

***Моделирование
химико-
технологических
процессов***

Общие положения

Наука, изучающая способы и процессы переработки сырья в предметы потребления и средства производства, носит название **технологии**. Для современной технологии характерны две области.

Одна состоит в том, что технология изучает массовое производство, масштабы которого достигают огромных размеров; для этой цели строятся крупные высокопроизводительные установки и производственные комплексы.

Технология делится на механическую и химическую.

Механическая технология изучает процессы, при которых изменяется форма, внешний вид или физические свойства материалов, а химическая технология рассматривает процессы изменения химического состава и свойств материалов. Исходя из этого, можно дать такое определение:

Химические производства

Химические производства можно разделить на две группы; производства неорганических и органических веществ.

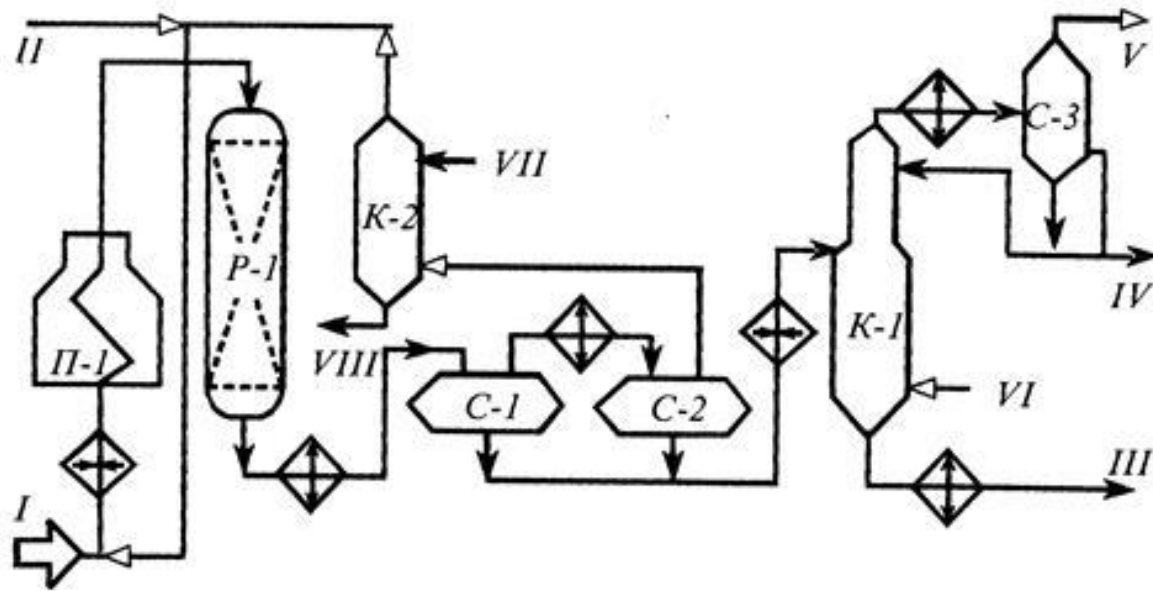
Промышленность **неорганических** веществ включает:

- 1) производства основных химических веществ (кислоты, щелочи, соли, удобрения и др.);
- 2) производство тонких неорганических продуктов (реактивы, редкие элементы, полупроводники, фармацевтические препараты и др.);
- 3) электрохимические производства (хлор, щелочи, кислород, водород и др.);
- 4) металлургия (черная, цветная, металлургия благородных и редких металлов и др.);
- 5) производство силикатов (стекло, цемент, керамика и др.);
- 6) производство минеральных красок и пигментов

Промышленность **органических веществ** включает:

- 1) основной (тяжелый) органический синтез (спирты, кислоты, эфиры, переработка CH_4 , CO , H_2 , C_2H_4 и др.);
- 2) производство полупродуктов и красителей;
- 3) тонкий органический синтез (фармацевтические препараты, кино-фотореактивы и др.);
- 4) производство высокомолекулярных веществ (пластические массы, искусственные и синтетические волокна, каучук и др.);
- 5) переработка горючих материалов (нефти, угля, сланцев и др.);

Принципиальная схема установки гидроочистки нефтяных фракций



I—сырье;

II — свежий водородсодержащий газ;

III — гидрогенизат;

IV— бензиновая фракция на **щелочную очистку**;

V — углеводородный газ; **на очистку (30/4 МЭА)**

VI — отдувочный водородсодержащий газ; VII — регенерированный моноэтаноламин; VIII— отработанный моноэтаноламин на регенерацию.

Химические реакторы

Химический реактор — это основной аппарат любого химического процесса; от его устройства и показателей работы в значительной степени зависит экономическая эффективность всего химического производства.

При выборе конструкции и определении размеров любого реактора необходимо принимать во внимание различные факторы и, прежде всего, располагать данными о скорости протекающих химических реакций, а также о скорости массо- и теплопередачи. Эту зависимость можно выразить в виде уравнения

$$t = f(X, C, r), \text{ где}$$

t — время пребывания реагентов в реакторе;
 X — степень превращения исходного реагента;
 C — начальная концентрация исходного реагента;
 r — скорость химической реакции.

Она является **математическим описанием модели** реактора

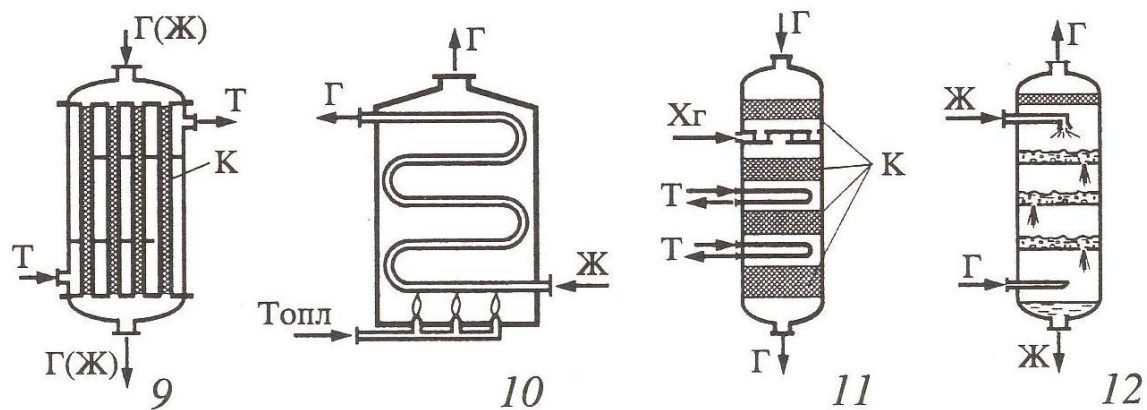
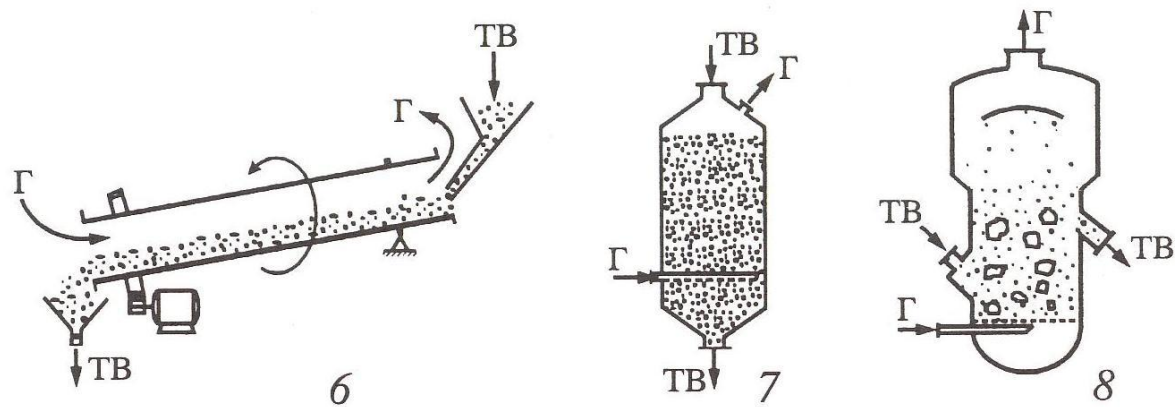
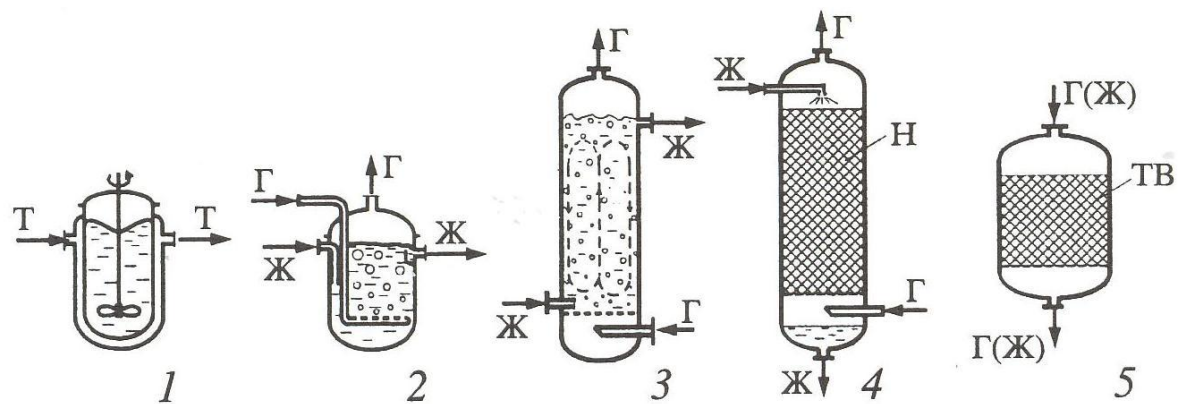
Типы химических реакторов

Реакторы периодического действия

- реакторы идеального смешения (РИС)

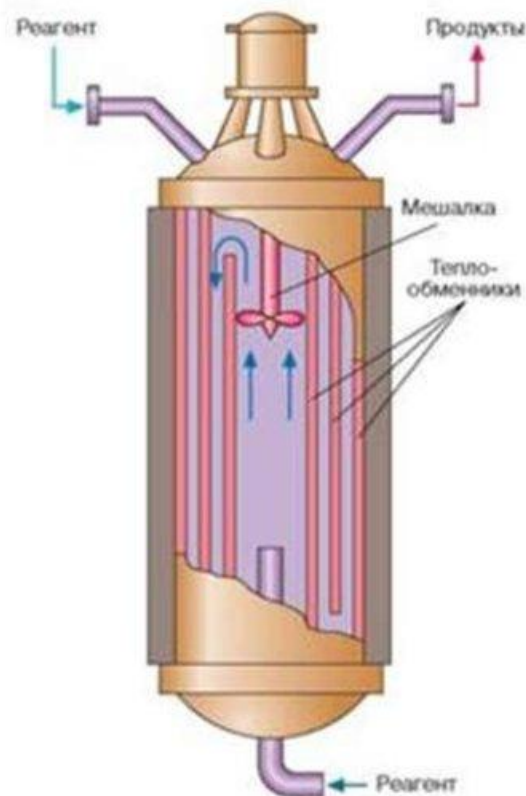
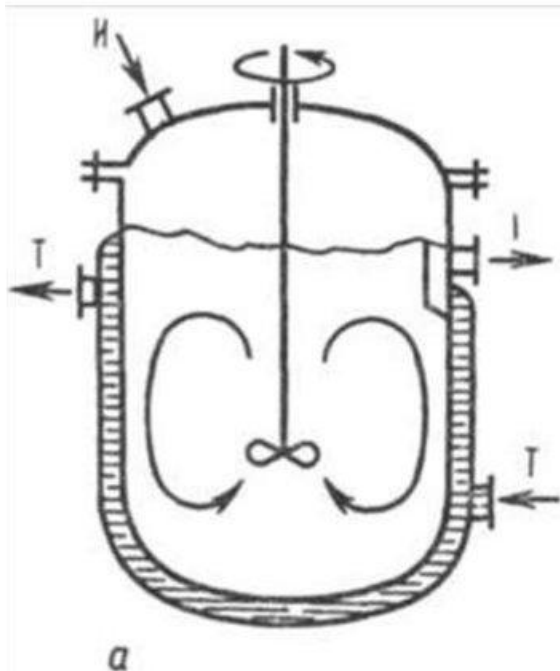
Реакторы непрерывного действия с различными режимами движения среды

- реакторы идеального вытеснения (РИВ-Н),
- реакторы идеального смешения (РИС-Н),
- реакторы промежуточного типа (РПТ-Н).



