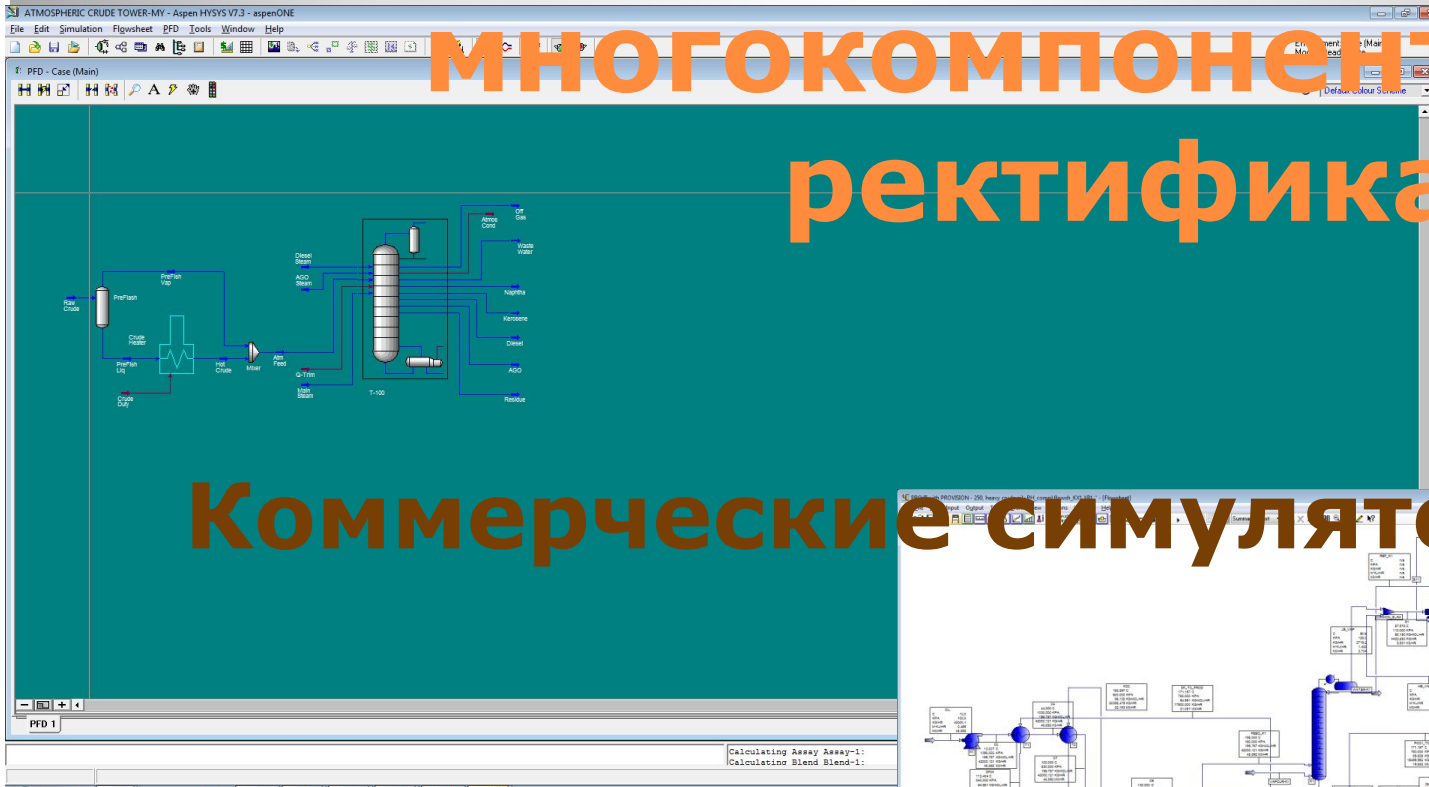
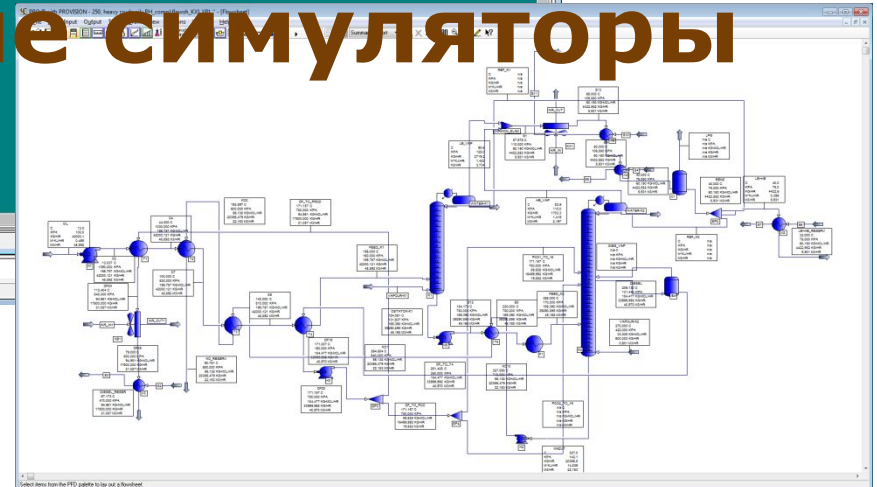


