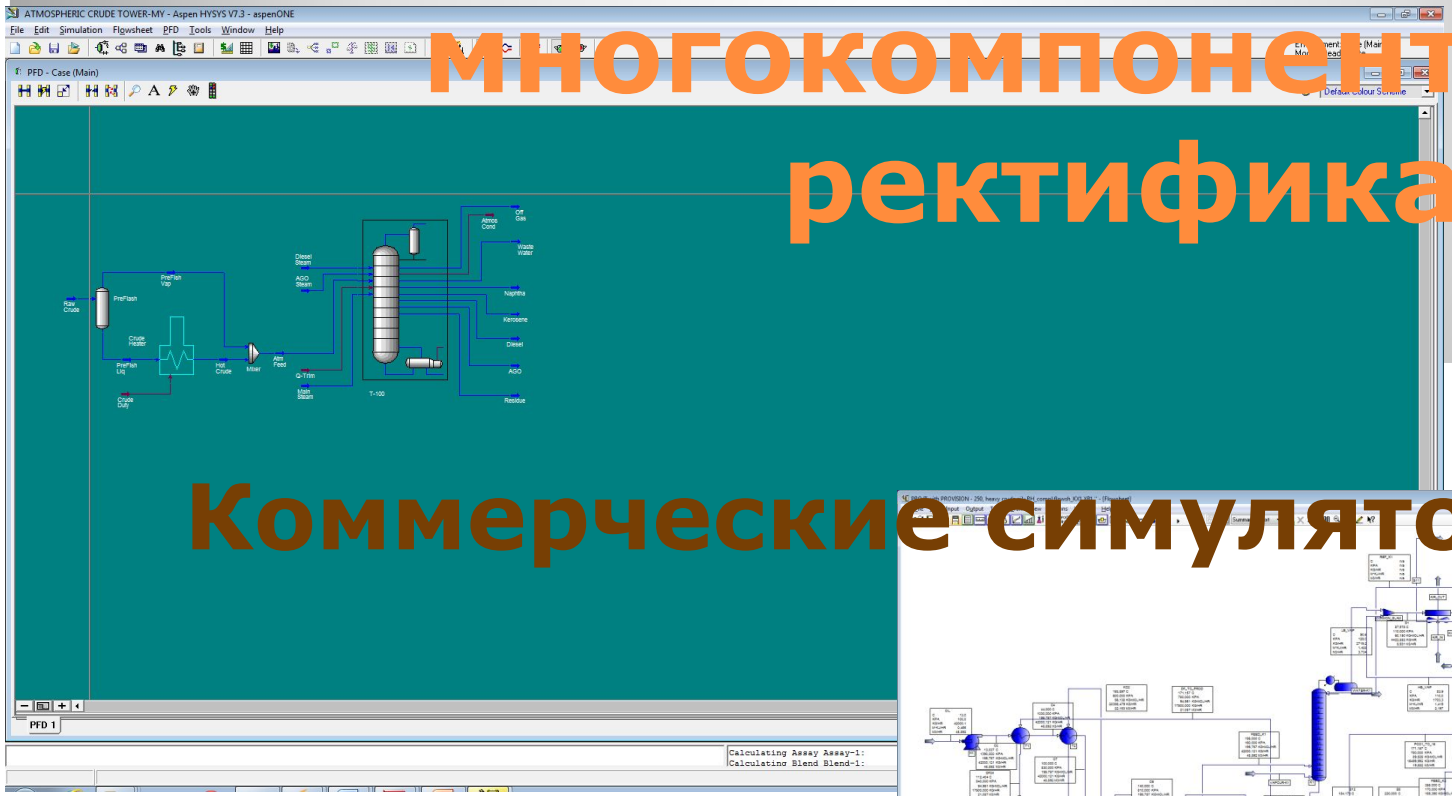
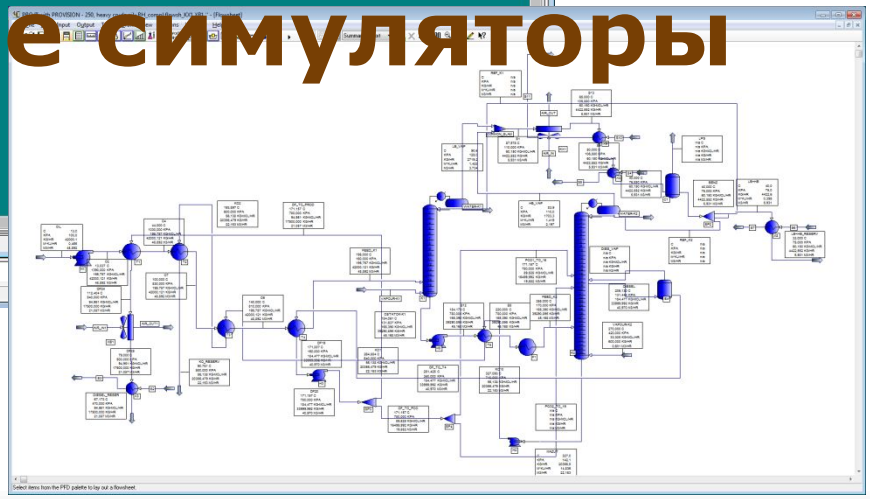
Математическое моделирование многокомпонентной ректификации



Коммерческие симуляторы



САПР

- Процесс моделирования полезен на протяжении всего жизненного цикла процесса, от исследований до утилизации.
- **САПР – система автоматизированного проектирования**

- Универсальные
- Специализированные

Ведущие коммерческие симуляторы (САПР)

- **AspenTech** http://www.aspentech.com/ – поставщик интеллектуальных программных продуктов и сервисов управления и проектирования для ХТ промышленности
- **Aurel Systems** http://www.aurelsystems.com/ – ПО для проектирования, модернизации, управления и оптимизации новых или действующих процессов. Открытый банк углеводородов
- **Bryan Research & Engineering, Inc.** http://www.bre.com/ – поставщик программных продуктов ProMax с модулем TSWEET и PROSIM. Моделирующие программные продукты, используются для проектирования и оптимизации газо-, нефтеперерабатывающих и нефтехимических производств

Ведущие коммерческие симуляторы (САПР)

- **Chemstations, Inc – Process Simulation Software** http://www.chemstations.com/ – полный набор инструментов для моделирования стационарных или динамических состояний химических процессов. Работает с периодическими, полу-периодическими и непрерывными системами
- **DESIGN II for Windows Process Simulation** *www.winsim.com/* – точное моделирование химических и нефтехимических процессов, включая подготовку, разделение и переработку нефти и газа, кристаллизацию, а так же расчёт трубопроводов
- **Virtual Materials Group Inc** http://www.virtualmaterials.com/ – Предлагают ПО для моделирования процессов нефтяной, газовой и химической промышленности

Еще симуляторы (САПР)

- Computing in Technology GmbH
- IDEAS Simulation Inc
- KBC: Petro-SIM
- PFD: Dynochem
- Physical Process Modeling
- ProSim
- RSimpoint, Inc.

Построение моделей в HYSYS

Компьютерная система ***HYSYS*** предназначена для моделирования и оптимизации химико-технологических процессов.