Реакторы идеального смешения непрерывного действия

Реактор идеального смешения непрерывный (РИС-Н) представляет собой аппарат с мешалкой, в который непрерывно подают реагенты, и также непрерывно выводят из него продукты реакции



Классификация реакторов с различными тепловыми режимами

При **адиабатическом** режиме в реакторе отсутствует теплообмен с окружающей средой и тепло химической реакции полностью расходуется на изменение температуры реакционной смеси.

При **изотермическом** режиме путем подвода или отвода тепла в реакторе поддерживают постоянную температуру в течение всего процесса.

При **политропическом** режиме температура в реакторе непостоянна, при этом часть тепла может отводиться от реакционной смеси или подводиться к ней.

ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКАЯ СИСТЕМА

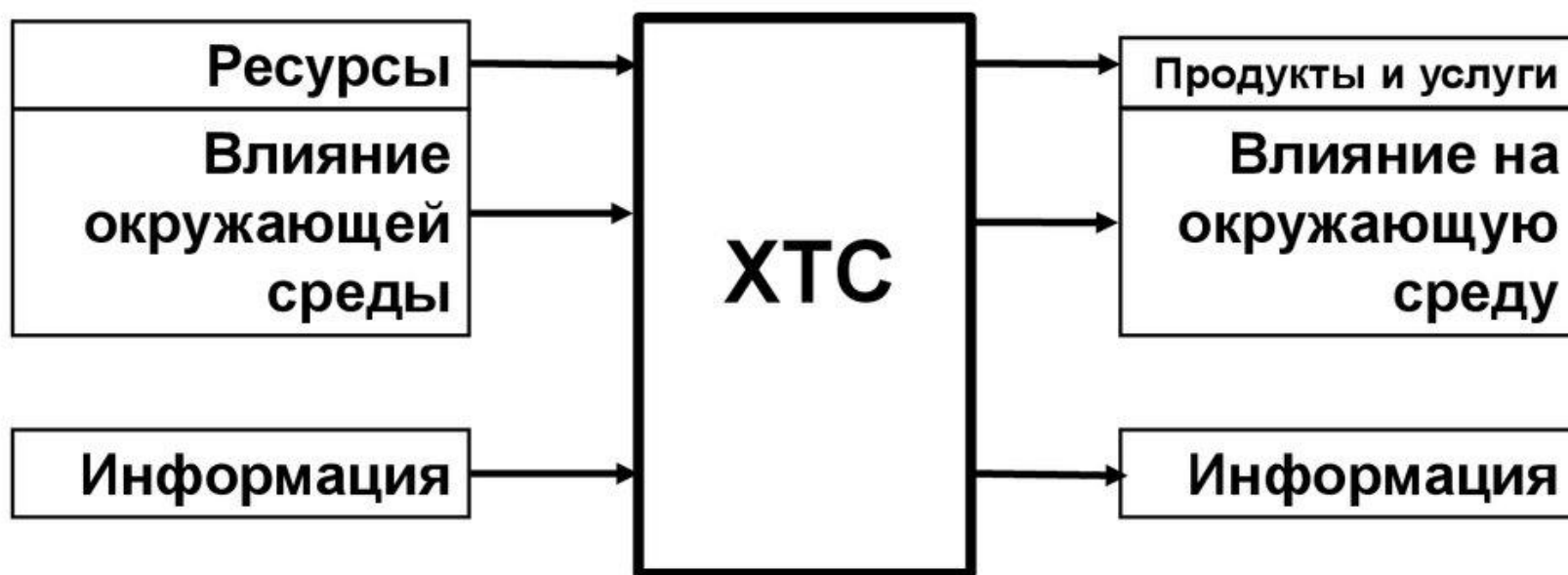
Основные элементы ХТС

Системой называют упорядоченную совокупность материальных объектов, соединенных какими-либо связями, предназначенную для достижения определенной цели наилучшим образом.

ХТС – совокупность взаимосвязанных процессов и аппаратов (операторов), функционирующих как единое целое с целью превращения сырья в качественный продукт с минимальными затратами ресурсов и сохранением качества окружающей среды.

(ХТС) многоассортиментного производства - это упорядоченная последовательность технологических процессов производства одного или нескольких целевых или промежуточных продуктов и множество технологических аппаратов с системой материальных и энергетических связей между ними, необходимое и достаточное для производства этого продукта

ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКАЯ СИСТЕМА (внешние связи)



ဘဝကလေး

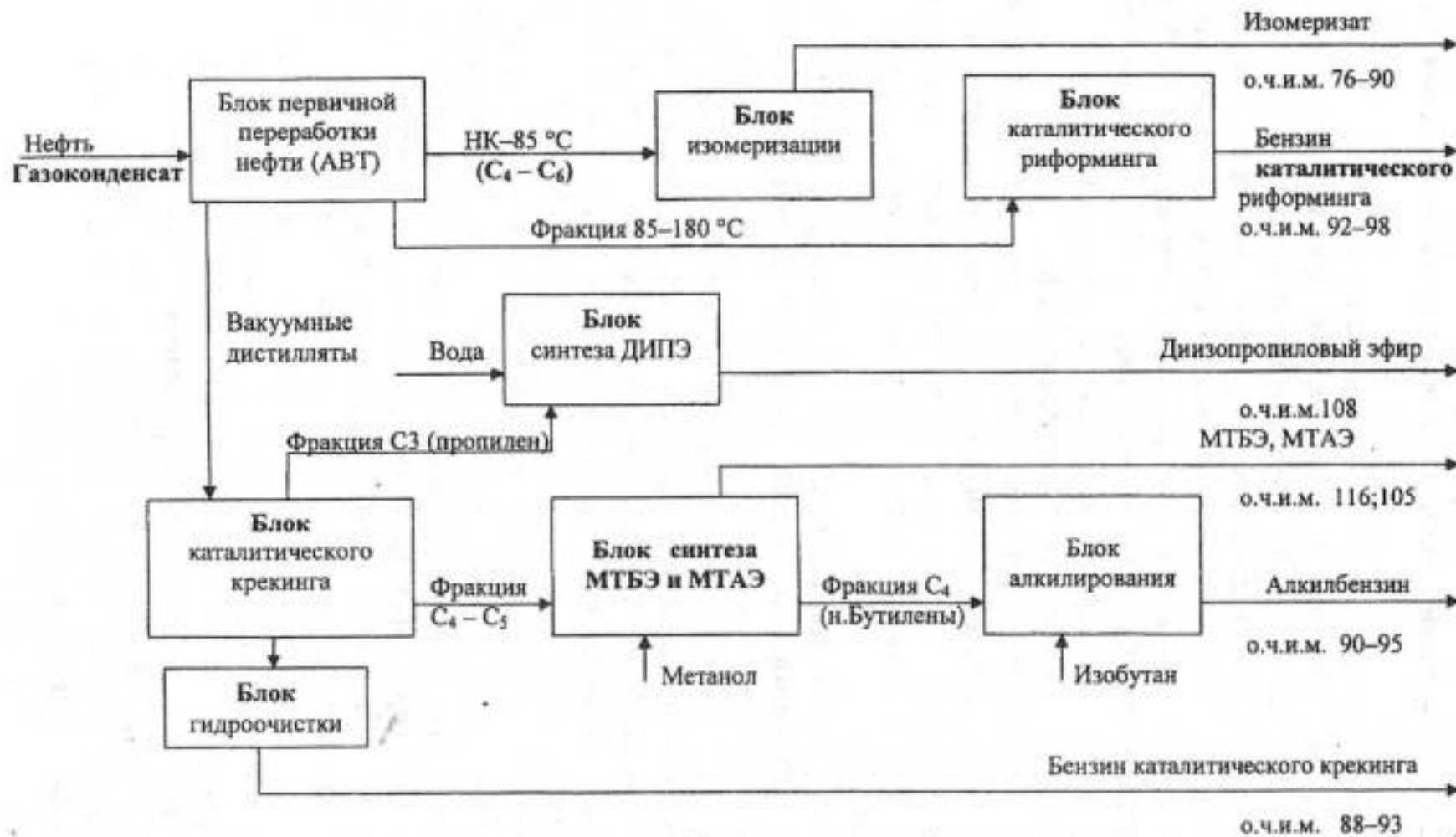
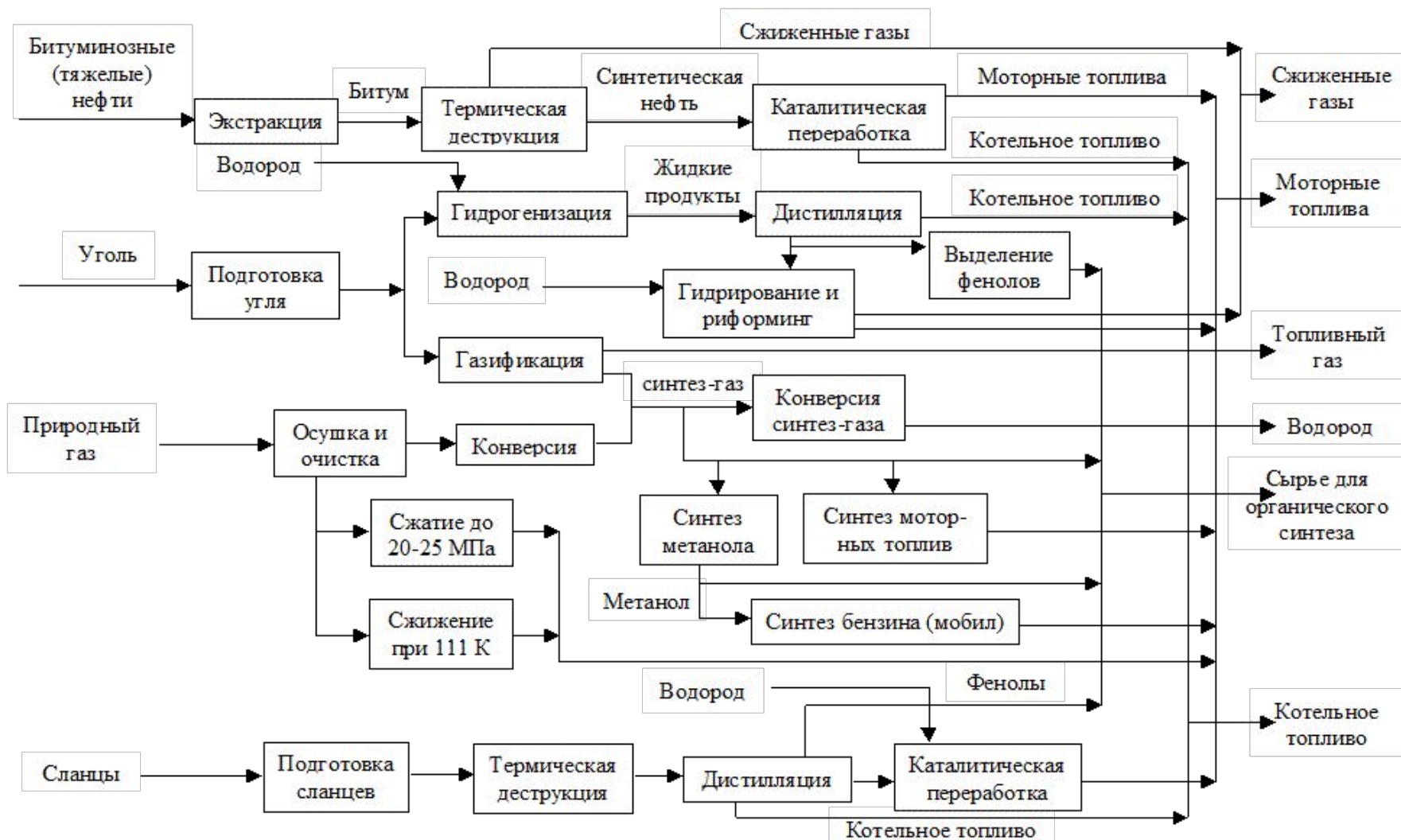
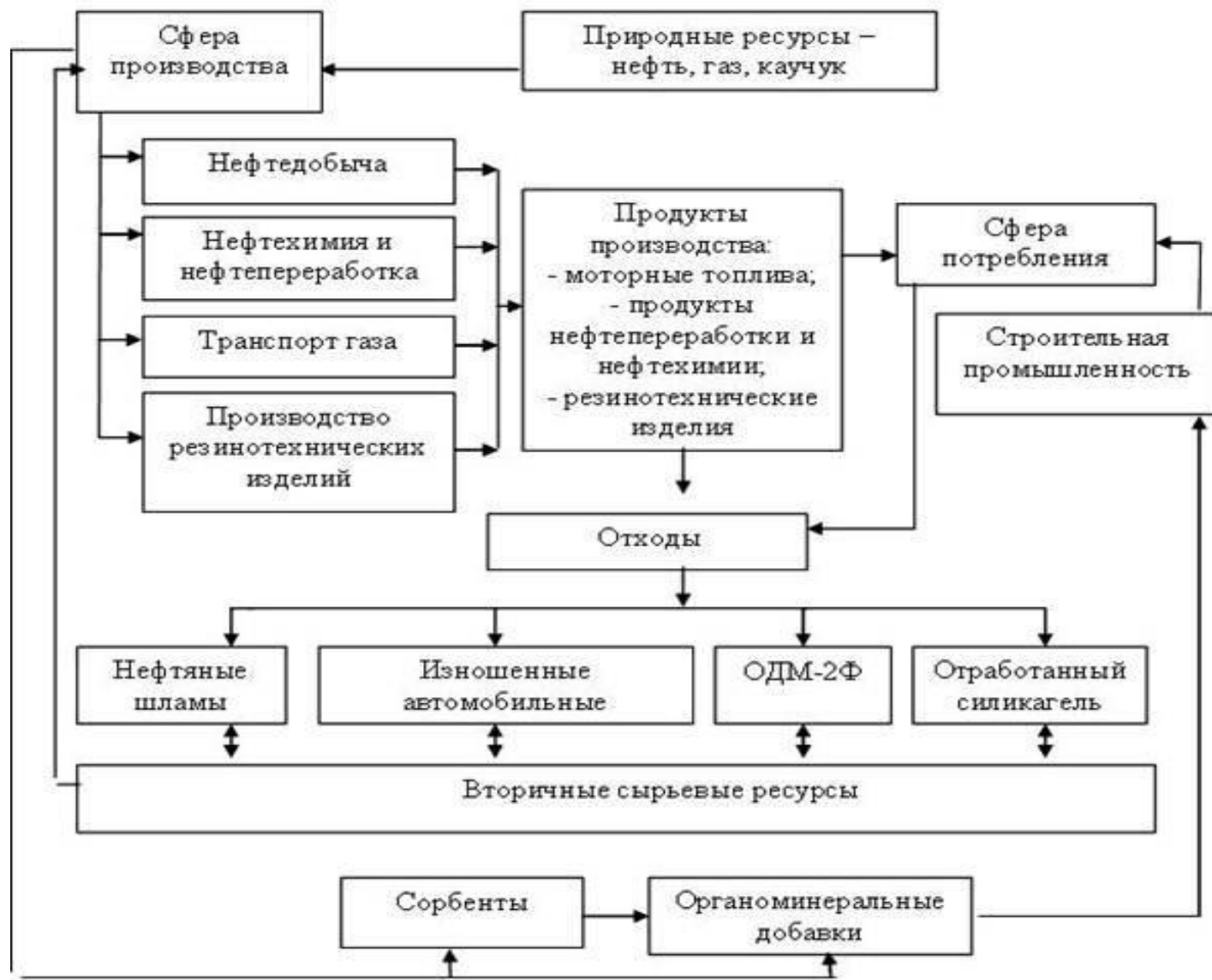