# Математическое моделирование многокомпонентной ректификации



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/](http://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



mix1.hsc



pump.hsc



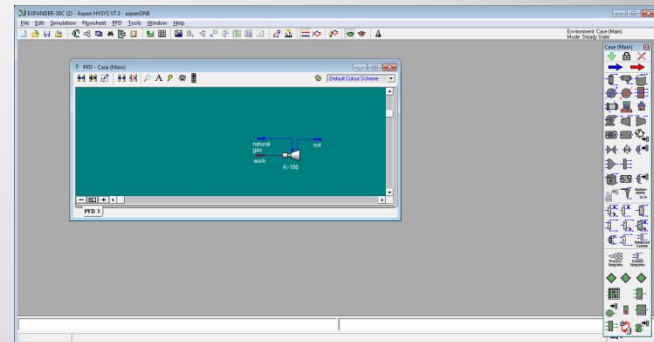
EOS PR.hsc



expander.hsc



expander-30C.hsc



# Состав HYSYS

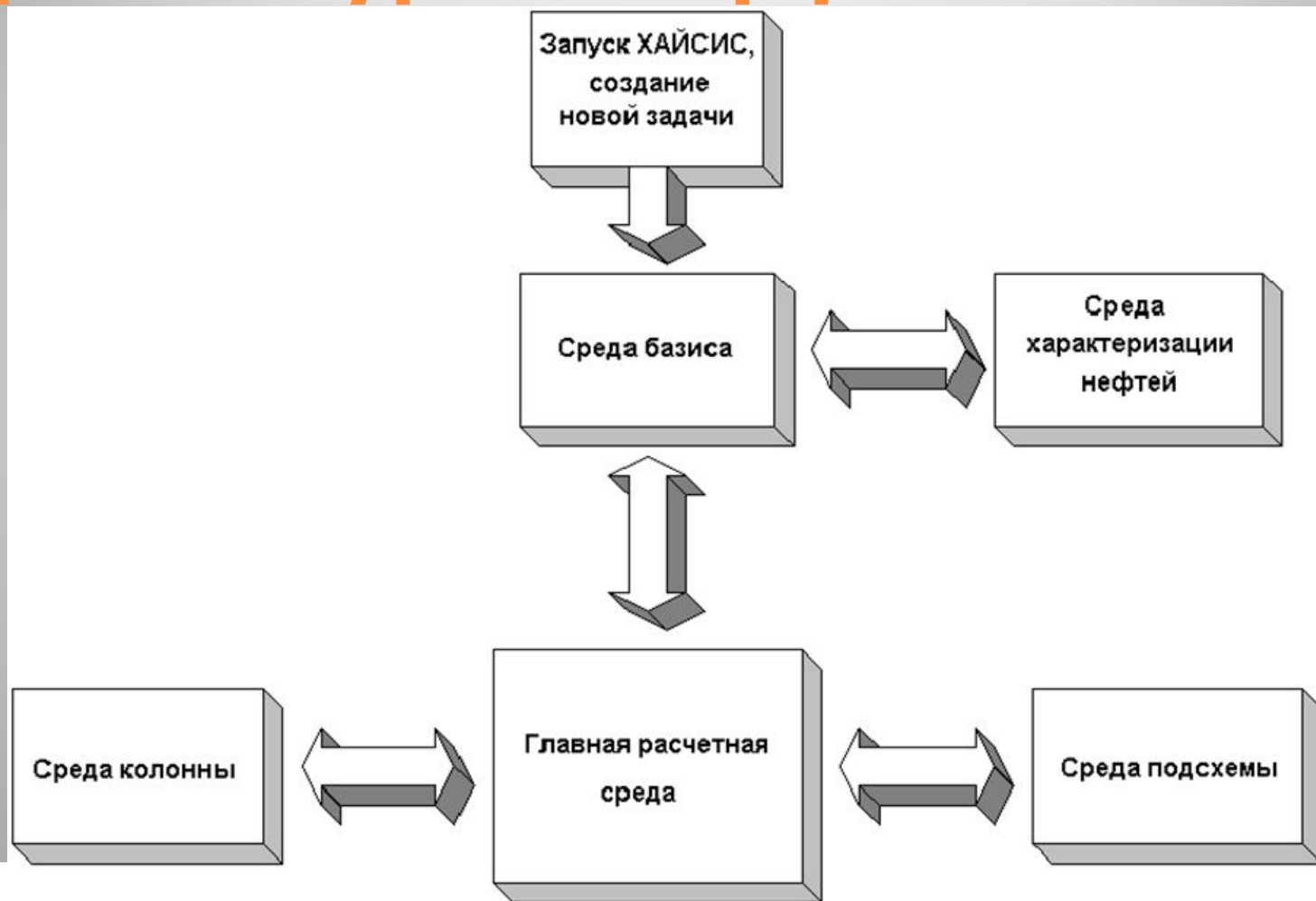
- база данных о физико-химических свойствах 10тыс. различных веществ;
- 27 альтернативных пакетов для расчета физических свойств смесей;
- пакет для описания нефтяных фракций и расчета их свойств;
- методы термодинамических расчетов фазового равновесия в трехфазных системах «пар – легкая жидкость – тяжелая (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.

