

ДИСЦИПЛИНА

- МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
 - ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Кибернетика

```
graph TD; A[Кибернетика] --> B[Предмет системы]; A --> C[Метод математическое моделирование]; A --> D[Стратегия системный анализ]; A --> E[Средство ЭВМ];
```

Предмет
системы

Метод
математическое
моделирование

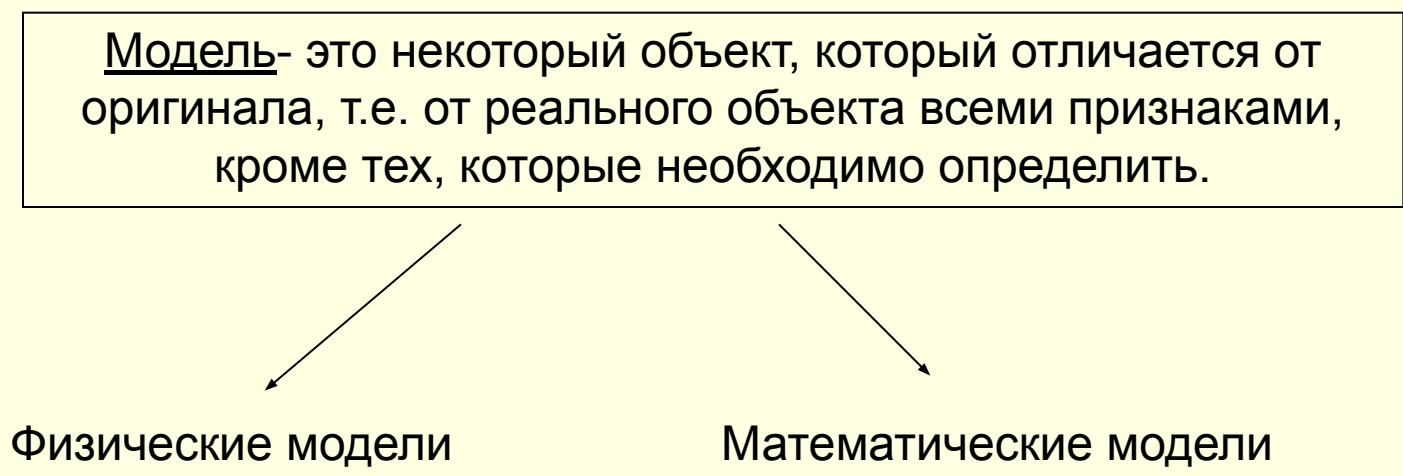
Стратегия
системный
анализ

Средство
ЭВМ

Моделирование- это исследование процессов на моделях с целью предсказания результатов их протекания в аппаратах заданной конструкции любых размеров.

Математическое моделирование- это метод исследования процессов на математических моделях, с целью выдачи рекомендаций об эффективном функционировании данного процесса.

Модель- это некоторый объект, который отличается от оригинала, т.е. от реального объекта всеми признаками, кроме тех, которые необходимо определить.