Рис.1 Схема переработки нефти, обеспечивающая получение автобензинов, отвечающих требованиям Евро-3, Евро-4 и Евро-5

Комбинированные ХТС и комплексное использование сырья



Глобальная ХТС



Моделирование химических процессов

- **Моделирование** — это метод исследования, при котором свойства объекта изучаются не на самом объекте, а на его модели, в которой специально создаются такие же либо аналогичные реальному процессу условия. Различают два вида моделирования: физическое и математическое.
При физическом моделировании процессы в объекте и в модели не отличаются по физической природе, но сами системы различаются, например, размерами.
- При **математическом моделировании** процесс изучается на математической модели, представляющей собой описание на языке математики отдельных сторон процесса. Это описание объединяет опытные факты и устанавливает взаимную связь между параметрами процесса, связь выражается в виде математических уравнений.
- **Математическое моделирование включает** три этапа:
 - 1) составление математической модели;
 - 2) решение математической модели (составление алгоритма);
 - 3) установление адекватности модели изучаемому объекту.

ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКАЯ СИСТЕМА

Материальный баланс

Материальный баланс— это вещественное выражение закона сохранения массы вещества, согласно которому во всякой замкнутой системе масса веществ, вступивших во взаимодействие, равна массе веществ, образовавшихся в результате этого взаимодействия

Материальный баланс составляют по уравнению основной суммарной реакции с учетом параллельных и побочных реакций.

Он может быть составлен для всех веществ, участвующих в процессе, или только для одного какого-либо вещества. Обычно учитываются не все протекающие реакции и получаемые побочные продукты, а лишь те, которые имеют существенное значение, т.е. . Носит приближенный характер.

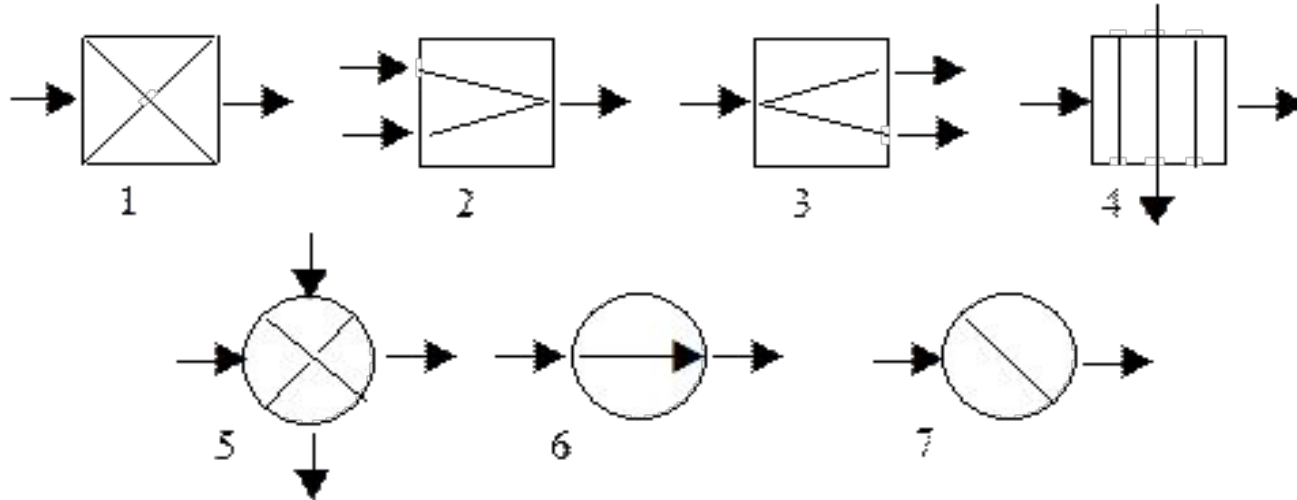
ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКАЯ СИСТЕМА

Энергетический баланс

В основу **энергетического баланса** положен закон сохранения энергии, согласно которому количество энергии, введенной в процесс, равно количеству выделяющейся энергии, т. е. приход энергии равен ее расходу.

Тепловой баланс составляют по данным материального баланса с учетом тепловых эффектов химических реакций и физических превращений, протекающих в аппарате, а также с учетом подвода или отвода тепла.

Технологические операторы (элементы) ХТС

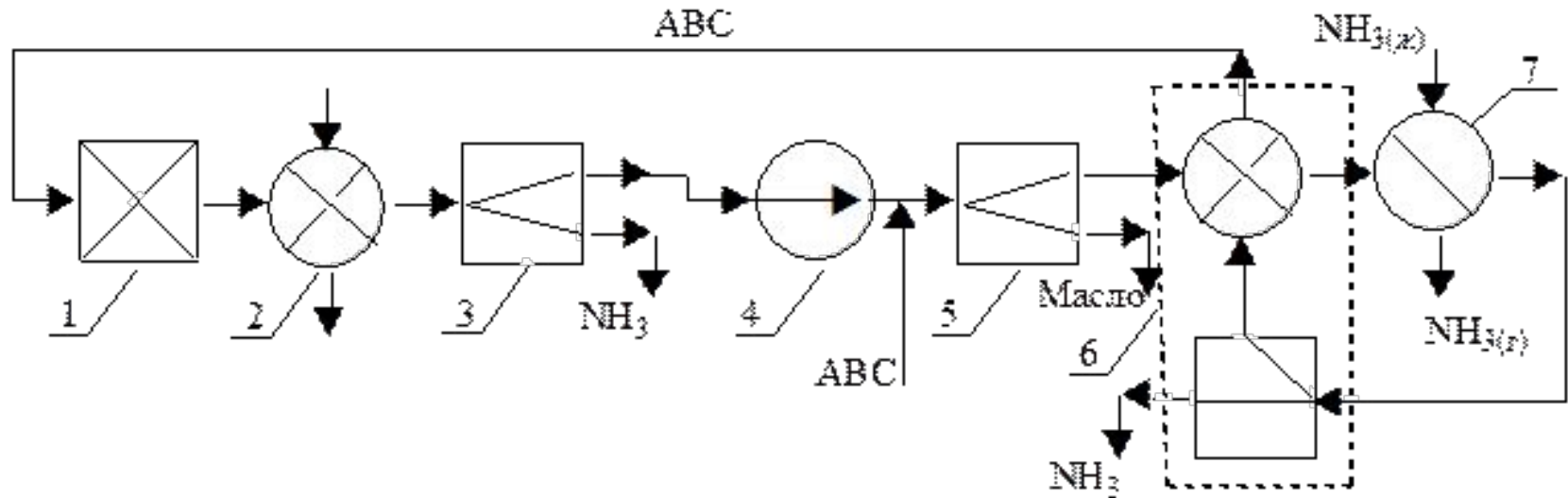


Технологические операторы: **основные**: 1 - химического превращения; 2 - смешивание; 3 - разделение; 4 - межфазного массообмена;

вспомогательные: 5 - теплообмена (нагревание или охлаждение); 6 - сжатие или расширение; 7 - изменение агрегатного состояния

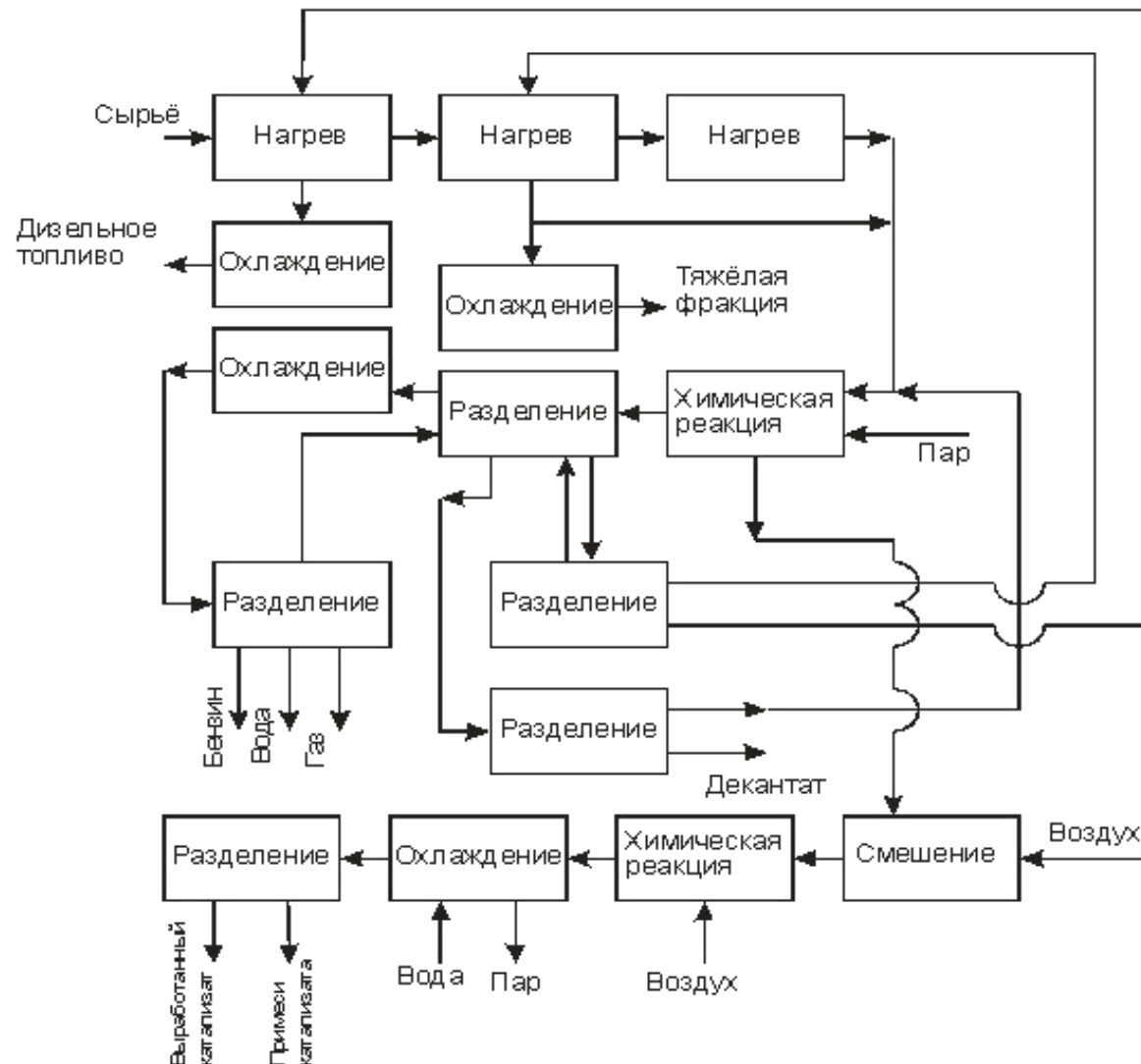
Элемент – это аппарат, в котором протекает процесс ХТС