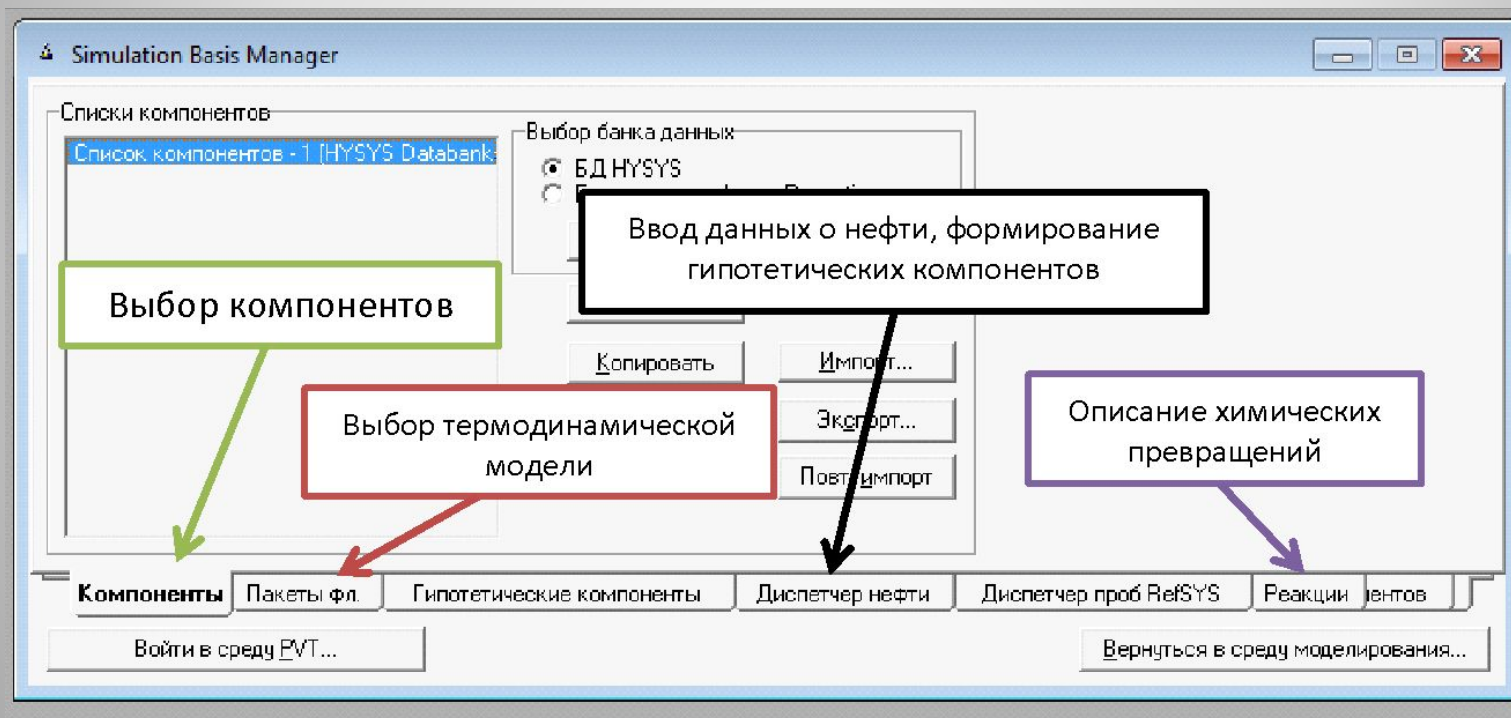
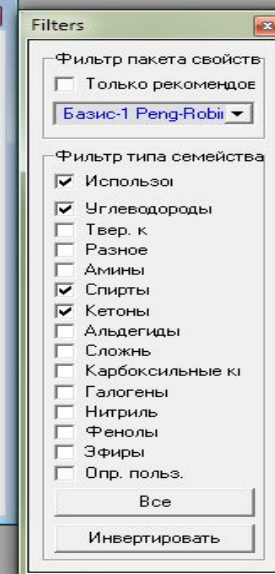