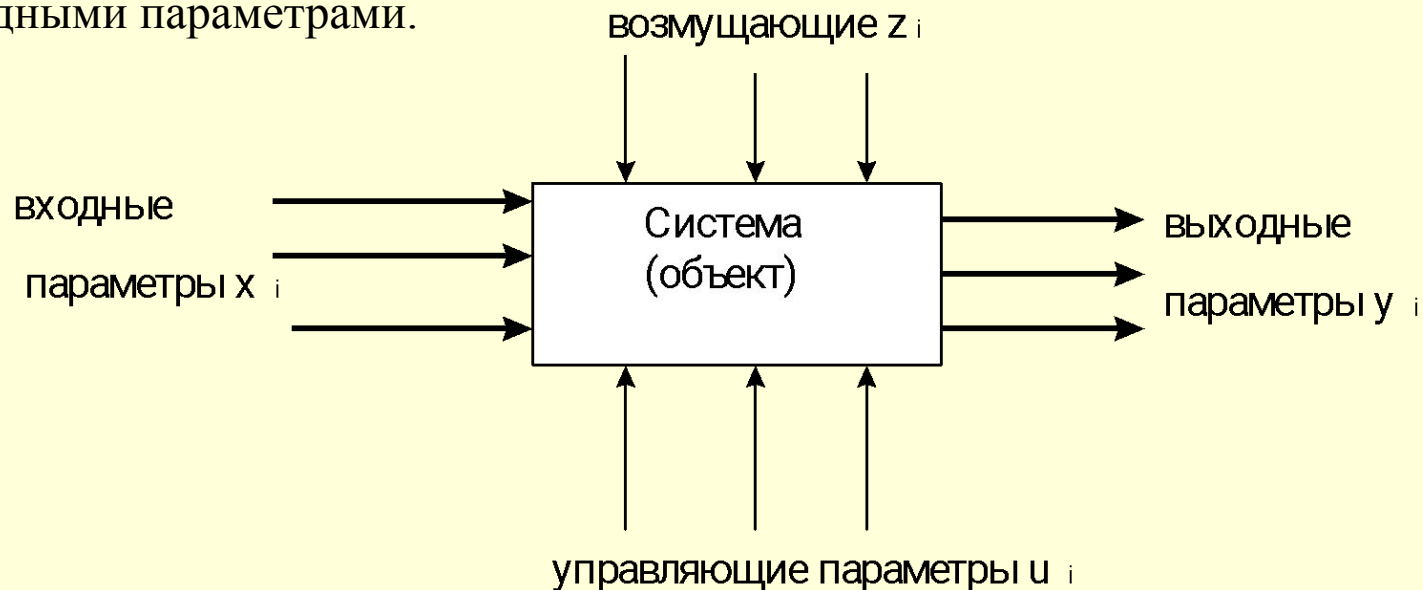
Физические модели

Математические модели

Обычно моделирование процессов данным методом состоит из нескольких этапов:

1. Идентификация объекта, т.е. разработка математического описания.
2. Разработка алгоритма моделирования и выбор решения для данного математического описания.
3. Разработка программы расчёта и выполнение расчётов на ЭВМ.
4. проверка адекватности (соответствия) математической модели на основании экспериментальных данных и адаптация модели к реальным условиям.
5. Интерпретация результатов расчётов и выдача рекомендаций по практической реализации исследуемого процесса.

В целом процесс моделирования сводится к переработке входной информации в выходную и установлению вида математической зависимости между входными и выходными параметрами.



Математические модели

```
graph TD; A[Математические модели] --> B[Статистические]; A --> C[Динамические];
```

Статистические

Динамические

Принципы разработки математических модели

```
graph TD; A[Принципы разработки математических модели] --> B[Системный подход]; A --> C[Эмпирический подход];
```

Системный подход

перемещение веществ
(гидродинамика потоков)
перенос тепла и вещества
(массо- и теплопередача)
химические превращения.

Эмпирический подход

Построение мат. моделей на
Основе эмпирических данных

Основные области применения метода математического моделирования:

Исследование технологических режимов ХТП
Разработка и совершенствование новых технологий
Оптимизация и управление ХТП
Автоматизированное проектирование ХТП
Разработка информационно- моделирующих систем в химической технологии