Операторная схема



Сокращенная операторная схема синтеза аммиака: 1- колонна синтеза; 2 - холодильник; 3 - сепаратор; 4 - циркуляционный компрессор; 5 - сепаратор масел; 6 - конденсационная колонна; 7- испаритель аммиака

Графическое описание модели ХТС



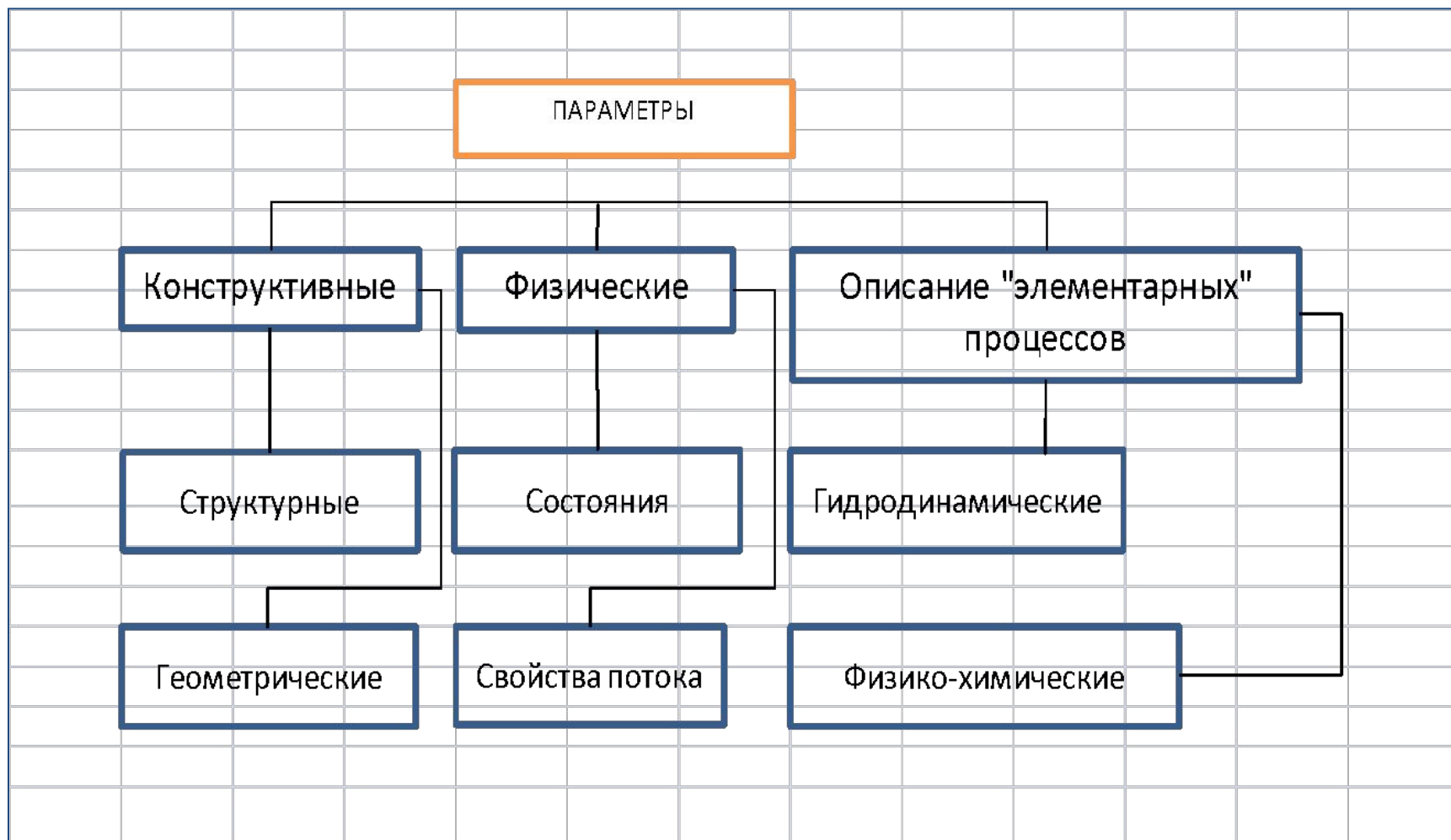
Классификация математических моделей по виду переменности процесса

- **Модели с распределенными параметрами** описывают основные переменные процессы изменяющиеся во времени и в пространстве
- **Модели с сосредоточенными параметрами** описывают переменные процессы, не изменяющиеся во времени, а изменяющиеся только во времени

Классификация математических моделей по характеру режимов процесса

- **Статическая модель** включает описание связей между основными переменными процесса в установившихся режимах (в равновесном состоянии без изменения во времени).
- **Динамическая модель** включает описание связей между основными переменными процесса во времени при переходе от одного режима к другому.
- Совокупность статической и динамической моделей с ограничениями и дополнительными условиями называют **полной математической моделью** процесса.

Классификация параметров математической модели

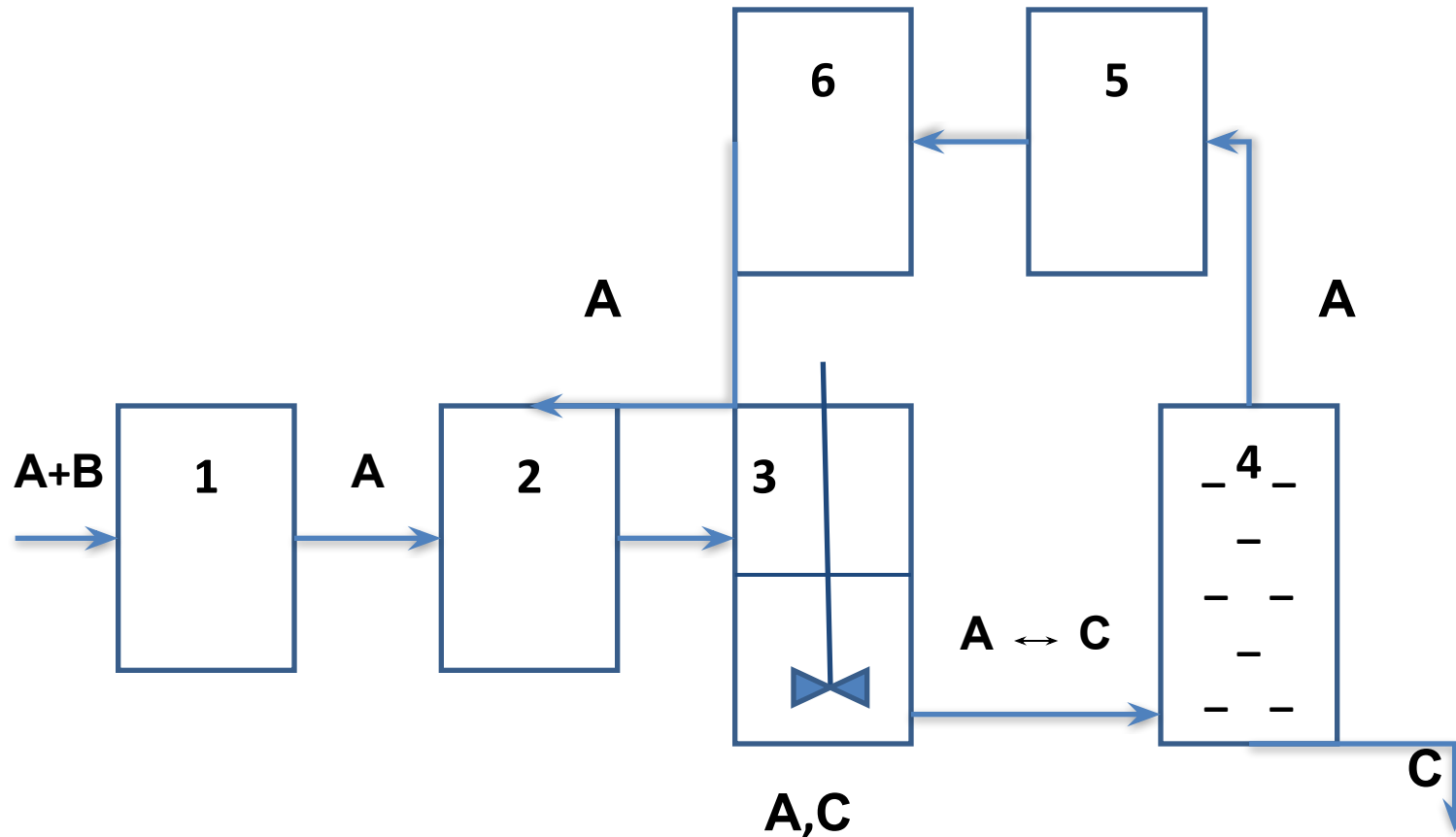


- Результаты моделирования зависят от того, насколько полно отражены различные параметры реального объекта в его математической модели.
- Таким образом, формально математическое описание представляет собой совокупность зависимостей, связывающих все перечисленные выше классы параметров в единую систему уравнений. Среди этих соотношений могут быть выражения, отражающие общие физические законы.

Исследование химико-технологических процессов (ХТП) методом математического моделирования

- **Химико-технологический процесс (ХТП)** – совокупность операций по переработке сырья с целью получения требуемых продуктов. Он может быть реализован как в отдельном аппарате, так и в определенной последовательности аппаратов.

Схема ХТП



1 – адсорбер, 2 – смеситель, 3 – химический реактор,
4 – ректификационная колонна, 5 – конденсатор, 6 – насос

Модели «элементарных» стадий процесса

- – математическое описание структуры потока;
- – математическое описание массообмена;
- – математическое описание теплообмена;
- – математическое описание химических превращений

Блочный принцип построения математической модели ХТП

1. Исследование гидродинамической части объекта – основы будущей модели.
2. Изучение кинетики химических реакций, скорости процессов массо- и теплопередачи, кинетику фазовых переходов и составление соответствующих элементарных функциональных зависимостей.
3. Объединение моделей элементарных процессов в общую результирующую математическую модель объекта.