ATMOSPHERIC CRUDE TOWER-MY.HSC

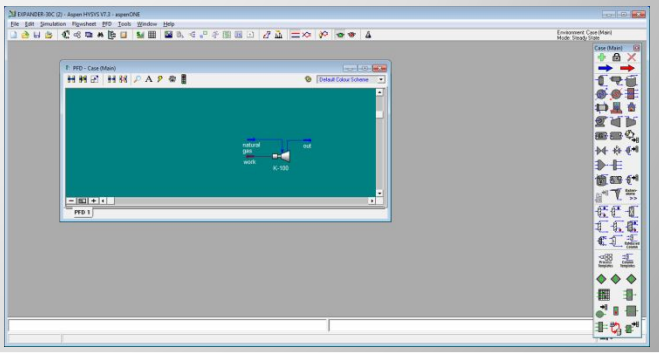
pump.hsc

mix1.hsc

EOS PR.hsc

expander.hsc

expander-30C.hsc



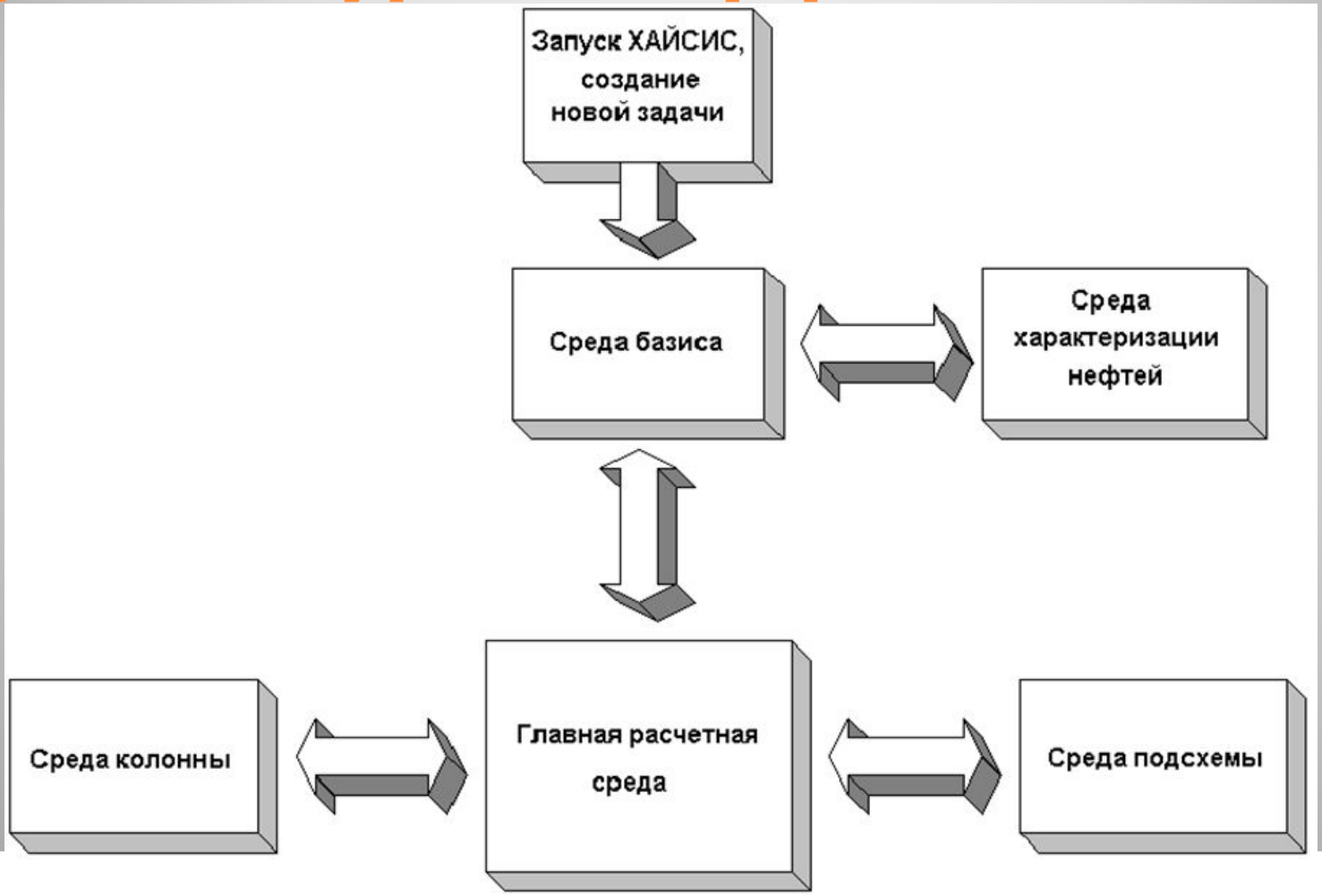
Состав HYSYS

- база данных о физико-химических свойствах 10тыс. различных веществ;
- 27 альтернативных пакетов для расчета физических свойств смесей;
- пакет для описания нефтяных фракций и расчета их свойств;
- методы термодинамических расчетов фазового равновесия в трехфазных системах «пар – легкая жидкость – тяжелая (или водная) жидкость»;
- компьютерные модели ректификационных и абсорбционных колонн, парожидкостных сепараторов, химических реакторов, теплообменников, кипятильников и холодильников, компрессоров, насосов и т.д.;
- средства визуализации схем, графические и текстовые редакторы;

Состав HYSYS

- математические методы и программные средства расчета и оптимизации химико-технологических систем, в том числе, с обратными связями;
- средства формирования отчетов о результатах моделирования;
- средства создания новых компьютерных моделей аппаратов химической технологии;
- средства расширения существующей базы данных о физико-химических свойствах компонентов;
- средства настройки интерфейса системы.

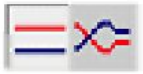
Архитектура интерфейса HYSYS



Функциональные кнопки

Название	Кнопка	Описание
Новая задача		Создает новую задачу
Открыть задачу		Позволяет найти и открыть уже существующую задачу/шаблон/колонну
Запомнить задачу		Записывает на диск текущую активную задачу
PFD		Открывает графический экран текущей схемы
Рабочая тетрадь		Открывает рабочую тетрадь текущей схемы
Навигатор		Осуществляет доступ к навигатору объектов схем
Навигатор схемы		Осуществляет доступ к навигатору схем

Функциональные кнопки

Динамический помощник		Осуществляет доступ к программе помощи при работе в динамическом режиме.
Колонна		Открывает специализированное окно колонны
Стационарный/ динамический		Осуществляет переключение между стационарным и динамическим режимами работы
Активный Ожидание Пуск/Останов (стационарный режим)		В главной среде: осуществляет переключение между активным режимом и режимом ожидания. Зеленый (левый) – активный. В среде колонны: производит пуск/остановку расчета колонны. Зеленый (левый) – пуск.
Интегратор (динамический режим)		Осуществляет запуск и остановку интегратора – расчётной программы динамического режима. Зеленый (левый) – пуск.
Базис		Вход в среду базиса.
Родительская схема		Осуществляет возврат из подсхемы в родительскую схему, например, из подсхемы колонны в главную схему.
Среда нефтяного пакета		Осуществляет вход в среду нефтяного пакета из среды базиса.
Выход из среды		Если Вы находитесь в нефтяном пакете – возврат в среду базиса, если в среде базиса – возврат в основную среду.

Работа с Диспетчером базиса

Диспетчер, или **среда базиса** это самая первая часть интерфейса Hysys В этой среде необходимо описать химические вещества, их превращения и термодинамику моделируемой системы

Основные вкладки среды базиса

основные вкладки среды базиса их функции.