Моделирование теплообменных аппаратов

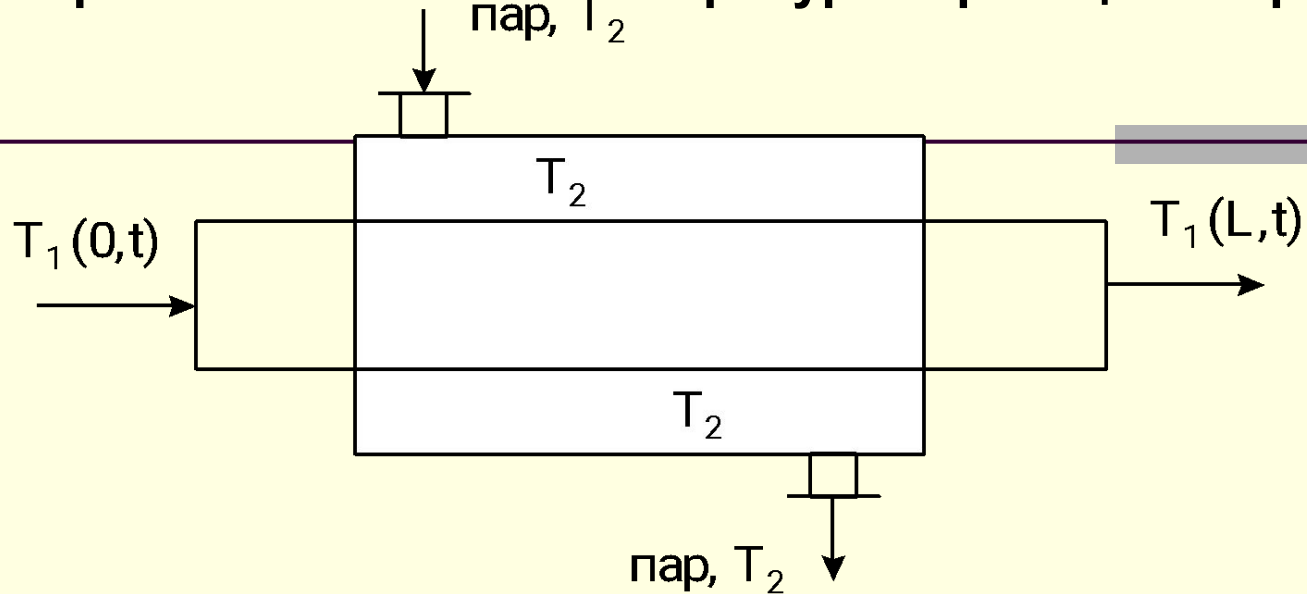
Модель аппарата типа «перемешивание- перемешивание»

$$\begin{cases} \rho_1 C p_1 V_1 \frac{dT_1}{dt} = v_1 \cdot (T_{\text{вх}} - T_1) \cdot \rho_1 \cdot C p_1 - \alpha_1 \cdot F \cdot (T_1 - T_3) \\ \rho_2 C p_2 V_2 \frac{dT_2}{dt} = v_2 \cdot (T_{\text{вх2}} - T_1) \cdot \rho_2 \cdot C p_2 - \alpha_2 \cdot F \cdot (T_3 - T_2) \\ G_3 \cdot C_3 \cdot \frac{dT_3}{dt} = \alpha_1 \cdot F \cdot (T_1 - T_3) - \alpha_2 \cdot F \cdot (T_3 - T_2) \end{cases}$$

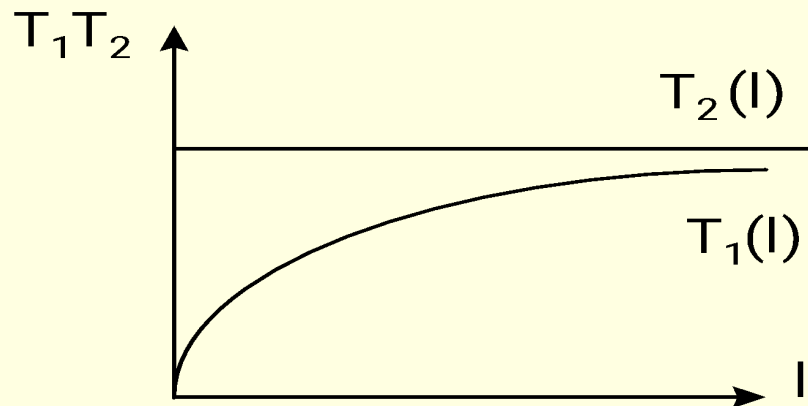
Модель теплообменного аппарата типа «вытеснение- вытеснение»

$$\begin{cases} \rho_1 C p_1 \frac{\partial T_1}{\partial t} = -u \frac{\partial T_1}{\partial l} \rho_1 C p_1 - \frac{K \cdot F \cdot \Delta T}{V} \\ \rho_2 C p_2 \frac{\partial T_2}{\partial t} = -u \frac{\partial T_2}{\partial l} \rho_2 C p_2 - \frac{K \cdot F \cdot \Delta T}{V} \end{cases}$$