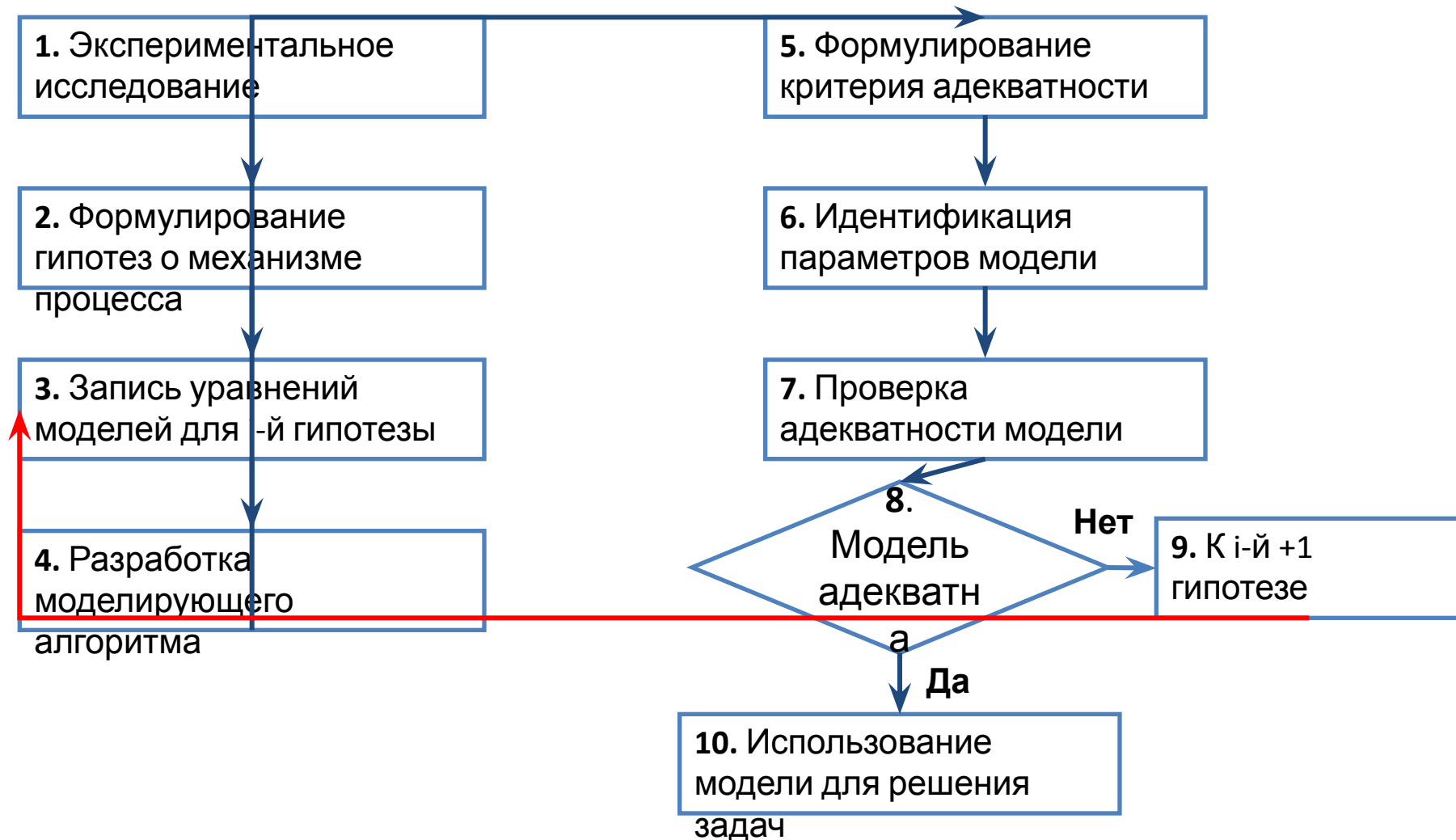
Группы уравнений в составе математической модели ХТП

1. Уравнения баланса масс и энергии, записанные с учетом гидродинамических структур движения потоков.
2. Уравнения элементарных процессов химических реакций: тепло- и массообмена, фазовых превращений и т. п.
3. Теоретические, полуэмпирические соотношения между различными параметрами процесса.
4. Ограничения на параметры процесса.

Классификация уравнений математической модели ХТП

- конечные алгебраические или трансцендентные уравнения;
- обыкновенные дифференциальные уравнения;
- дифференциальные уравнения в частных производных.

Блок-схема построения математической модели



Применение систем автоматизации инженерных расчетов и моделирования в нефтегазовой отрасли

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

Наиболее важные преимущества моделирования технологических процессов

- 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.

Общие принципы моделирования в нефтяной и газовой промышленности

- Моделирующие программы ХТП представляют собой универсальную программную оболочку, в которой реализуются **три основных режима работы моделирующей программы**:
 - – «изображение процесса» – для графического представления технологической схемы производства (рис.1);
 - – «расчеты» – для выполнения вычислений с применением реализованных в виде расчетных модулей алгоритмов решения задач компьютерного моделирования (рис.2);
 - – «диаграмма процесса» – для представления результатов выполненных расчетов в виде таблиц, графиков и диаграмм (рис.3).

Рисунок 1. «Изображение процесса» (HYSYS)

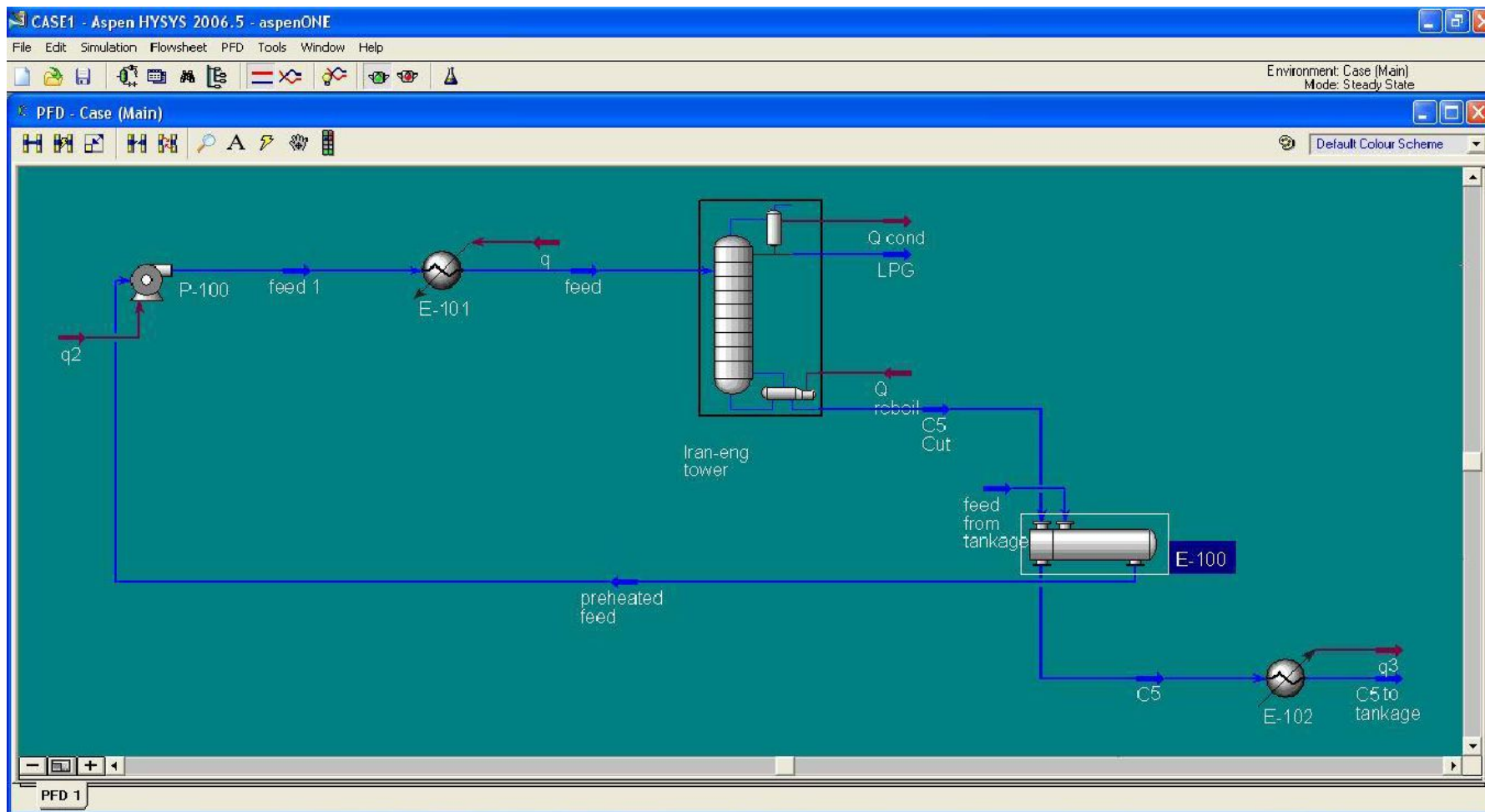


Рисунок 2. «Расчеты» (HYSYS)