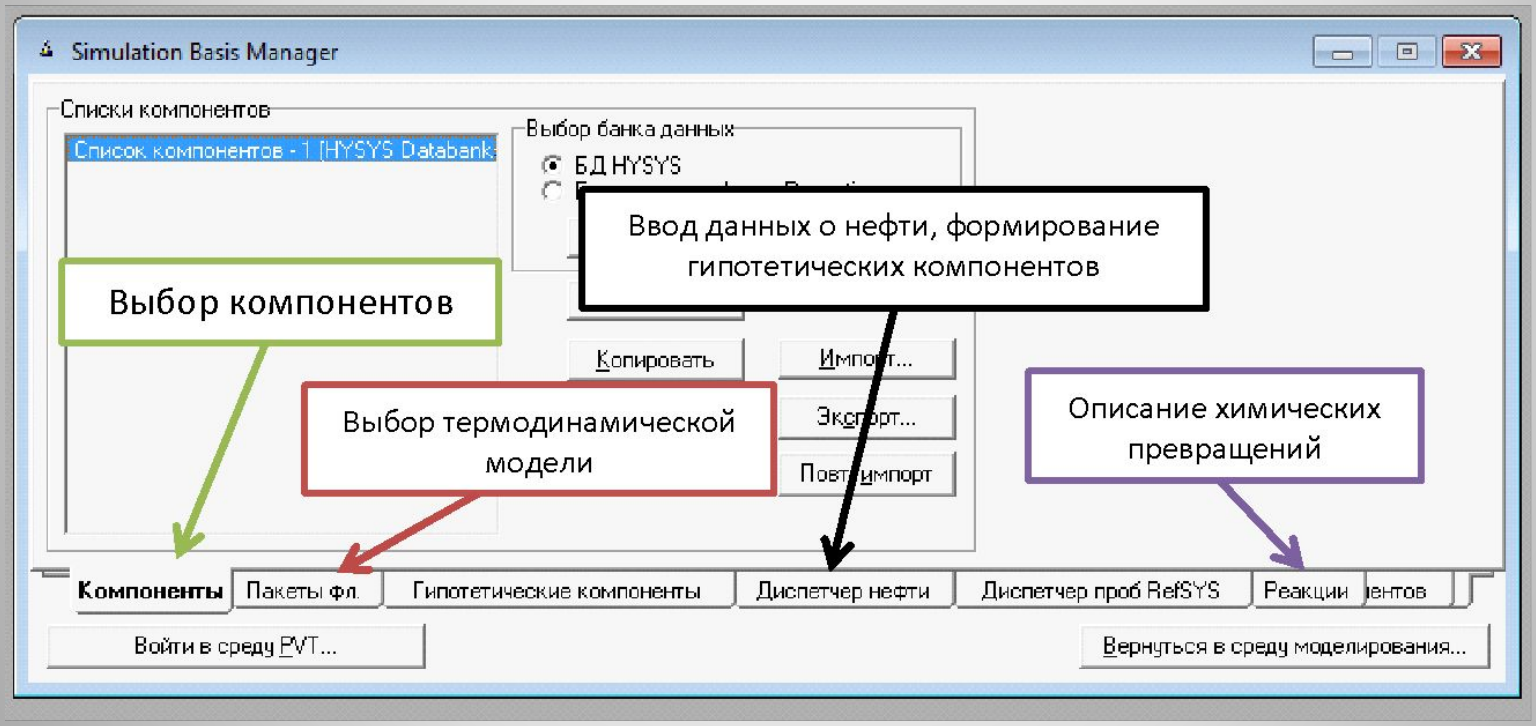
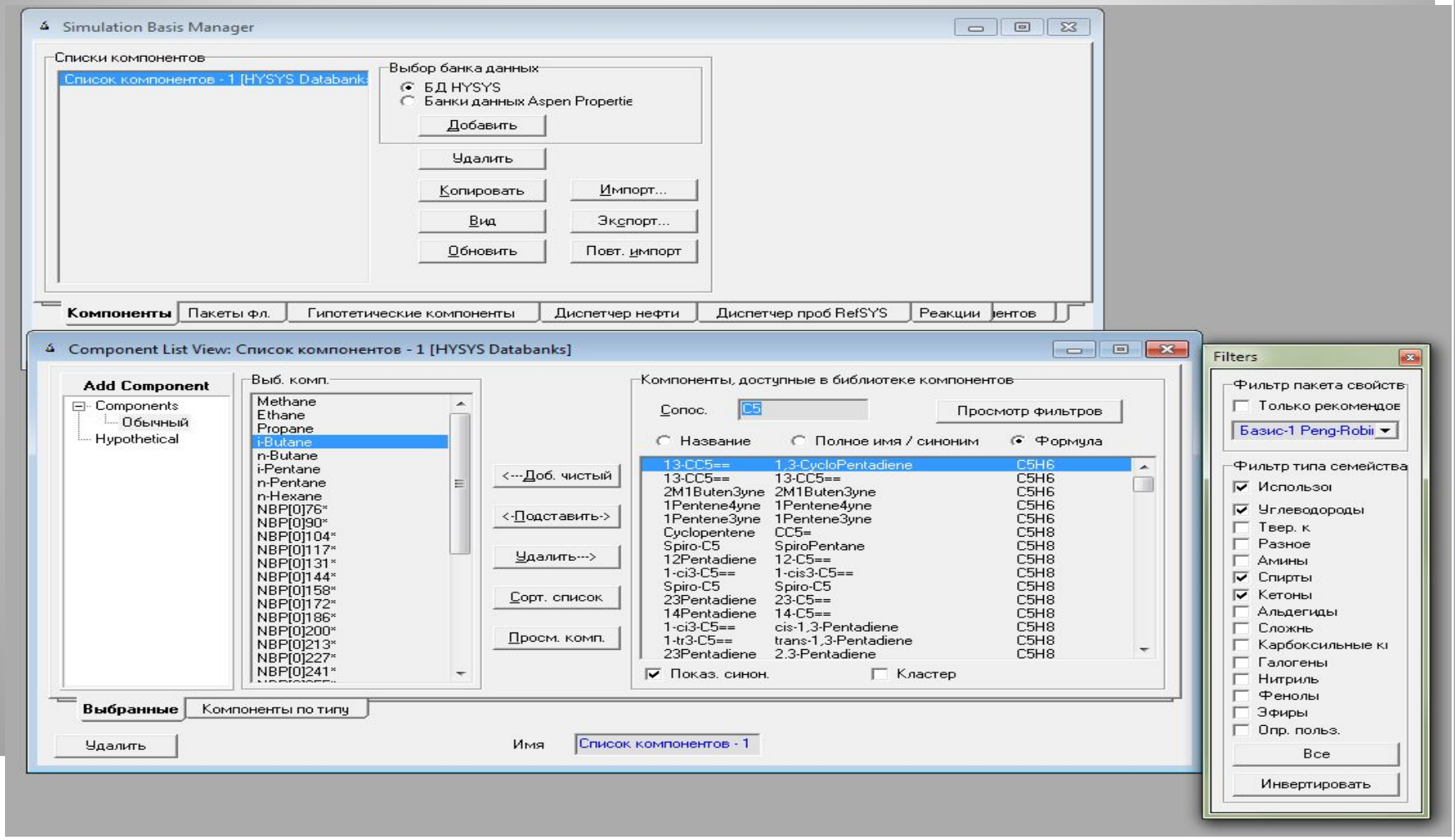
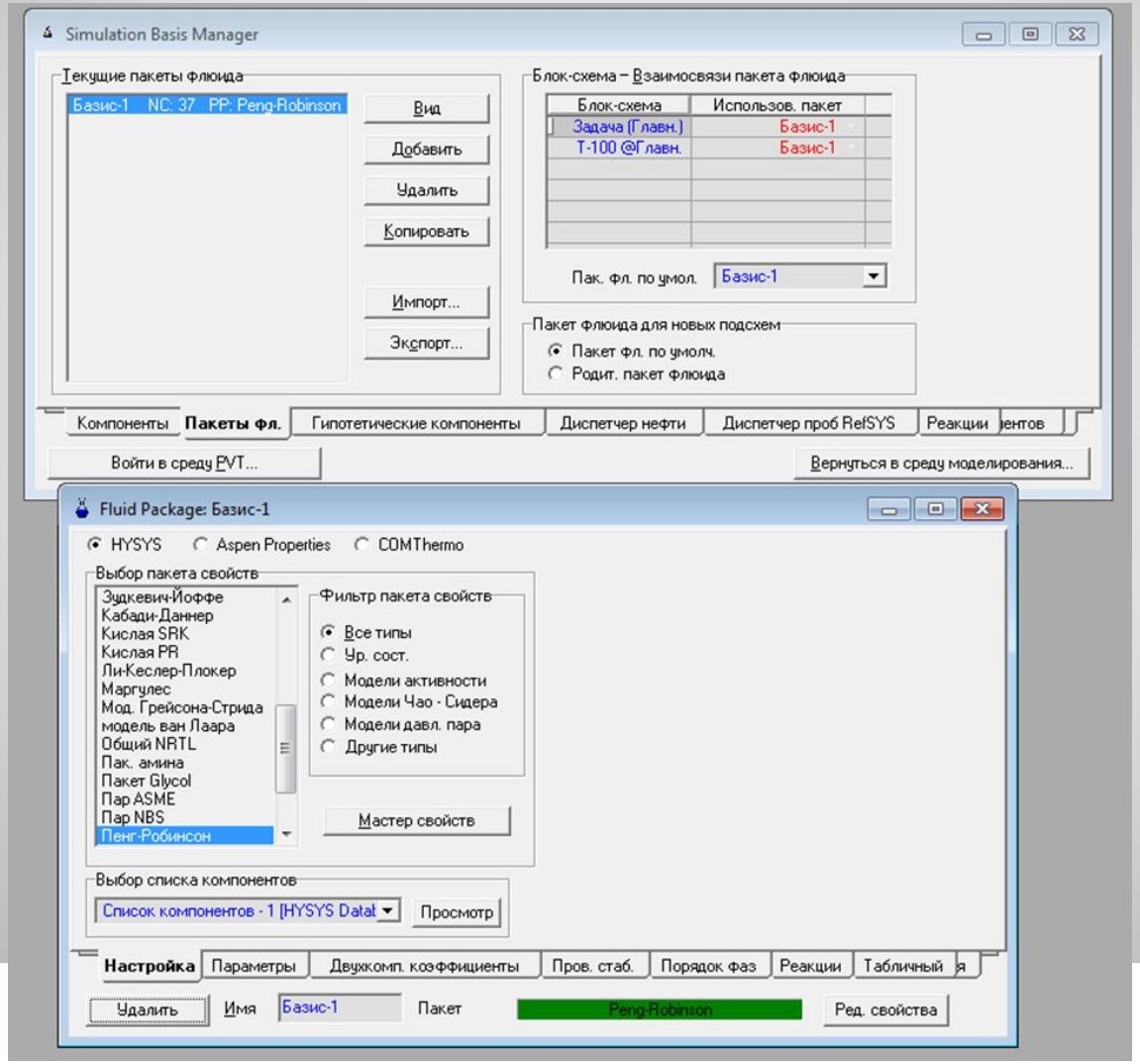