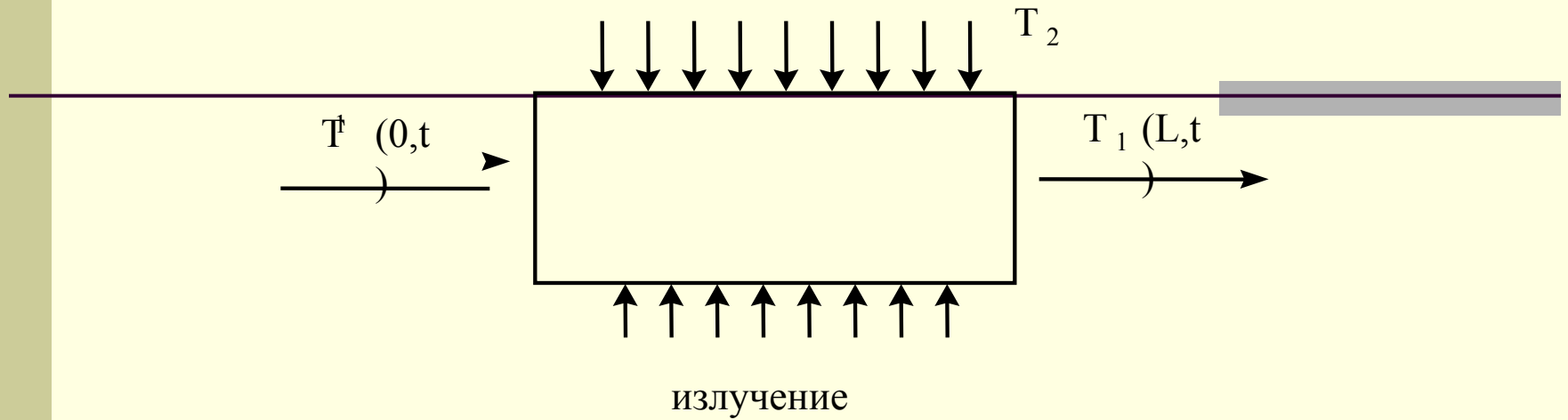
Исследование теплообменного аппарата идеального вытеснения (аппарат с постоянной температурой греющего пара)



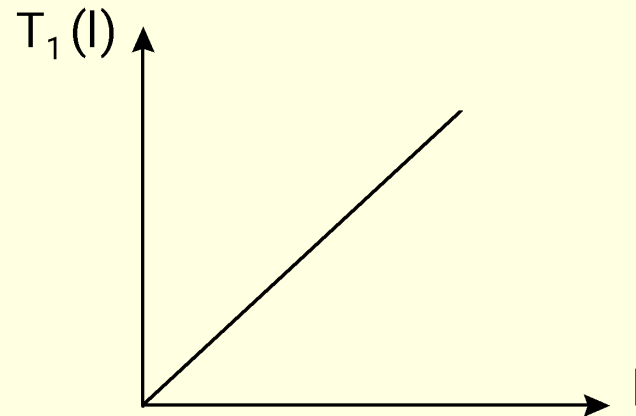
$$\rho_1 \cdot c_{p1} \frac{\partial T_1}{\partial t} = -u_1 \cdot \rho_1 \cdot c_{p1} \frac{\partial T_1}{\partial l} + \frac{F}{V} \cdot K \cdot (T_2 - T_1)$$



Исследование модели трубчатой печи



$$\rho_1 \cdot C p_1 \cdot \frac{\partial T_1}{\partial t} = \frac{F}{V} q \cdot -u \cdot \rho_1 \cdot C p_1 \cdot \frac{\partial T_1}{\partial l}$$



Моделирование массообменных процессов

Закон Фика для молекулярного массопереноса:

$$\mathbf{q} = -\mathbf{D}_m \cdot \frac{d\mathbf{c}}{d\mathbf{x}}$$

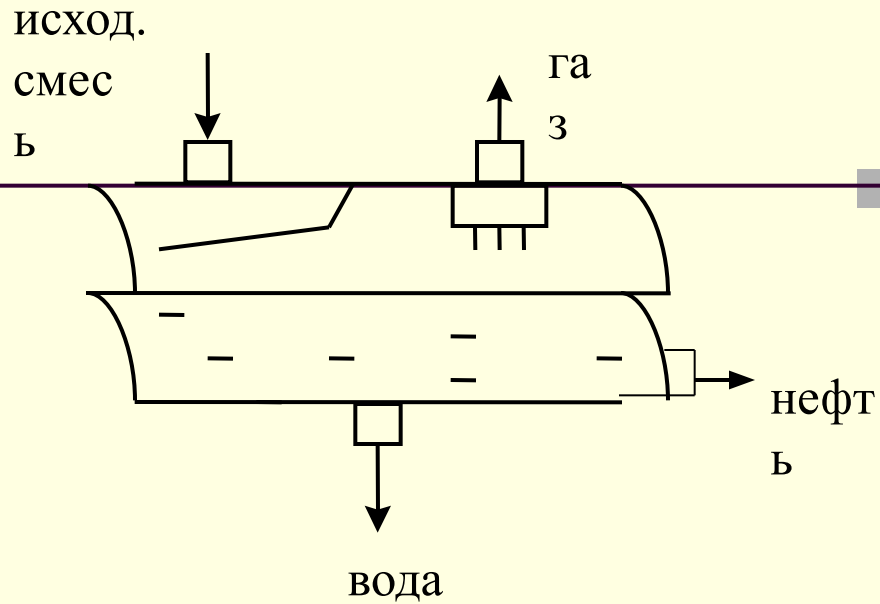
Уравнение Фика для конвективного переноса:

$$\frac{\partial \mathbf{c}}{\partial \tau} + W_x \frac{\partial \mathbf{c}}{\partial x} + W_y \frac{\partial \mathbf{c}}{\partial y} + W_z \frac{\partial \mathbf{c}}{\partial z} = \mathbf{D}_m \cdot \nabla^2 \mathbf{c}$$

Уравнение массопередачи:

$$q = \beta \cdot F \cdot (c_* - c)$$

Моделирование процесса сепарации



закон Дальтона

$$y_i = \frac{p_i}{p}$$

Закон Рауля- Дальтона

$$y_i = K \cdot x_i$$

Математическая модель процесса сепарации (однократного испарения) для многофазного процесса

Уравнения общего и покомпонентного материальных балансов

$$F = G + L$$

$$F \cdot u_i = G \cdot y_i + L \cdot x_i$$

$$x_i = \frac{u_i}{1 + e \cdot (K_i - 1)}$$

$$e = \frac{G}{F} \quad (\text{доля отгона})$$

$$\sum x_i = \sum y_i = 1$$

$$K = \frac{p_{0,i}}{p} \quad (\text{константа фазового равновесия})$$

уравнение Ашворта

$$\lg P_i = 2.68 \cdot \left[1 - \frac{f(T)}{f(T_0)} \right] - 1$$

$$f(T) = \frac{1250}{\sqrt{T^2 - 108000} - 307.6} - 1$$

$$f(T_0) = \frac{1250}{\sqrt{T_0^2 - 108000} - 307.6} - 1$$

$$f(T) \cong f(T_0)$$

уравнение Антуана

$$\ln P_i = A_i - \frac{B_i}{T - C_i}$$

уравнение Пенга-Робинсона

$$P = \frac{RT}{v-b} - \frac{a}{v(v+b)+b(v-b)};$$



Рисунок1. – Структура моделирующей системы технологии промышленной подготовки нефти.