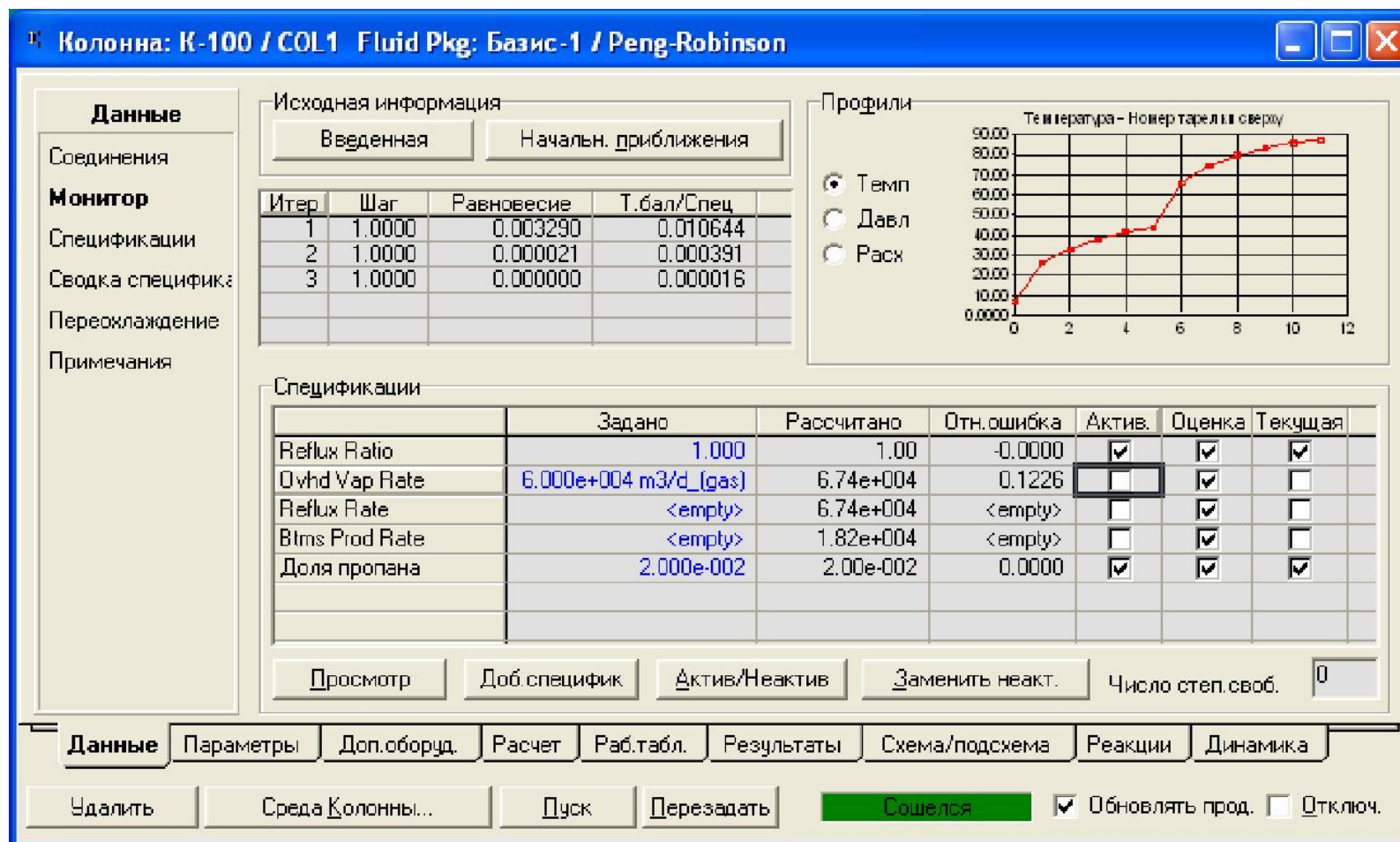


Рисунок 3. Графики процесса в ChemCAD

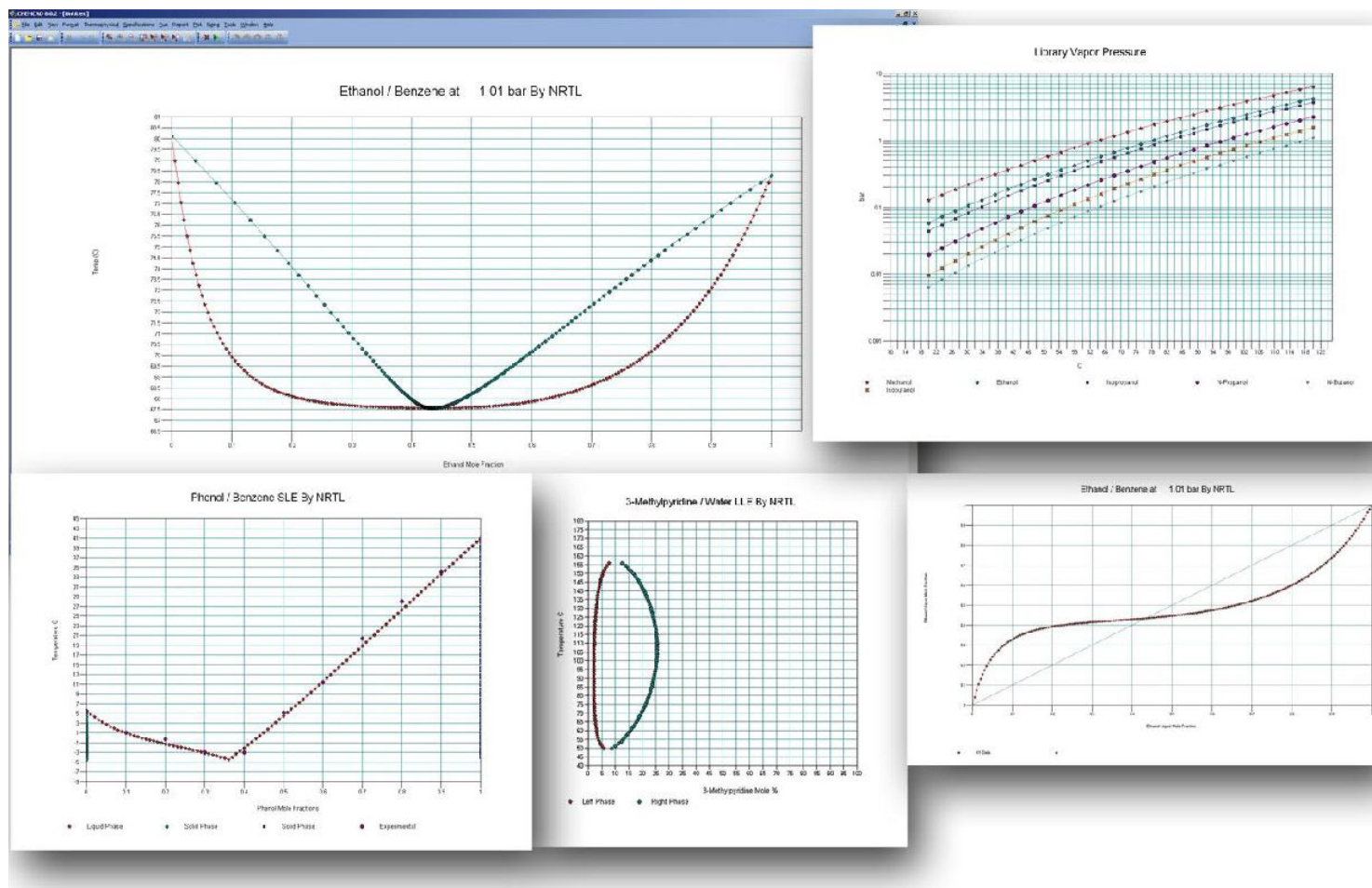
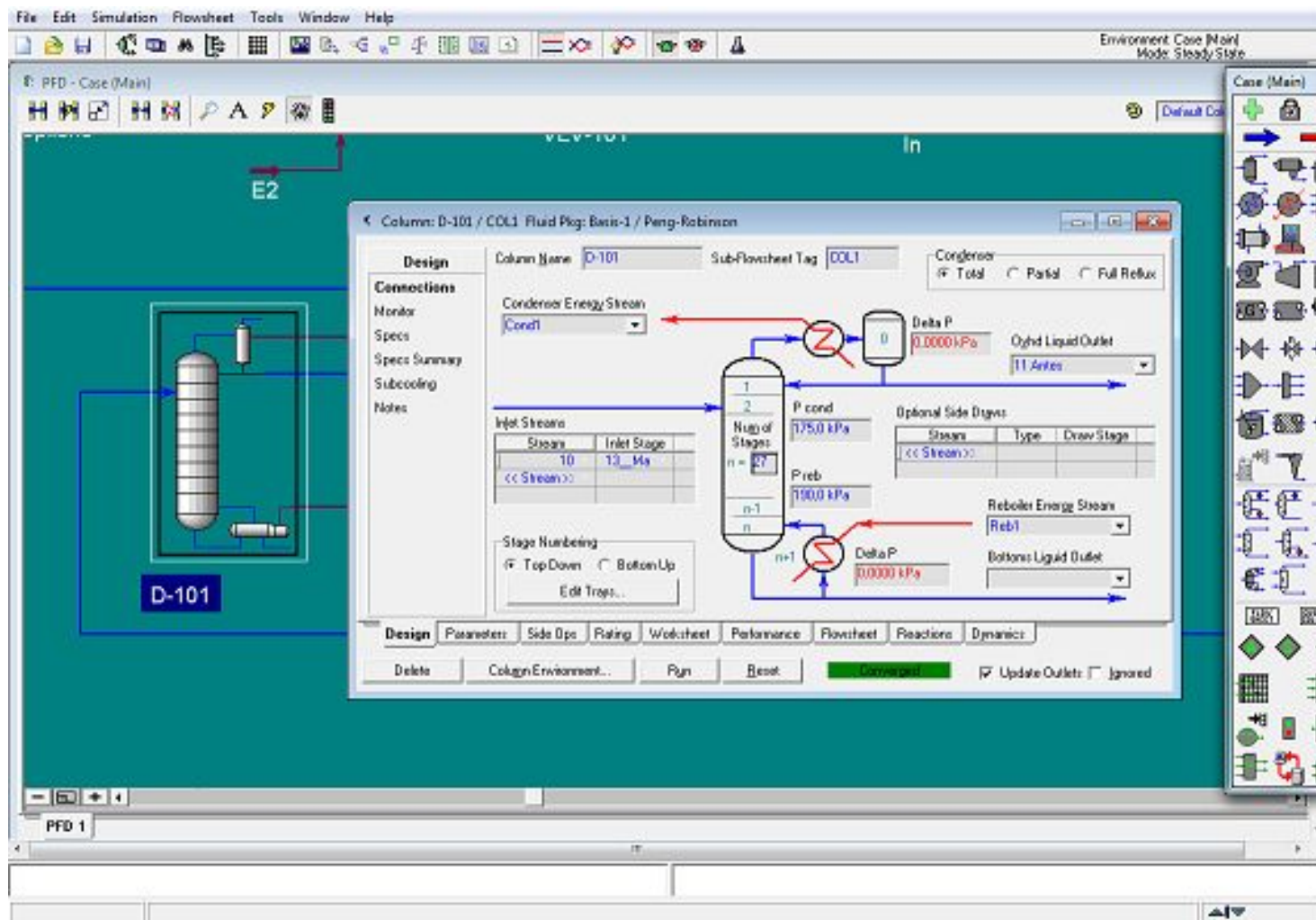


Рисунок 4. Задание параметров оборудования



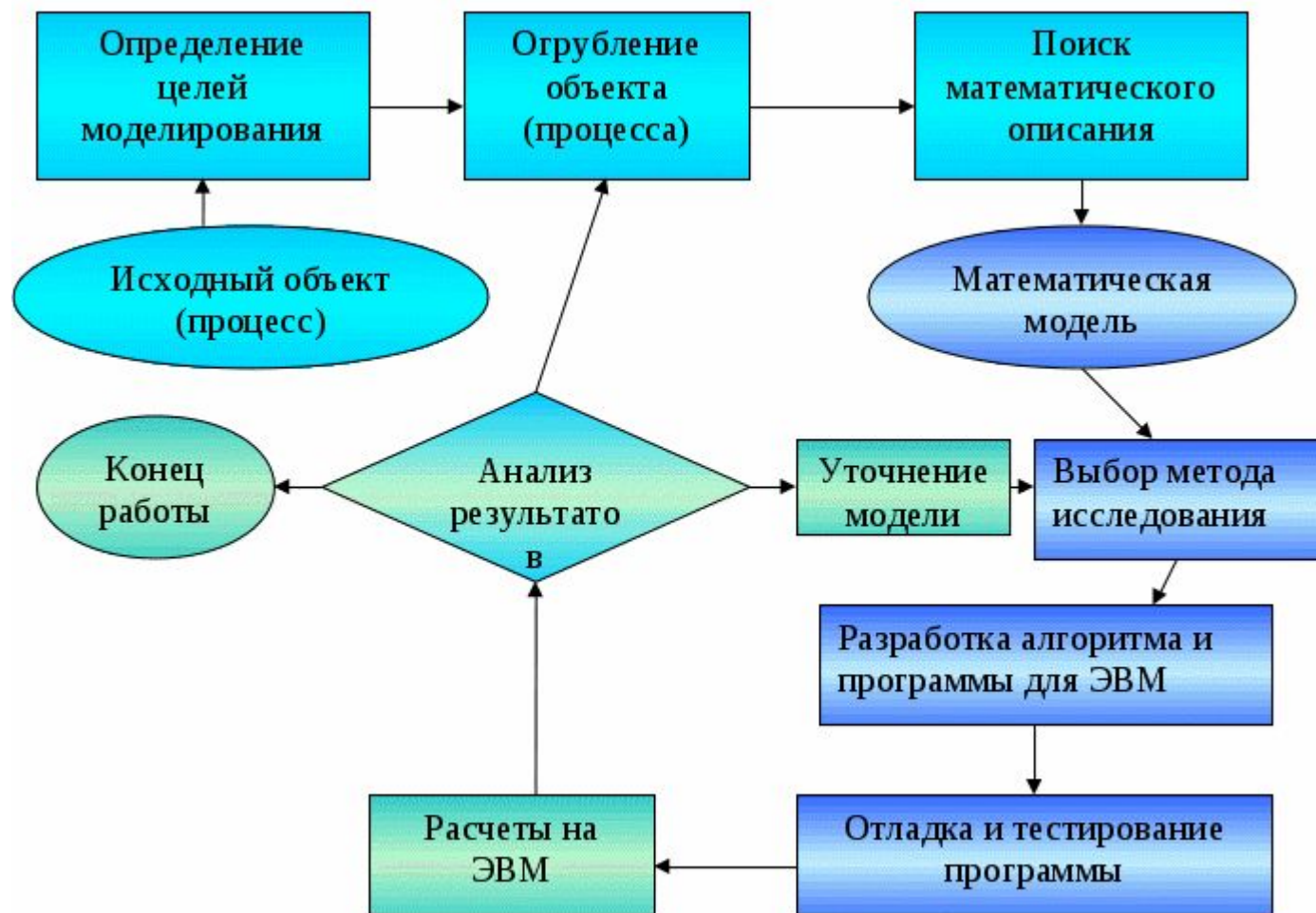
Требования, предъявляемые к современным программам моделирования (симуляторам)

- 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.

Набор основных подсистем, входящих в системы моделирования ХТП

Данные подсистемы обеспечивают 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 газовых конденсатов, 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 (летучесть) 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.



Обзор систем моделирования и инженерных расчетов, применяемых в нефтегазовой отрасли

- **Hysim и Hysys.** Продукты канадской компании Hyprotech Ltd. Hysim позволяет выполнять статическое моделирование практически всех основных процессов газопереработки, нефтепереработки и нефтехимии.
- **Aspen HYSYS** (американская компания Aspen Technologies Inc) представляет собой программный пакет, предназначенный для моделирования в стационарном режиме, проектирования химико-технологических производств, контроля производительности оборудования, оптимизации и бизнес-планирования в области добычи и переработки углеводородов и нефтехимии (Рис.1).
- Программный пакет **CHEMCAD** (Рис.2) разработан фирмой ChemStations, Inc. Пакет включает средства статического моделирования основных процессов, основанных на фазовых и химических превращениях, а также средства для расчета геометрических размеров и конструктивных характеристик основных аппаратов, и оценки стоимости оборудования. Программа разработана для платформы Windows, имеет графический интерфейс.

- **DESIGN II.** Пакет компании WinSim Inc., имеющий все инструменты для полноценного моделирования в газонефтепереработке. Включает набор из 880 компонентов, инструменты синтеза наборов по данным анализа ASTM-D86/1160, TBP, содержит 50 методов термодинамических расчетов, 900 компонентов базы данных. Имеет интерфейсы Visual Basic, тесно интегрирован с Microsoft Excel.
- **Pro II и ProVision.** Эти широко известные и применяемые в нефтегазовой отрасли России программные продукты разработаны американской фирмой Simulation Sciences, Inc. Практически, в Pro II / ProVision заложены возможности моделирования почти всех химических и нефтехимических производств. Также имеются широкие возможности для работы с растворами электролитов. Имеется возможность проведения гидравлических расчетов сепарационного оборудования, реакторов, насадочных и тарельчатых ректификационных колонн. В настоящий момент он является частью пакета Process Engineering Suite (PES) – пакета для технического проектирования технологического процесса. Фирма также имеет инструмент оптимизации технологических процессов Connoisseur и пакет он-лайн контроля производительности (ROMeo Online Performance Suite) ROMeo.