Рисунок 1 - Среда базиса: Основные задачи.

Выбор компонентов

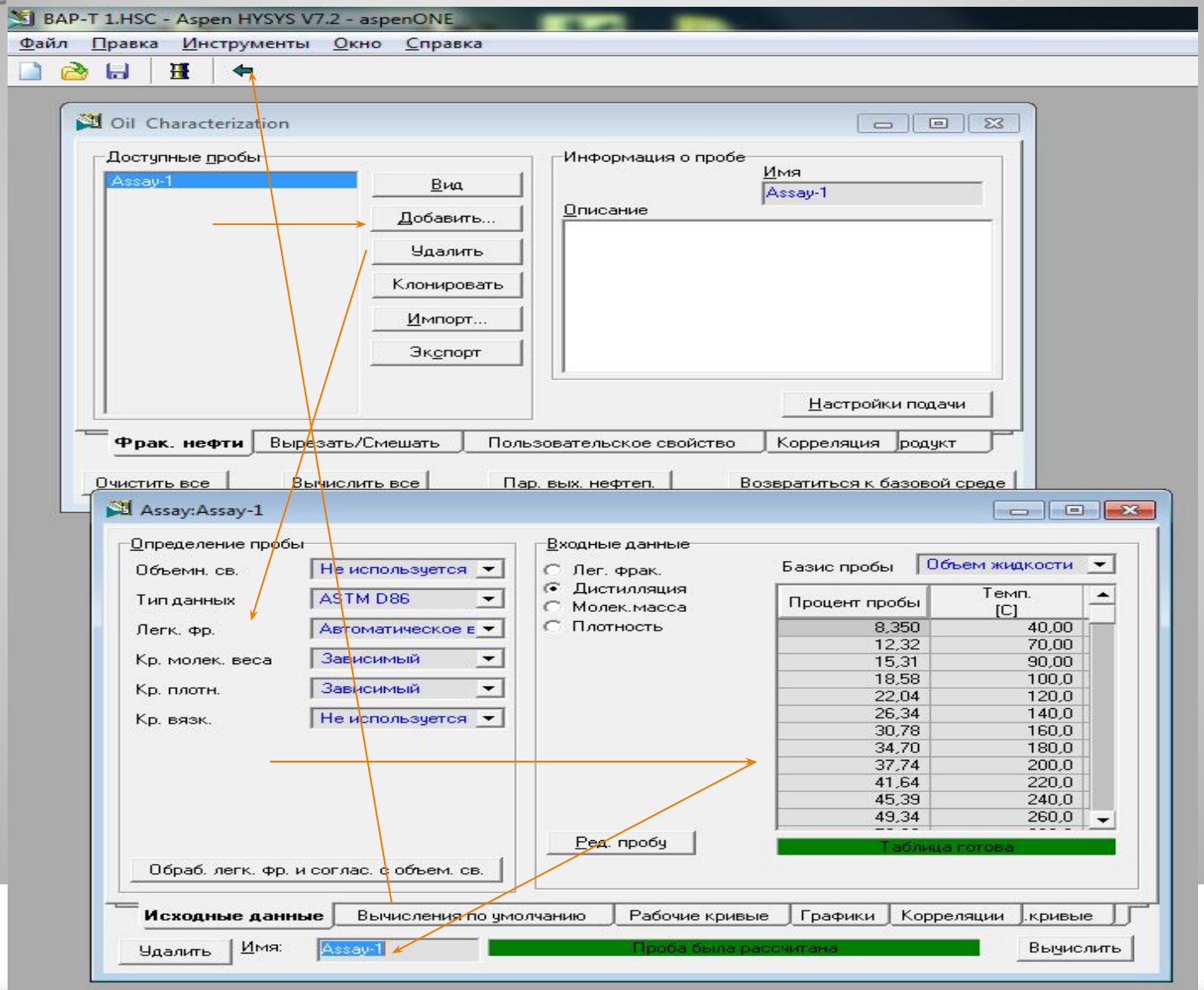


Термодинамическая модель



Диспетчер нефти

Только после выбора термодинамического пакета!