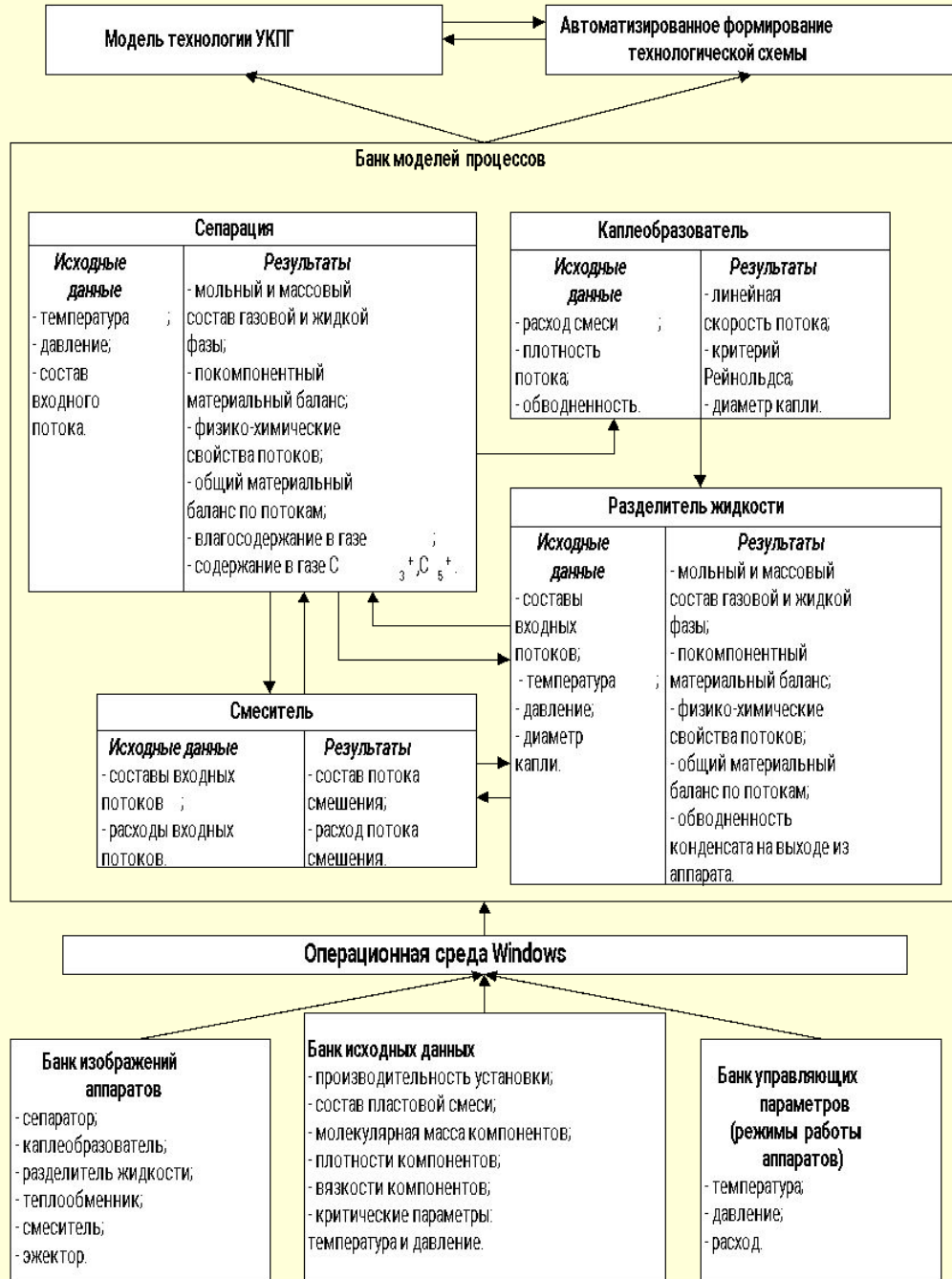


Рисунок5. – ИМС процессов первичной подготовки газового конденсата