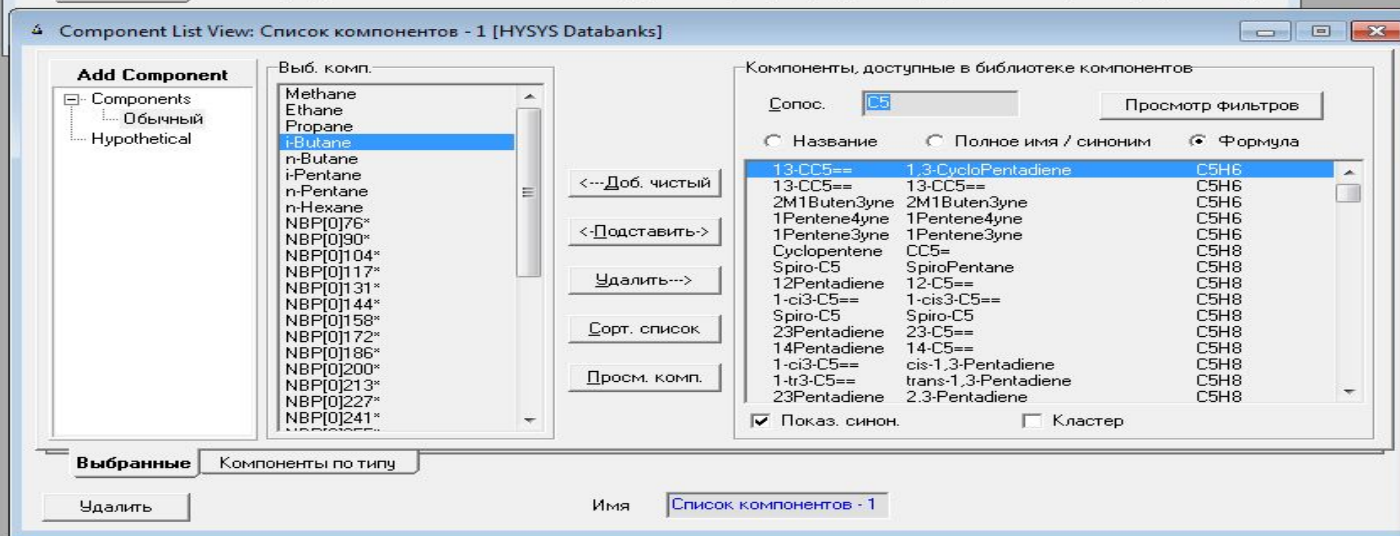
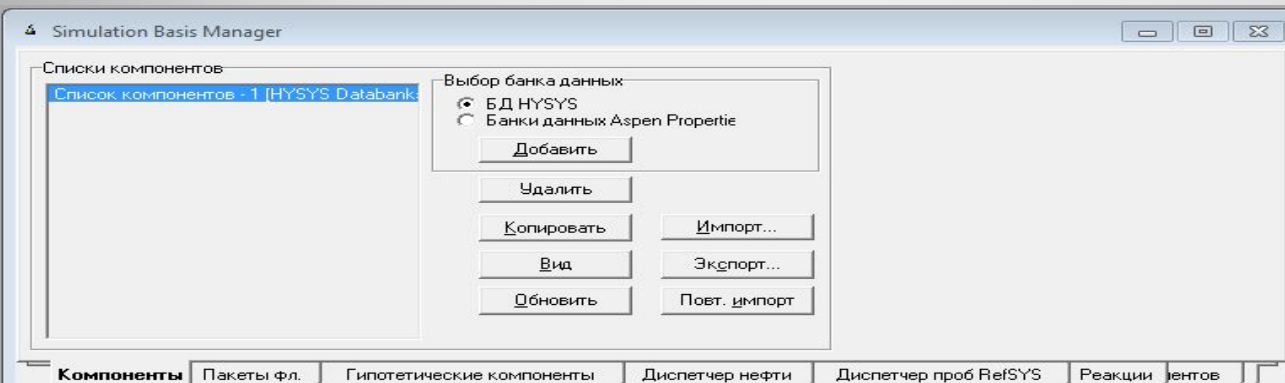