Создание и расчёт технологической схемы

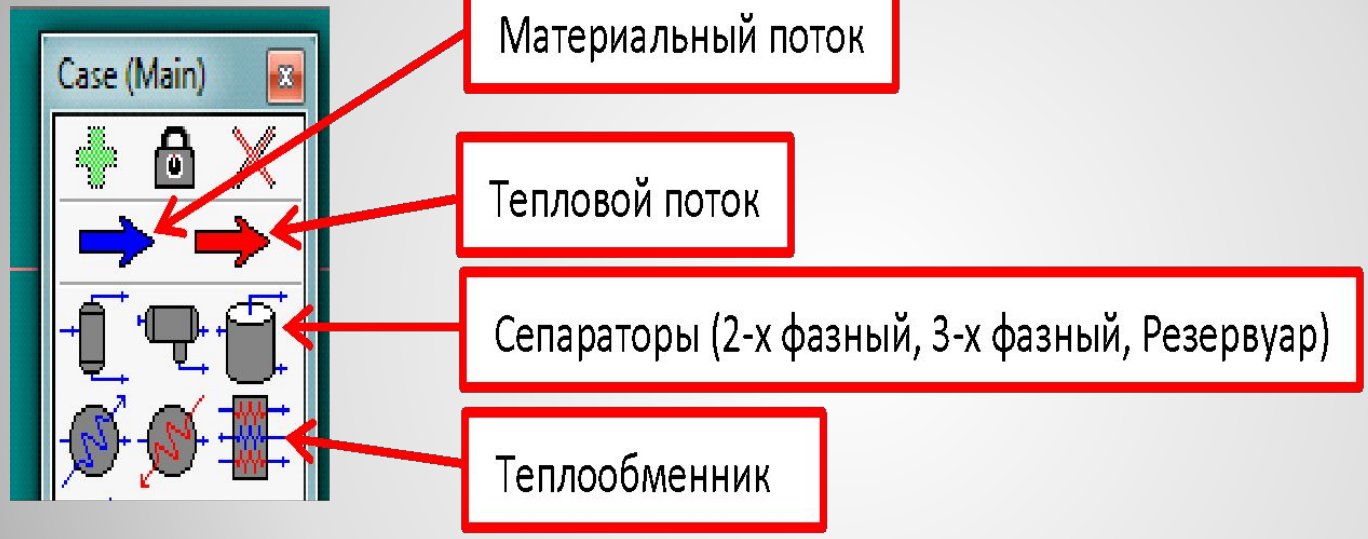
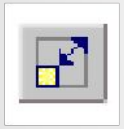
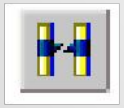
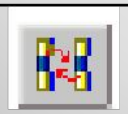
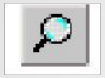


Рисунок 1 – Часть инструментария PFD

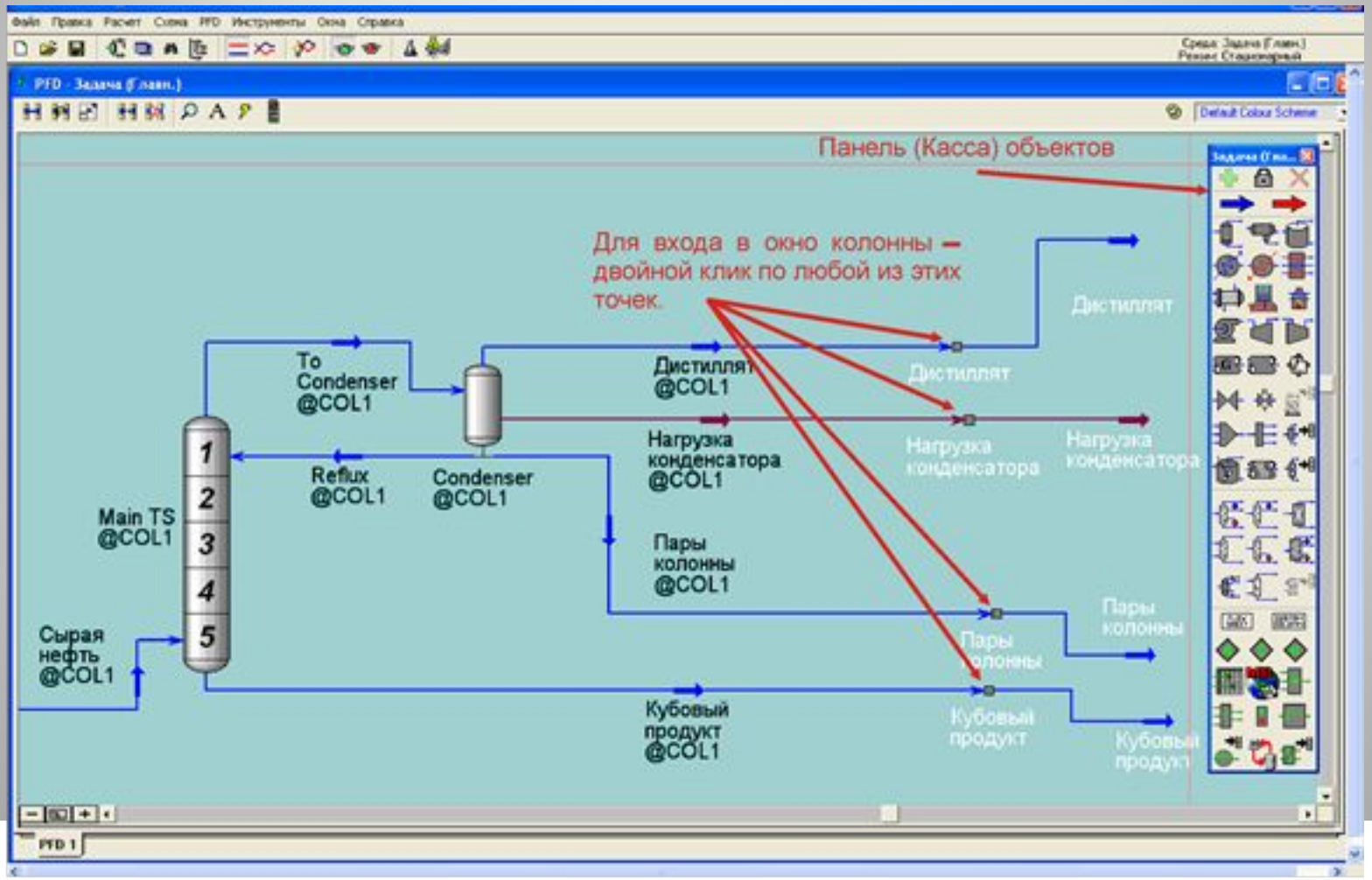
Функциональные кнопки

Название кнопки	Кнопка	Функция
Перемещение/ Соединение (Move/Attach)		Эта кнопка управляет двумя режимами графического интерфейса. Режим Перемещение (Move), заданный по умолчанию, позволяет перемещать операторы и потоки. Когда эта кнопка нажата, Вы находитесь в режиме Соединение (Attach), который позволяет соединять потоки и операции.
Размеры (Size)		В этом режиме Вы можете изменять размеры выбранного объекта. Этот объект оказывается окруженным рамкой, которая, в свою очередь, имеет по периметру восемь небольших белых прямоугольников. С помощью мыши можно перемещать эти прямоугольники по соответствующим направлениям, меняя тем самым размеры объекта.
Разрыв соединения (Break Connections)		Когда эта кнопка нажата, Вы можете разорвать соединение между потоком и операцией. При нажатой кнопке курсор мыши меняет форму. С помощью левой кнопки выберите любой участок потока между изображением потока и изображением операции, и соответствующее соединение окажется разорванным.
Переключение соединения (Swap Connections)		Если два потока подсоединены к штуцерам одного оператора, то они меняются местами.