Российские разработки систем моделирования

- **КОМФОРТ.** Эта система моделирования представляет собой инструментальное средство для выполнения поверочных и проектных расчетов материально-тепловых балансов различных химических производств. КОМФОРТ состоит из управляющей программы и модулей расчета аппаратов. Управляющая программа с конкретным набором технологических модулей образует предметно-ориентированную моделирующую программу, позволяющую выполнять расчеты для конкретного класса химико-технологических систем (ХТС). Программа имеет средства для расчета всех основных процессов фракционирования для газопереработки. Программа была разработана ВНИИГАЗ (ныне ООО «Газпром ВНИИГАЗ»).
- **GIBBS.** Это компьютерная программа комплексного моделирования технологических процессов промышленной подготовки, переработки и транспорта природного и попутного газа, газового конденсата и нефти (подробнее рассмотрена далее). Разработан фирмой «Топэнергобизнес» в 1992 году тогда еще для DOS. В настоящее время используется под Windows.

Рисунок 1. Модель в Aspen Hysys

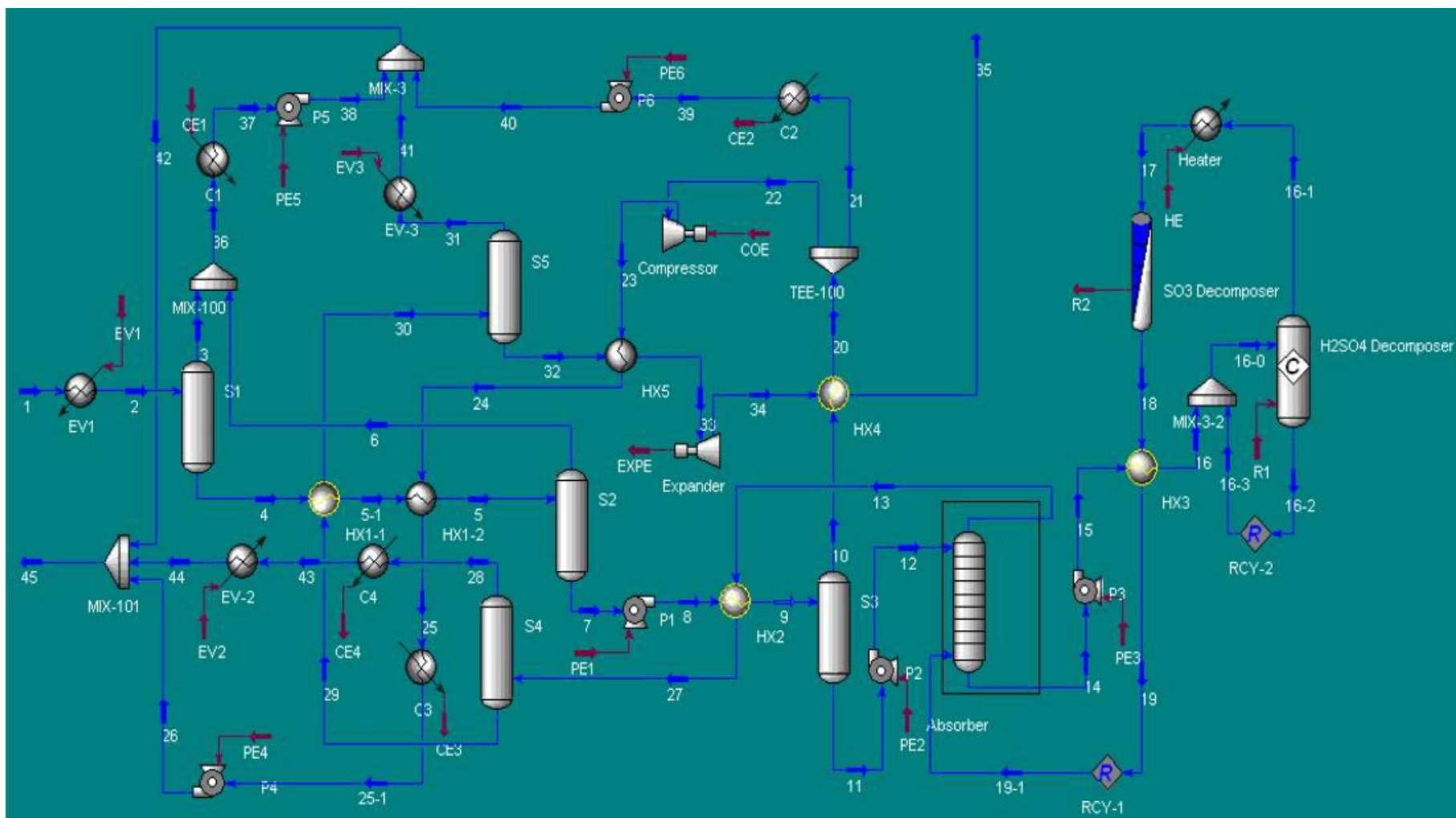
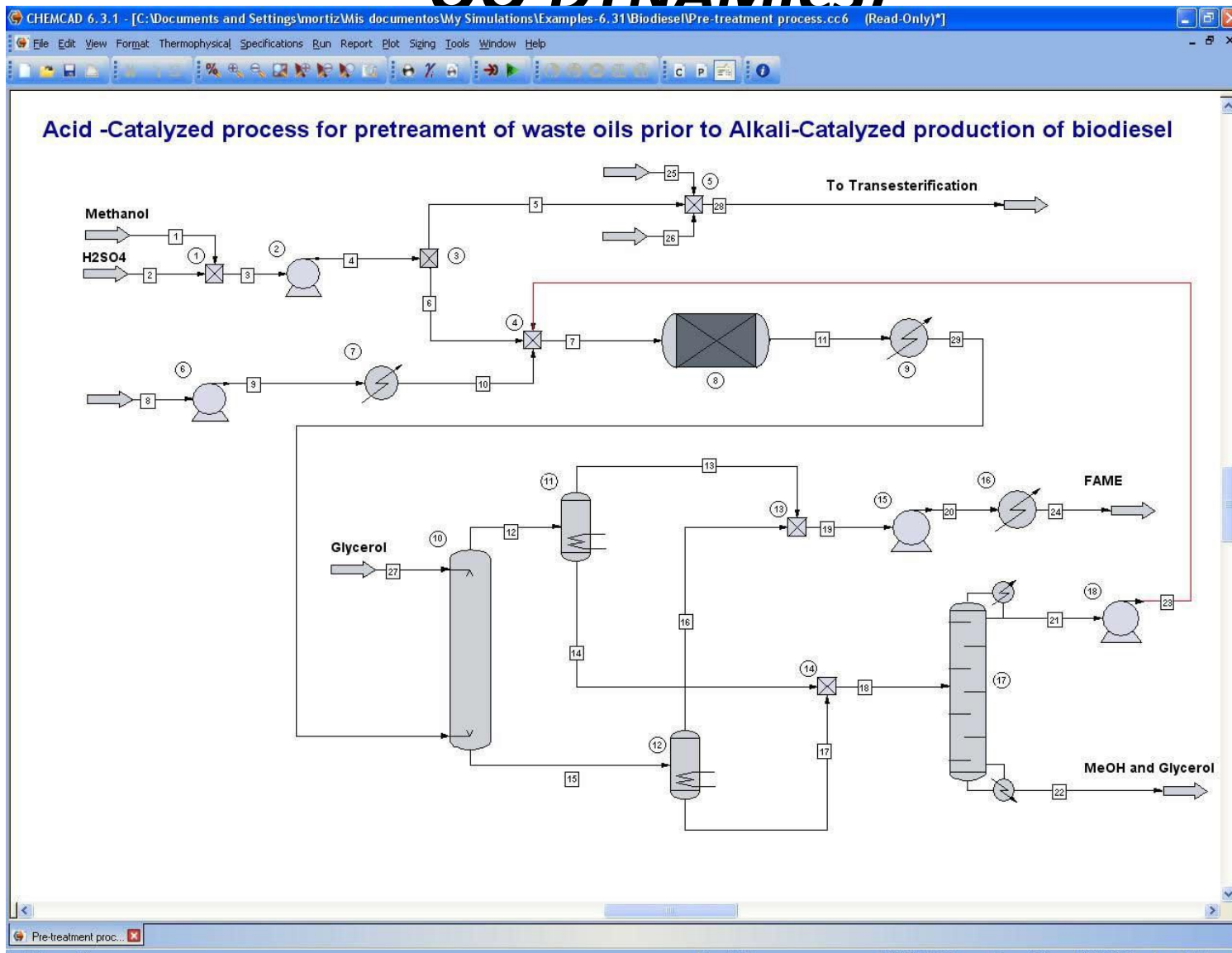


Рисунок 2. CHEMCAD (модуль CC-DYNAMICS)



Пакет программ AspenONE

Aspen HYSYS

Aspen HYSYS представляет собой программный пакет, предназначенный для моделирования в стационарном режиме, проектирования химико-технологических производств, контроля производительности оборудования, оптимизации и бизнес-планирования в области добычи и переработки углеводородов и нефтехимии. Программа с одинаковым успехом работает в проектных и инжиниринговых фирмах, в ПКО заводов, в научно-исследовательских институтах и на заводских установках. На сегодняшний день инженеры и технологи используют HYSYS как средство построения стационарных моделей при проектировании технологических процессов, для мониторинга состояния оборудования и выявления неисправностей, для оптимизации технологических режимов, бизнес – планирования и управления активами.

HYSYS имеет следующие встроенные модули

- Модуль **HYSYS Data Rec** позволяет согласовывать данные модели и реальной установки для контроля рабочих характеристик оборудования и on-line оптимизации.
- – **HYSYS OLI Interface** – интерфейс к программе расчета растворов электролитов, разработанной компанией OLI Systems Inc. Добавление данного модуля позволяет расширить базу данных по термодинамическим свойствам, включив в нее свойства более 3000 органических и неорганических электролитов.
- – Модуль **HYSYS Optimizer** работает на основе метода последовательного квадратичного программирования (SQP). SQP метод является одним из самых современных и эффективных методов оптимизации. Он применяется как для оптимизации в стационарном режиме при проектировании (off-line оптимизация), так и для оптимизации работы реальной установки (on-line оптимизация).

