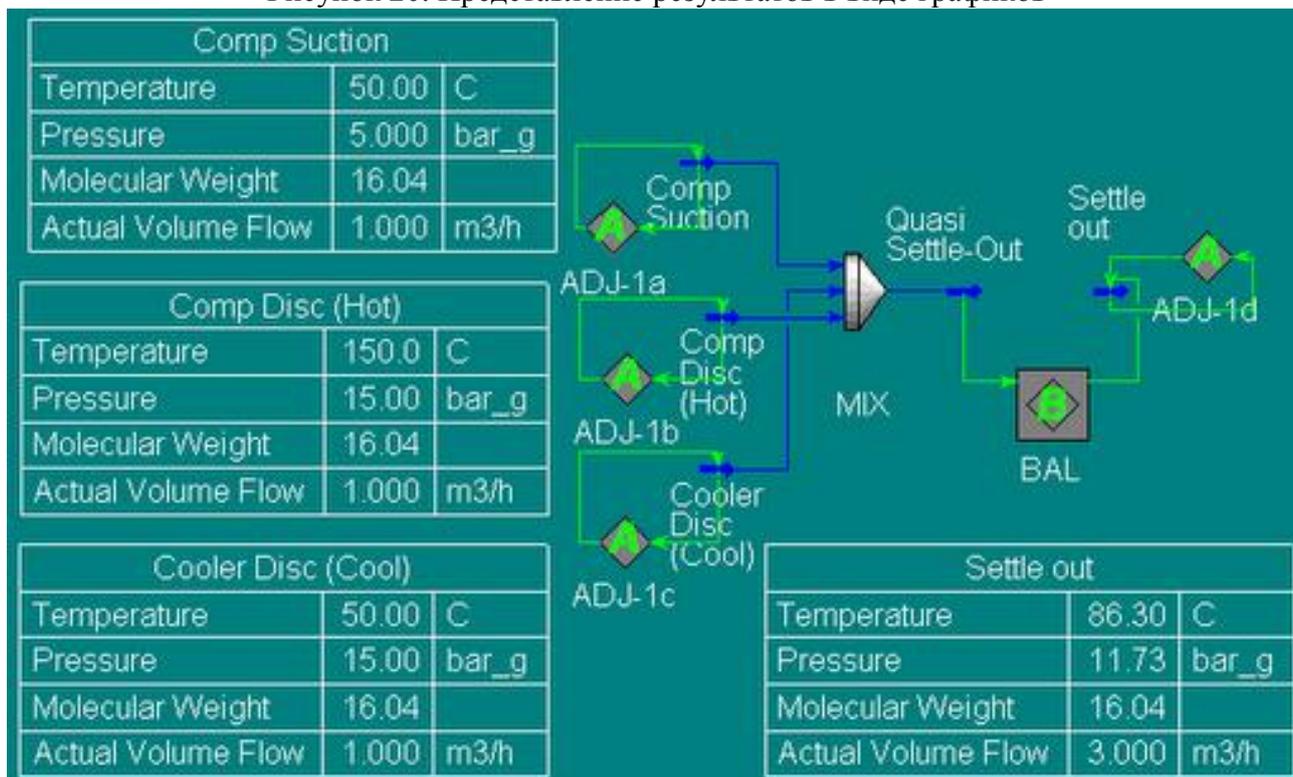


Рисунок 21. Диаграмма процесса

Все результаты расчетов, изображаемые на дисплеях компьютеров, могут быть распечатаны и оформлены в виде отчетов о выполненной работе по компьютерному моделированию химико-технологических процессов нефтегазовой отрасли.