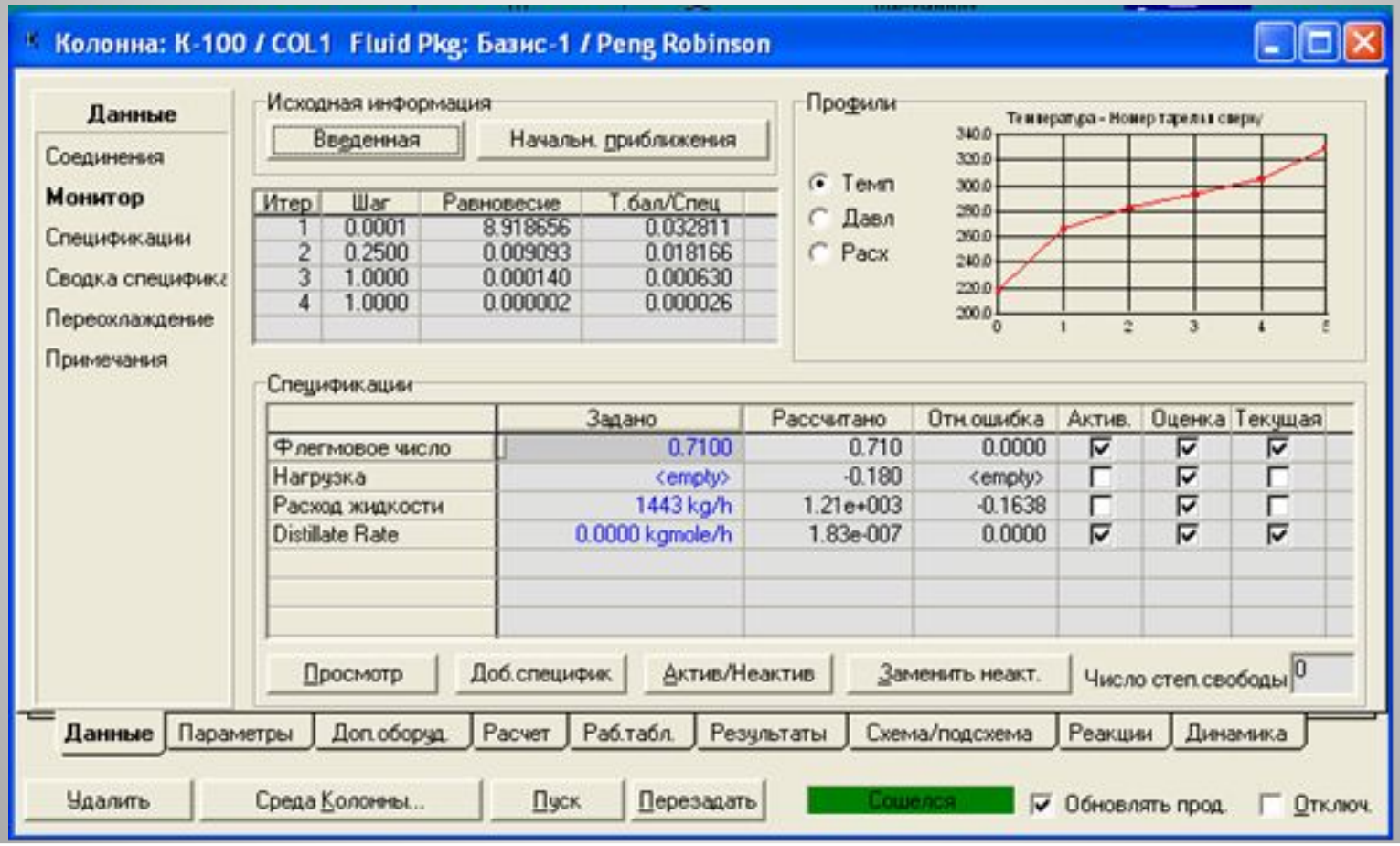
Функциональные кнопки

Увеличительное стекло (Drag Zoom)		При нажатии этой кнопки курсор принимает форму увеличительного стекла. Удерживая левую кнопку мыши, очертите ту часть схемы, масштаб которой предполагается изменить. Для изменения масштаба можно воспользоваться также инспекцией экрана PFD: выберите Режим (Mode) и затем – Масштаб (Zoom), либо выбрать пункт меню PFD – Увеличительное стекло (Drag Zoom).
Добавить описание (Add Text Annotation)		Эта кнопка позволяет добавить текстовое описание к графическому изображению схемы. Когда кнопка нажата, курсор изменяет свой вид и появляется прямоугольная рамка. Установите рамку на тот участок, где должен быть помещен текст, нажмите левую кнопку мыши и впечатайте необходимый текст в появившееся диалоговое окно.
Схема цветов (Colour Scheme)		С помощью этой кнопки выбирается схема цветов графического экрана.
Ускоренная маршрутизация (Quick Route)		Этот режим позволяет быстро переносить изображения операций схемы вместе с соединенными потоками. При этом соединительные линии могут накладываться на изображения операций. При отключении кнопки схема будет автоматически перерисована таким образом, что линии не будут накладываться на картинки.
Панель объектов (Каса объектов)		Панель объектов содержит всевозможные объекты технологической схемы. При нажатии этой кнопки отображается/скрывается панель объектов.