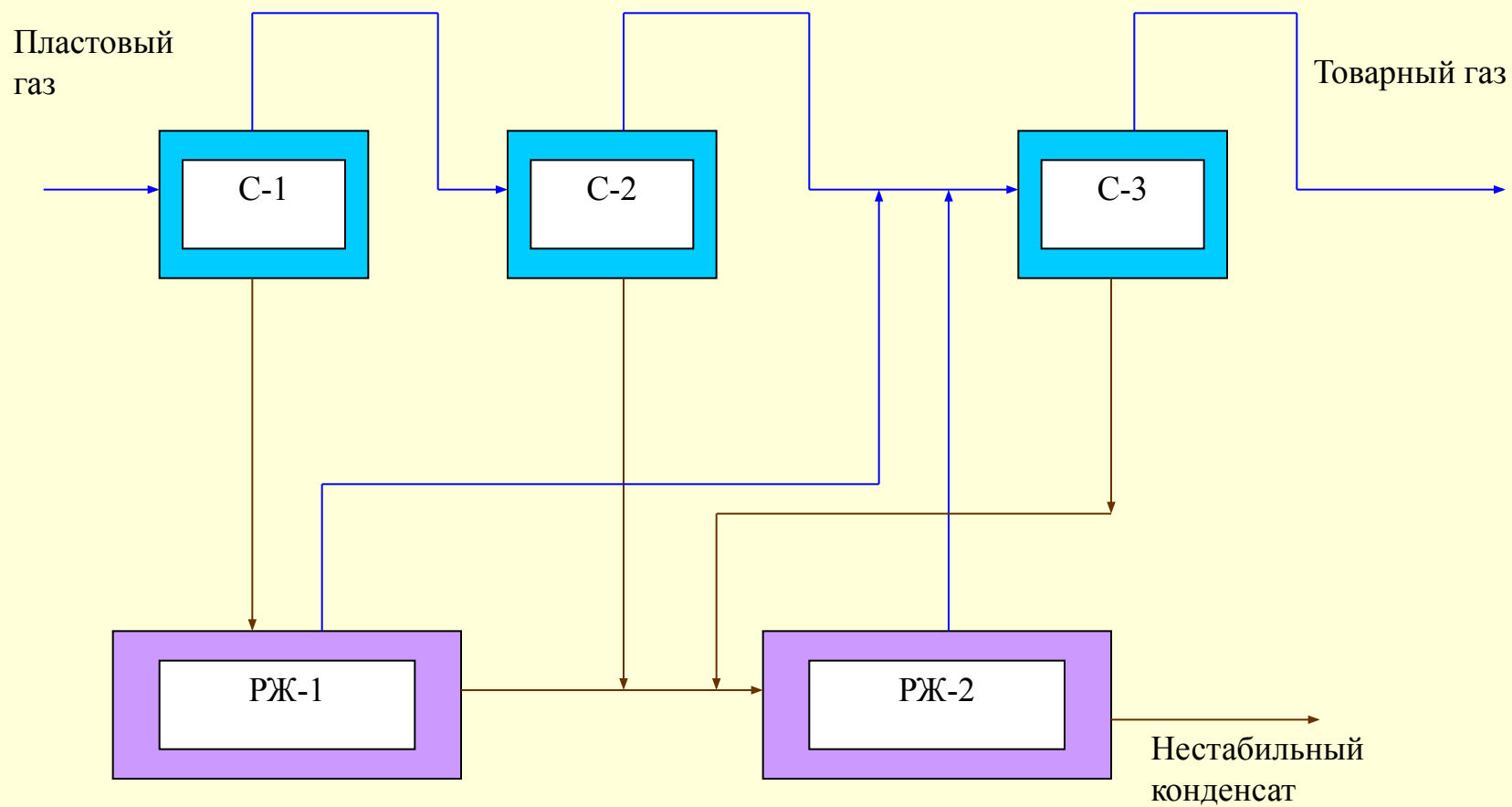


Рисунок 10. – Схема расчета установки комплексной подготовки газа Мыльджинского ГКНМ