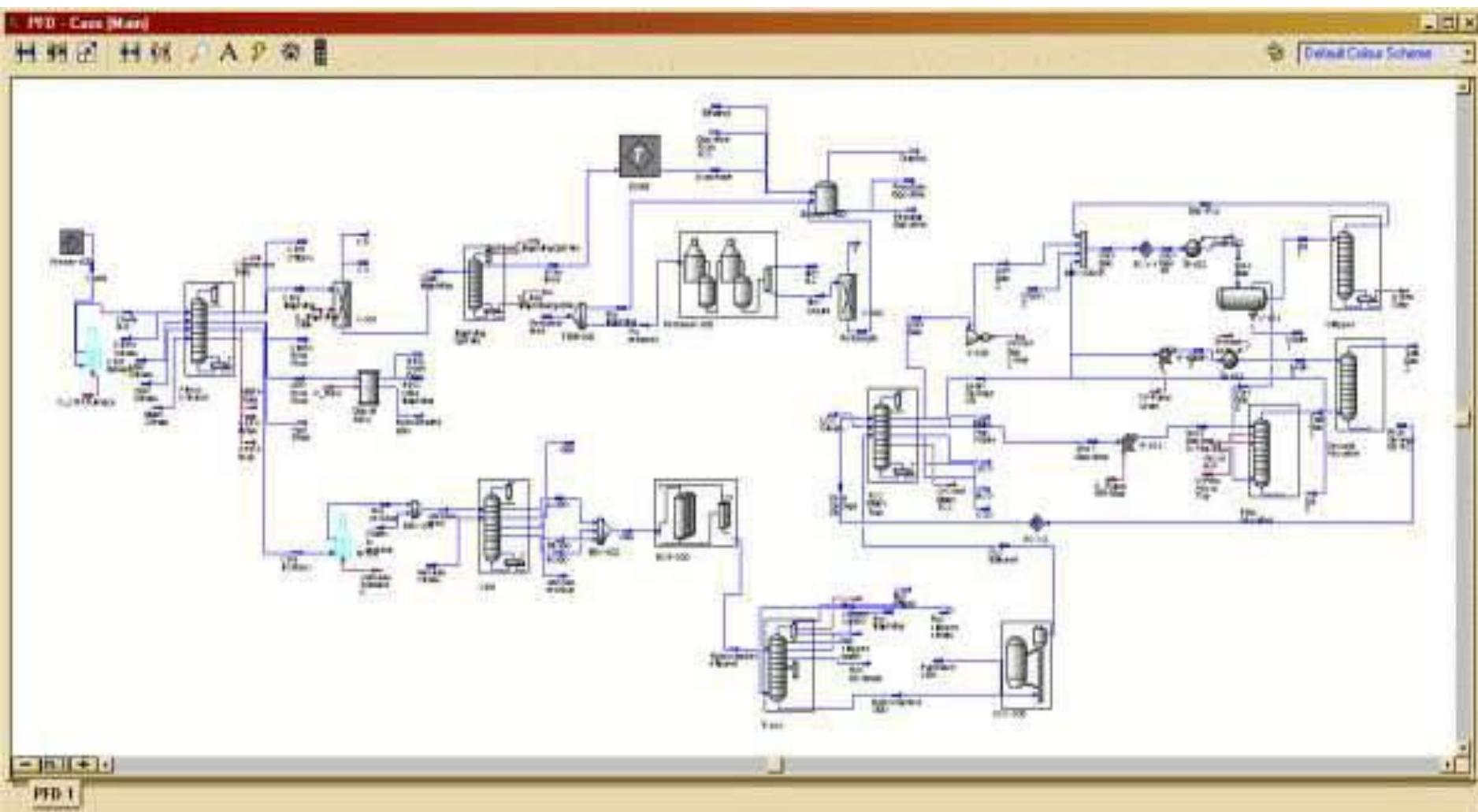
Дополнительные модули HYSYS

- Aspen HYSYS **Dynamics** – моделирование в динамическом режиме;
- Aspen HYSYS **Crude** – расчет потоков нефти, колонн АВТ;
- Aspen HYSYS **Amines** – расчет процессов аминовой ОЧИСТКИ;
- Aspen HYSYS **Pipeline Hydraulics - OLGAS 2-Phase** – расчет магистральных трубопроводов;
- Aspen HYSYS **Pipeline Hydraulics - PIPESYS** – расчет магистральных трубопроводов;
- Aspen HYSYS **Upstream** – расчет процессов добычи нефти;
- Aspen HYSYS **Petroleum Refining** – расчет основных

Aspen HYSYS Petroleum Refining

- **Aspen HYSYS Petroleum Refining** позволяет предприятиям оптимизировать производительность в масштабе всего предприятия, за счет использования комплексного моделирования всех технологических объектов (всего завода).
- **Aspen HYSYS Petroleum Refining** обеспечивает целостный взгляд на перспективы развития НПЗ через последовательное использование и широкое применение моделей внутри предприятия. Программа тщательно обрабатывает взаимозависимости установок (рис.3) и тем самым обеспечивает специалистов данными для принятия решений, поддерживая их совместную работу и обмен данными.

Рисунок 3. Комплексная модель в Aspen HYSYS Petroleum Refining



Специфические модели НПЗ Aspen HYSYS Petroleum Refining

- модели реакторов;
- каталитический крекинг (рис.4);
- каталитический риформинг (рис.5);
- Гидрокрекинг (рис.6);
- гидроочистка;
- быстрые в расчете модели ректификационных колонн;
- оптимизация смешивания;
- специализированные средства для анализа работы технологических объектов.

Рисунок 4. Моделирование выбора катализатора в Aspen HYSYS CatCracker

FCC-100

Design

Connections
Catalyst Blend
Calibration Factors
Notes

Base Catalyst Blend and Composition

	A/F-3		Normalized Total
Weight Fraction	1.0000		1.0000
Zeolite	26.69		26.69
Alumina	37.20		37.20
Rare Earth	3.746e-002		3.746e-002

Catalyst Library... Normalize Blend Details... Export Blend...

ZSM-5 Additive

Selectivity	Standard
ZSM-5 per Unit Mass of Base Blend	0.0000

Heat Capacities

Catalyst Heat Capacity [kJ/kg-C]	2.000
Coke Heat Capacity [kJ/kg-C]	1.800

Design Reactor Section Fractionator Worksheet Results

Delete FCC Environment... **OK** ☐ Ignored EO Variables

Рисунок 5. Моделирование реактора в Aspen HYSYS Reformer

Reformer-100

Reactor Section

Feeds

Reactor Control

Catalyst

Recontactor

Product Heater

Solver Options

Solver Console

Advanced

Reactor Temperature Specification

WAIT [C]	505.0
WABT [C]	469.1
Reactor Inlet Reference Temperature [C]	505.0
Rx 1 Temperature Bias [C]	0.0000
Rx 1 Inlet Temperature [C]	505.0
Rx 2 Temperature Bias [C]	0.0000
Rx 2 Inlet Temperature [C]	505.0
Rx 3 Temperature Bias [C]	0.0000
Rx 3 Inlet Temperature [C]	505.0
Rx 4 Temperature Bias [C]	0.0000
Rx 4 Inlet Temperature [C]	505.0
C5+ RON	99.01
C6+ RON	100.4
Sum of Aromatics [wt%]	74.44

Hydrogen Recycle

Recycle Compressor Flow [STD_m3/h]	5.789e+004
H2HC Ratio - Mol/Mol	2.000

Product Separator

Product Separator Temperature [C]	28.00
Product Separator Pressure [kPa]	350.0

Design **Reactor Section** Stabilizer Tower Results

Delete Reformer Environment... **OK** ☐ Ignored EO Variables

Рисунок 6. Моделирование установки гидрокрекинга в Aspen HYSYS Hydrocracker

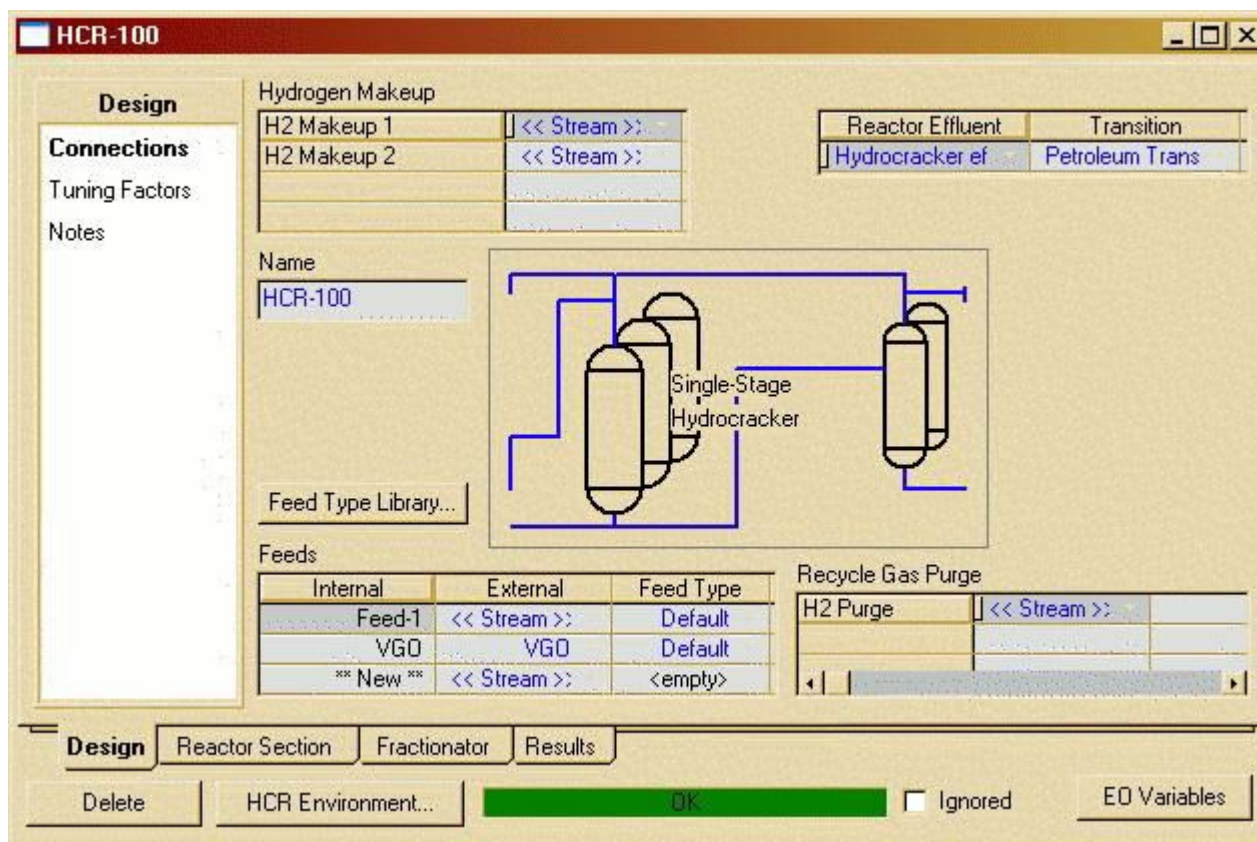


Рисунок 7. Проектирование факельной системы в Aspen Flare System Analyzer

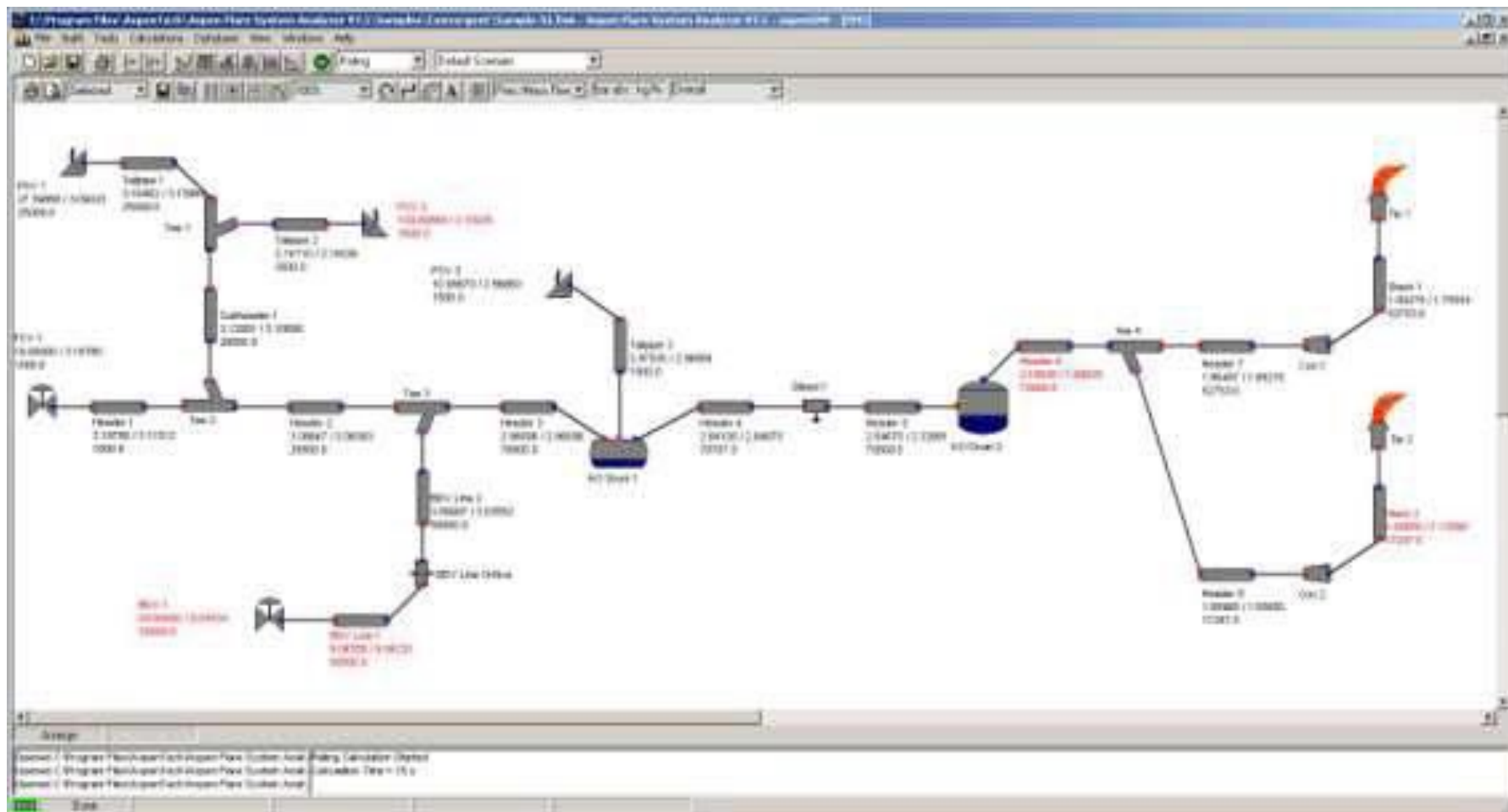


Рисунок 8. Расчет кожухотрубного теплообменника в Aspen Shell & Tube Exchanger