Колонна фракционирования нефти



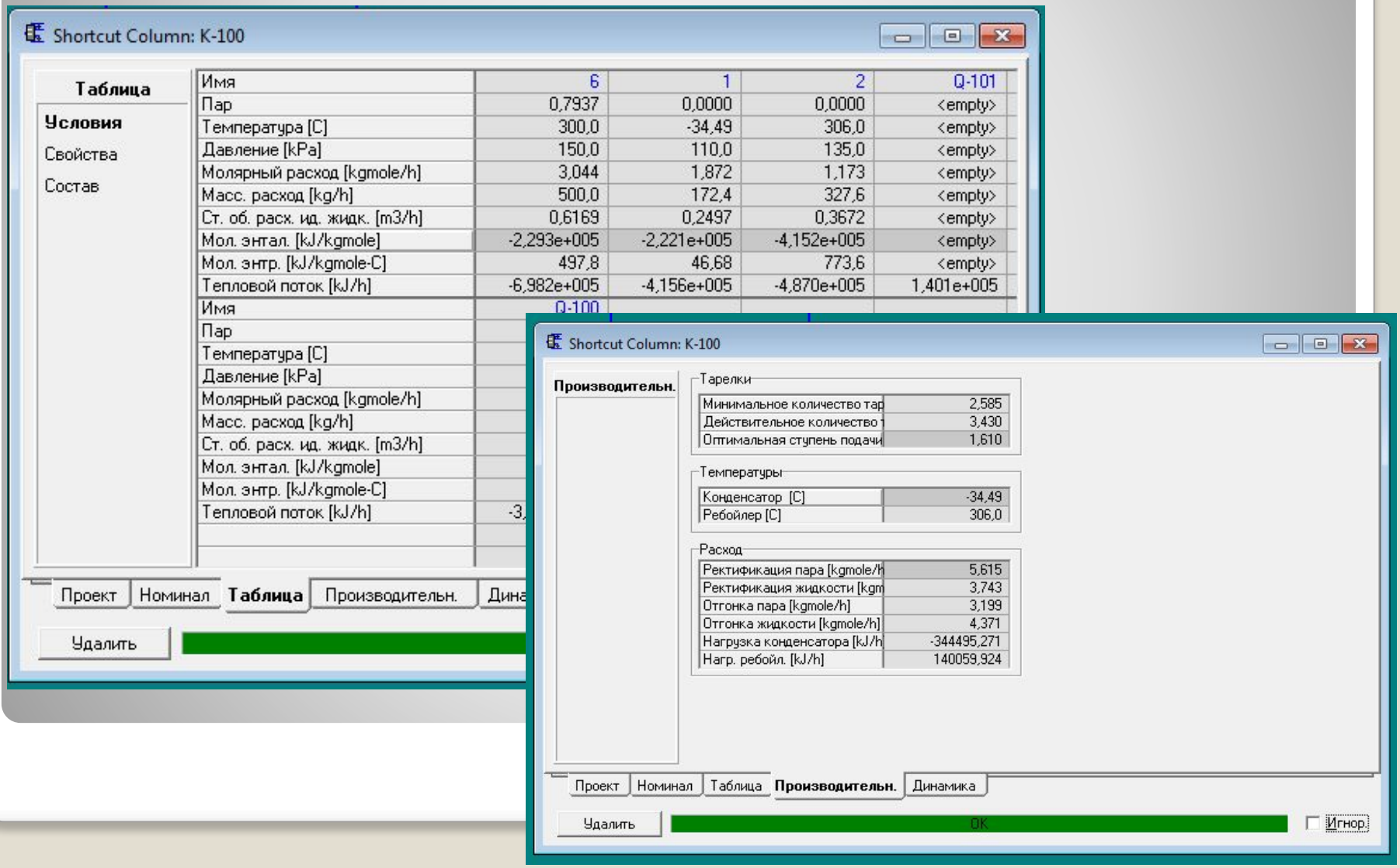
Окно колонны



Вывод результатов

- Первый способ – просмотр результатов в окне объекта. Необходимо провести поиск интересующих результатов во вкладках окна интересующего объекта. Способ подходит, если объём требуемых результатов не очень большой.
- Второй способ - создание отчётов. Находим в меню **«Инструменты»** → **«Отчёты»**. Кликаем кнопку «**Создать**» и «**Добавить таблицу**»

Вывод результатов



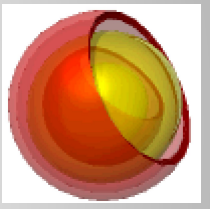
Открытые программные продукты

- **CAPE-OPEN to CAPE-OPEN simulator (COCO)** – это свободная операционная среда для моделирования стационарных режимов, состоящая из сред структуры ХТС, термодинамической среды, пакетов элементов ХТС и ещё ряда инструментов.
- Download COCO: http://www.cocosimulator.org/