Рисунок 1 - Среда базиса: Основные задачи.

# Выбор компонентов



# Термодинамическая модель

The image shows two overlapping windows from a simulation software interface. The top window is titled "Simulation Basis Manager" and the bottom window is titled "Fluid Package: Базис-1".

**Simulation Basis Manager**

Текущие пакеты флюида

- Базис-1 NC: 37 PP: Peng-Robinson

Вид  
Добавить  
Удалить  
Копировать  
Импорт...  
Экспорт...

Блок-схема – Взаимосвязи пакета флюида

Блок-схема	Используй. пакет
Задача (Главн.)	Базис-1
T-100 @Главн.	Базис-1

Пак. фл. по умол. Базис-1

Пакет флюида для новых подсхем

- Пакет фл. по умол.
- Родит. пакет флюида

Компоненты **Пакеты фл.** Гипотетические компоненты Диспетчер нефти Диспетчер проб RefSYS Реакции Рентген

Войти в среду EVT... Вернуться в среду моделирования...

**Fluid Package: Базис-1**

HYSYS  Aspen Properties  COMThermo

Выбор пакета свойств

- Зудкевич-Иоффе
- Кабати-Даннер
- Кислая SRK
- Кислая PR
- Ли-Кеслер-Плокер
- Маргулес
- Мод. Грейсона-Стрида
- модель ван Лаара
- Общий NRTL
- Пак. амина
- Пакет GUSOL
- Пар ASME
- Пар NBS
- Пенг-Робинсон

Фильтр пакета свойств

- Все типы
- Ур. сост.
- Модели активности
- Модели Чао - Сидера
- Модели давл. пара
- Другие типы

Мастер свойств

Выбор списка компонентов

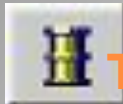
Список компонентов - 1 [HYSYS Data] Просмотр

Настройка Параметры Двухкомп. коэффициенты Пров. стаб. Порядок фаз Реакции Табличный я

Удалить Имя Базис-1 Пакет Peng-Robinson Ред. свойства

# Диспетчер нефти

Только после выбора термодинамического пакета!



ВАР-T 1.HSC - Aspen HYSYS V7.2 - aspenONE

Файл Правка Инструменты Окно Справка

Oil Characterization

Доступные пробы

Assay-1

Вид  
Добавить...  
Удалить  
Клонировать  
Импорт...  
Экспорт

Информация о пробе

Имя  
Assay-1

Описание

Настройки подачи

Фрак. нефти Вырезать/Смешать Пользовательское свойство Корреляция продукт

Очистить все Вычислить все Пар. вых. нефтеп. Возвратиться к базовой среде

Assay: Assay-1

Определение пробы

Объемн. св. Не используется  
Тип данных ASTM D86  
Легк. фр. Автоматическое ε  
Кр. молек. веса Зависимый  
Кр. плотн. Зависимый  
Кр. вязк. Не используется

Обрат. легк. фр. и соглас. с объем. св.

Входные данные

Лег. фрак.  
 Дистилляция  
 Молек. масса  
 Плотность

Базис пробы Объем жидкости

Процент пробы	Темп. [C]
8,350	40,00
12,32	70,00
15,31	90,00
18,58	100,0
22,04	120,0
26,34	140,0
30,78	160,0
34,70	180,0
37,74	200,0
41,64	220,0
45,39	240,0
49,34	260,0

Ред. пробу

Таблица готова

Исходные данные

Вычисления по умолчанию Рабочие кривые Графики Корреляции кривые

Удалить Имя: Assay-1 Проба была рассчитана Вычислить





# Создание и расчёт технологической схемы

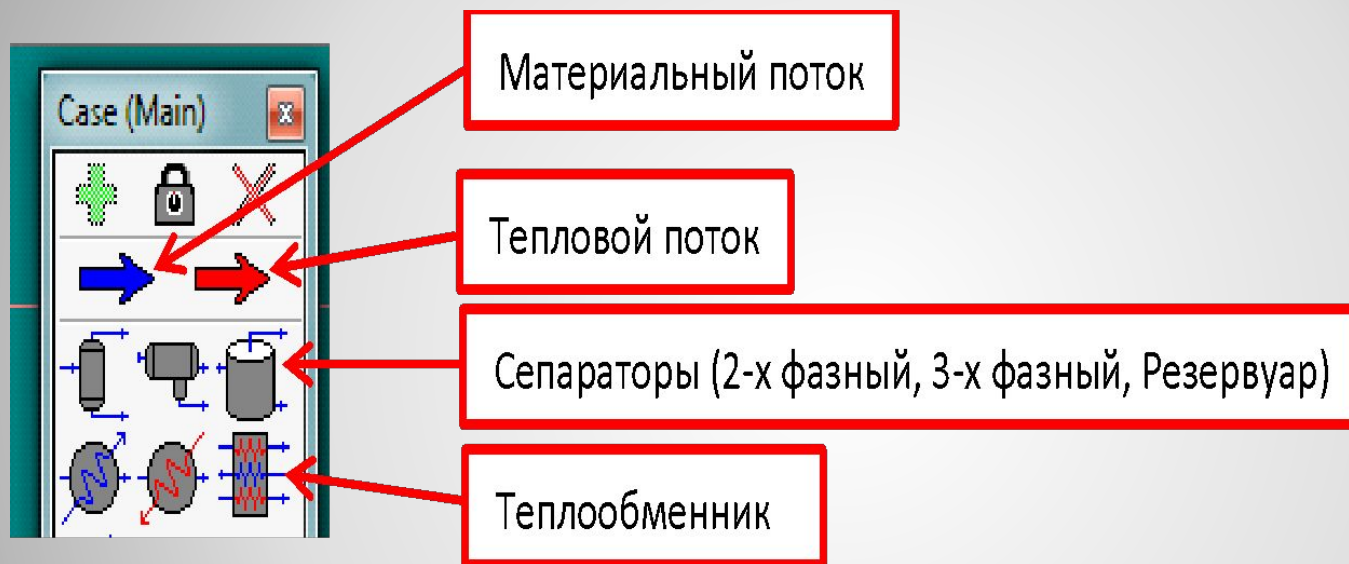

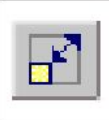

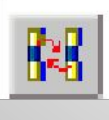


Рисунок 1 – Часть инструментария PFD

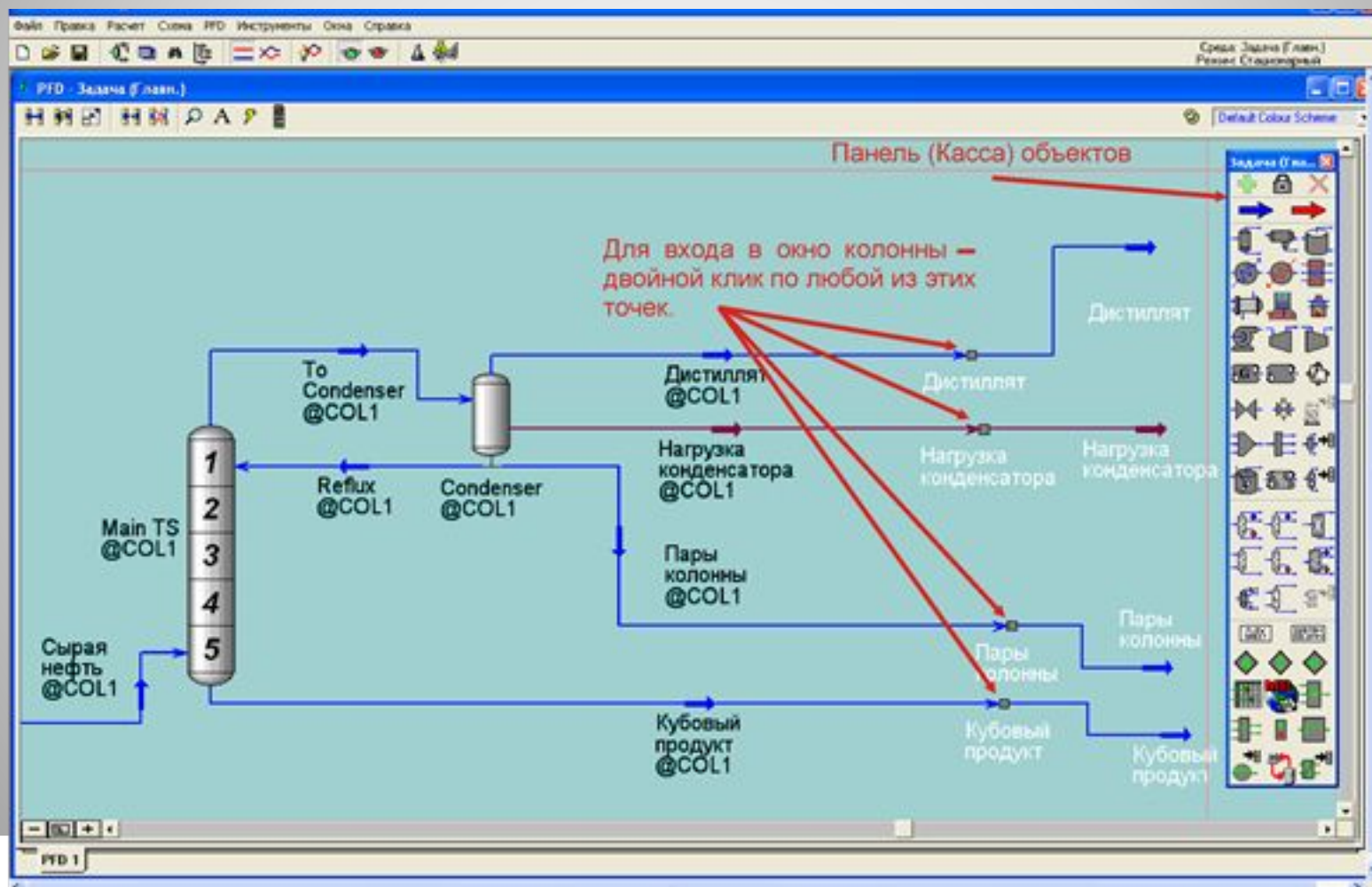
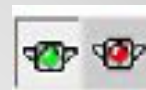
# Функциональные кнопки

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 картинку.
Панель объектов (Каса объектов)		Панель объектов содержит всевозможные объекты технологической схемы. При нажатии этой кнопки отображается/скрывается панель объектов.