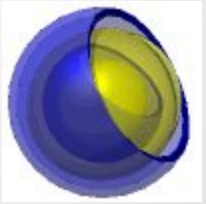
Состав COCO

- Среда моделирования

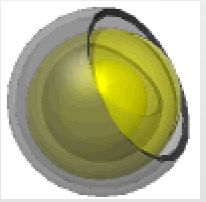
- Пакет термодинамических свойств



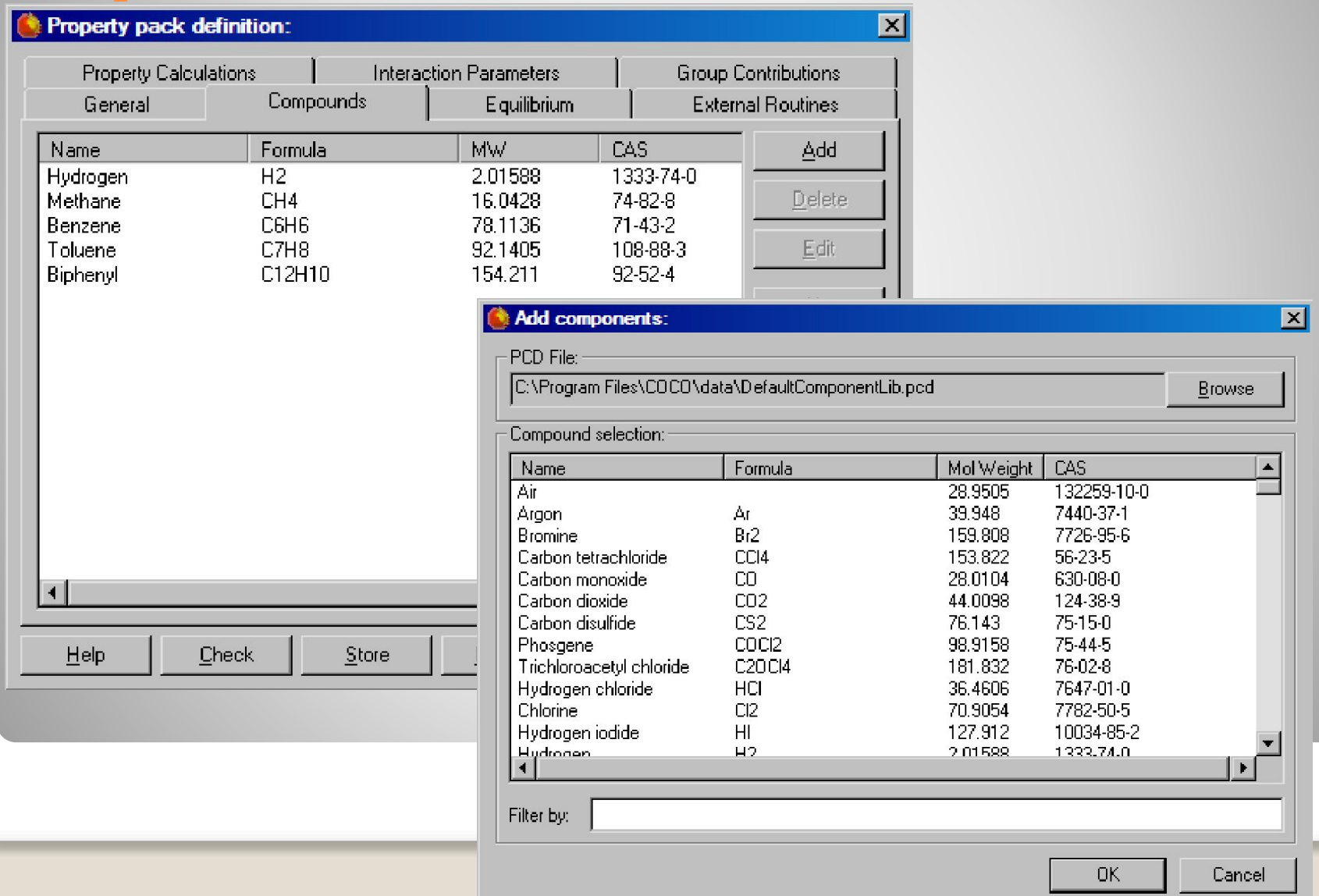
- Набор аппаратов



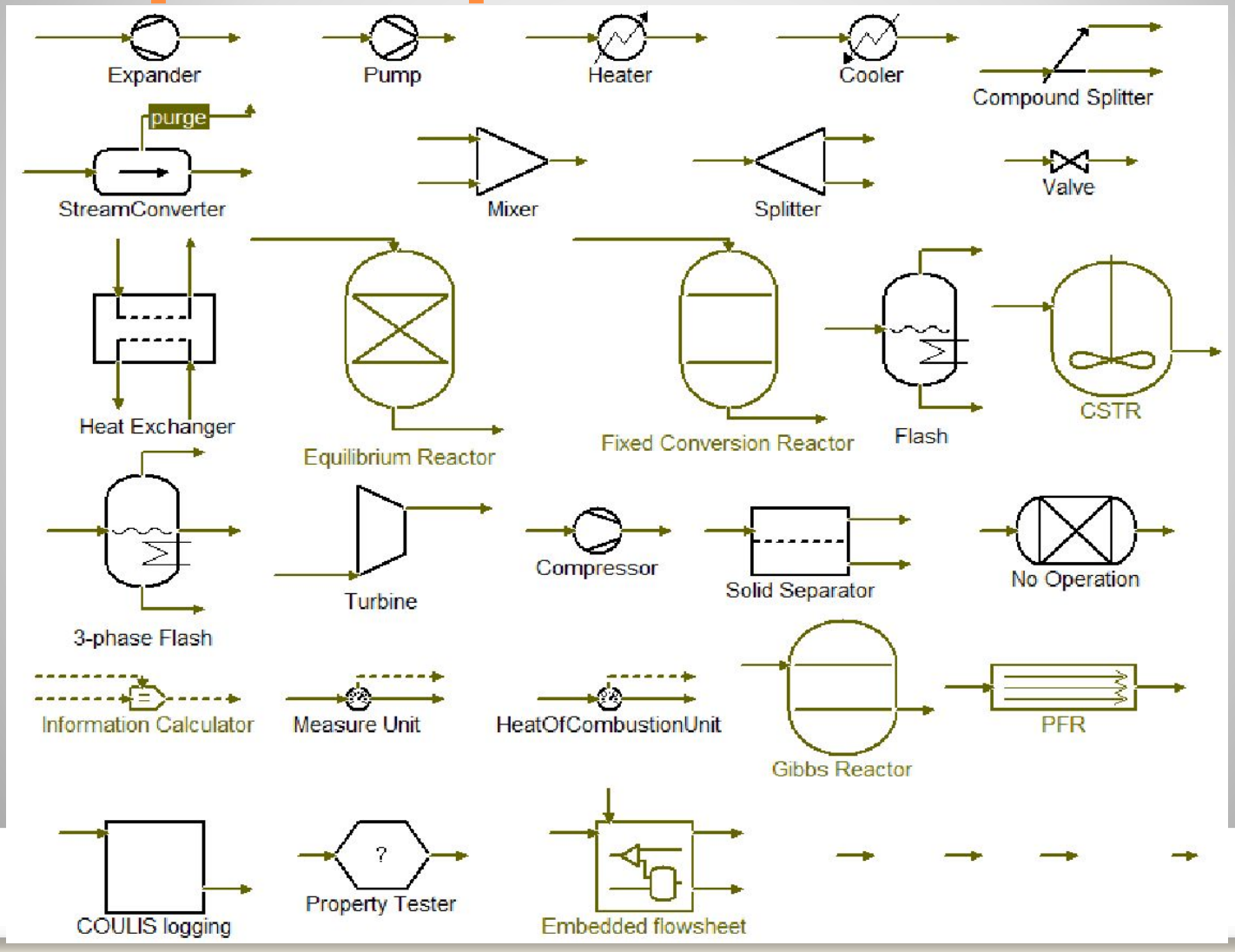
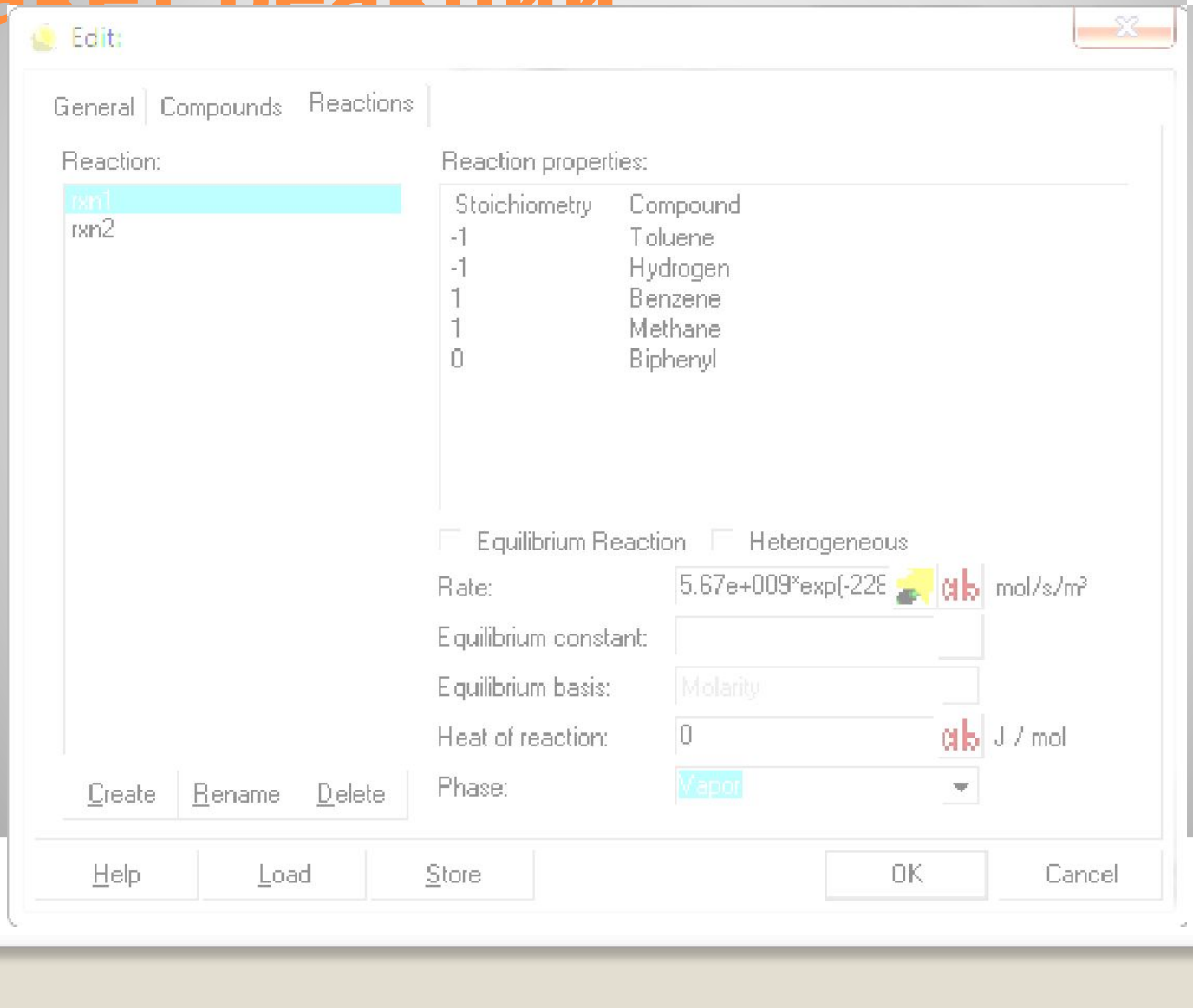
- Пакет реакций



Термодинамический пакет



Набор аппаратов



Пакет реакций