# Колонна фракционирования нефти



# Окно колонны

Колонна: K-100 / COL1 Fluid Pkg: Базис-1 / Peng Robinson

**Данные**

Соединения

**Монитор**

Спецификации

Сводка спецификац

Переохлаждение

Примечания

Исходная информация

Итер	Шаг	Равновесие	T.бал/Спец
1	0.0001	8.918656	0.032811
2	0.2500	0.009093	0.018166
3	1.0000	0.000140	0.000630
4	1.0000	0.000002	0.000026

Спецификации

	Задано	Рассчитано	Отн.ошибка	Актив.	Оценка	Текущая
Флегмовое число	0.7100	0.710	0.0000	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
Нагрузка	<empty>	-0.180	<empty>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Расход жидкости	1443 kg/h	1.21e+003	-0.1638	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Distillate Rate	0.0000 kgmole/h	1.83e-007	0.0000	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>

Число степ.свободы

Профили

Темп

Давл

Раск

Температура - Номер тарелки сверху

**Данные**

Параметры

Доп.оборуд.

Расчет

Раб.табл.

Результаты

Схема/подсхема

Реакции

Динамика

Обновлять прод.  Отключ.

## 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

Shortcut Column: K-100

Имя	6	1	2	Q-101
Пар	0,7937	0,0000	0,0000	<empty>
Температура [C]	300,0	-34,49	306,0	<empty>
Давление [kPa]	150,0	110,0	135,0	<empty>
Молярный расход [kgmole/h]	3,044	1,872	1,173	<empty>
Масс. расход [kg/h]	500,0	172,4	327,6	<empty>
Ст. об. расх. ид. жидк. [m3/h]	0,6169	0,2497	0,3672	<empty>
Мол. энтал. [kJ/kgmole]	-2,293e+005	-2,221e+005	-4,152e+005	<empty>
Мол. энтр. [kJ/kgmole-C]	497,8	46,68	773,6	<empty>
Тепловой поток [kJ/h]	-6,982e+005	-4,156e+005	-4,870e+005	1,401e+005

Имя: Q-100

Пар

Температура [C]

Давление [kPa]

Молярный расход [kgmole/h]

Масс. расход [kg/h]

Ст. об. расх. ид. жидк. [m3/h]

Мол. энтал. [kJ/kgmole]

Мол. энтр. [kJ/kgmole-C]

Тепловой поток [kJ/h]

Удалить

Shortcut Column: K-100

Производительн.

Тарелки

Минимальное количество тар	2,585
Действительное количество	3,430
Оптимальная ступень подачи	1,610

Температуры

Конденсатор [C]	-34,49
Ребойлер [C]	306,0

Расход

Ректификация пара [kgmole/h]	5,615
Ректификация жидкости [kgm	3,743
Отгонка пара [kgmole/h]	3,199
Отгонка жидкости [kgmole/h]	4,371
Нагрузка конденсатора [kJ/h]	-344495,271
Нагр. ребойл. [kJ/h]	140059,924

Удалить

OK

Игнор.

# 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/>

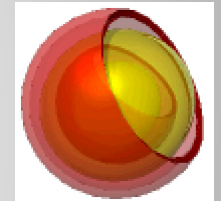


# Состав СОСО

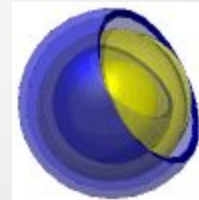
- Среда моделирования



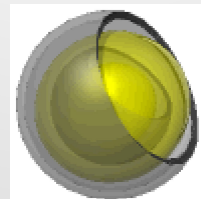
- Пакет термодинамических свойств



- Набор аппаратов



- Пакет реакций



# Термодинамический пакет

Property pack definition:

Property Calculations		Interaction Parameters		Group Contributions	
General		Compounds		External Routines	
Name	Formula	MW	CAS	Add	
Hydrogen	H2	2.01588	1333-74-0	Add	
Methane	CH4	16.0428	74-82-8	Delete	
Benzene	C6H6	78.1136	71-43-2	Edit	
Toluene	C7H8	92.1405	108-88-3		
Biphenyl	C12H10	154.211	92-52-4		

Add components:

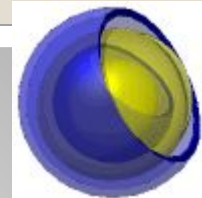
PCD File:  
C:\Program Files\COCO\data\DefaultComponentLib.pcd Browse

Compound selection:

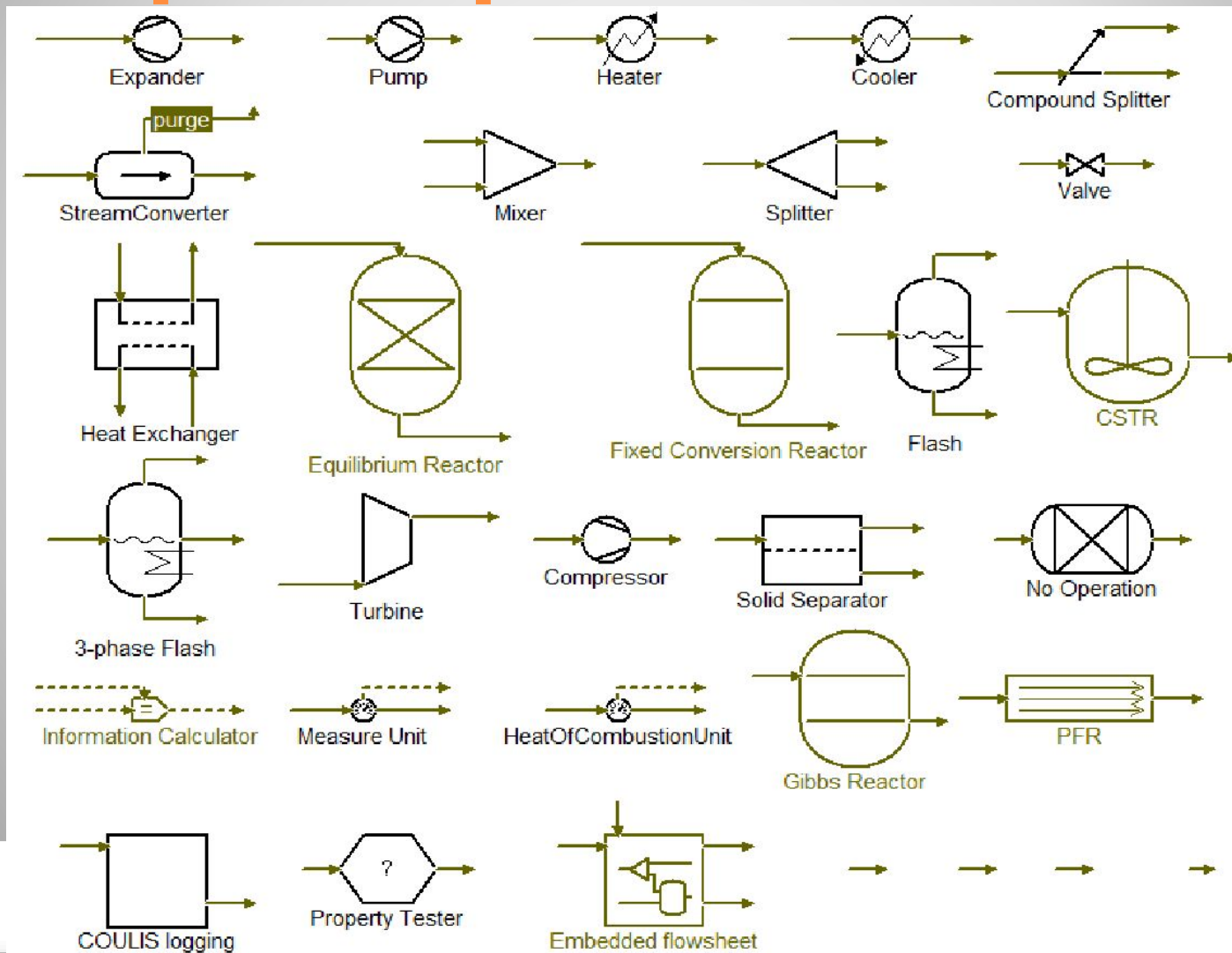
Name	Formula	Mol Weight	CAS
Air		28.9505	132259-10-0
Argon	Ar	39.948	7440-37-1
Bromine	Br2	159.808	7726-95-6
Carbon tetrachloride	CCl4	153.822	56-23-5
Carbon monoxide	CO	28.0104	630-08-0
Carbon dioxide	CO2	44.0098	124-38-9
Carbon disulfide	CS2	76.143	75-15-0
Phosgene	COCl2	98.9158	75-44-5
Trichloroacetyl chloride	C2OCl4	181.832	76-02-8
Hydrogen chloride	HCl	36.4606	7647-01-0
Chlorine	Cl2	70.9054	7782-50-5
Hydrogen iodide	HI	127.912	10034-85-2
Hydrogen	H2	2.01588	1333-74-0

Filter by:

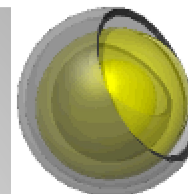
OK Cancel



# Набор аппаратов



# Пакет реакций



Edit

General | Compounds | Reactions

Reaction:

- rxn1
- rxn2

Reaction properties:

Stoichiometry	Compound
-1	Toluene
-1	Hydrogen
1	Benzene
1	Methane
0	Biphenyl

Equilibrium Reaction     Heterogeneous

Rate:  mol/s/m<sup>2</sup>

Equilibrium constant:

Equilibrium basis:

Heat of reaction:  J / mol

Phase:

Create    Rename    Delete

Help    Load    Store    OK    Cancel