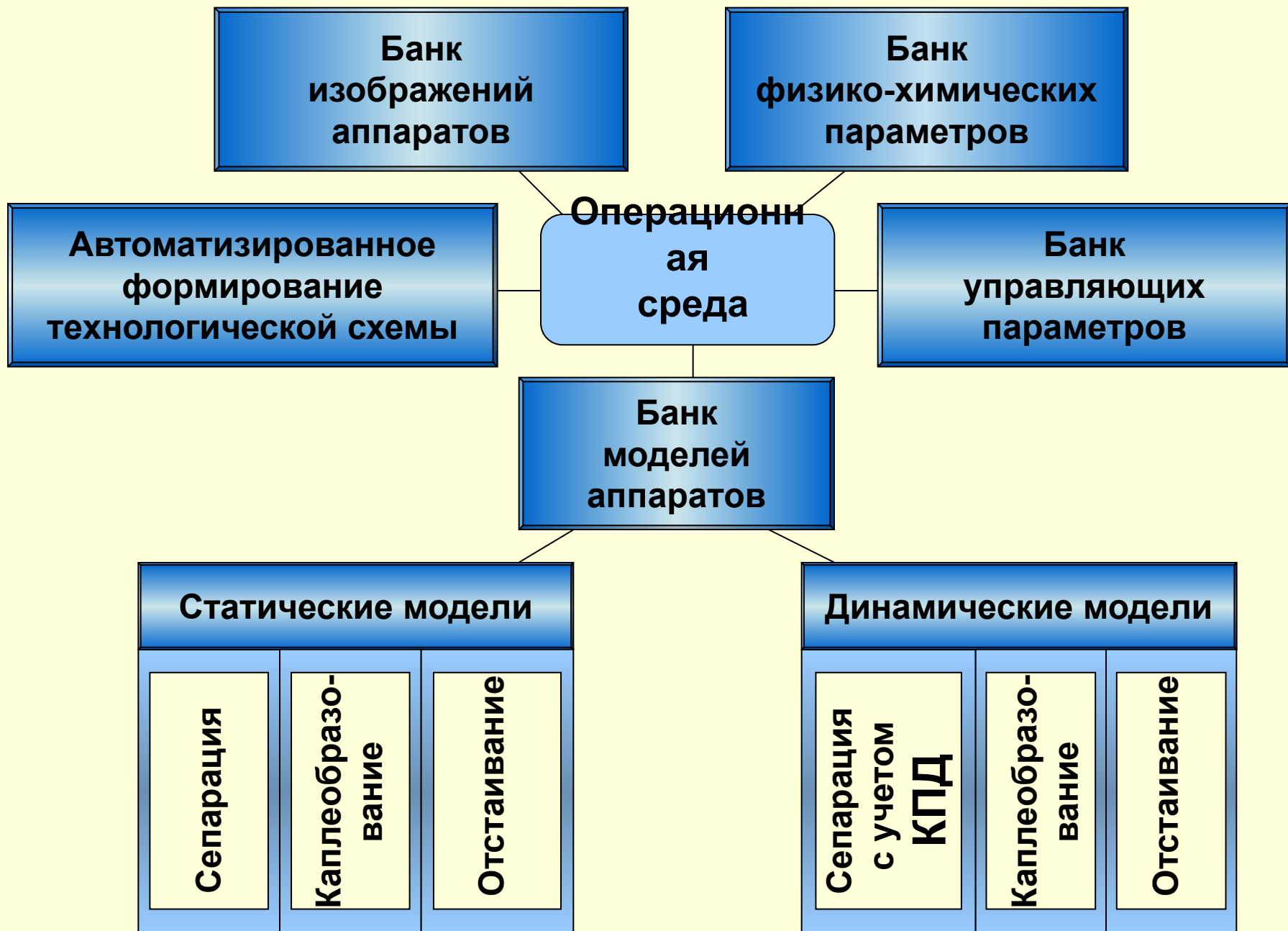


Рисунок 13. – Структура моделирующей системы.



Рисунок 14. – Структура формирования динамической модели МС.

МОДЕЛЬ ПРОЦЕССА СЕПАРАЦИИ С УЧЕТОМ КОЭФФИЦИЕНТА ЭФФЕКТИВНОСТИ.

Коэффициент эффективности η определяется:

$$\eta = 1 - G_{yn} / G_{ж} \quad (1)$$

где: G_{yn} – расход унесенной газом жидкости; $G_{ж}$ – расход жидкости в смеси на входе.

$$G_z = G_{ex} (1 + \eta (e - 1)) \quad (2)$$

$$G_{ж} = \eta \cdot e \cdot G_{ex} \quad (3)$$

где: G_{ex} – расход смеси на входе, e – доля отгона.

Составы газа $y(i)$ и жидкости $x(i)$ для каждого из компонентов i в случае газосепарации определяются по выражениям:

$$y(i) = \frac{u(i) [k(i) \cdot e + (1 - e)(1 - \eta)]}{[1 + \eta(e - 1)] [e(k(i) - 1) + 1]} \quad (4)$$

$$x(i) = u(i) / [e \cdot (k(i) - 1) + 1] \quad (5)$$

где: $k(i)$, $u(i)$ – константа фазового равновесия и содержание в смеси компонента i .

КПД многоэлементного сепаратора ($\eta_{общ}$):

$$\eta_{общ} = \eta_1 + \eta_2 \cdot (1 - \eta_1) + \eta_3 \cdot (1 - \eta_1) \cdot (1 - \eta_2) + \dots + \eta_N \cdot (1 - \eta_1) \cdot (1 - \eta_2) \cdot (1 - \eta_{N-1}) \quad (6)$$

где N – число ступеней (элементов) сепарации

Таблица 13. Составы и расходы материальных потоков УКПГ.

Компо- Нент	С-1 P=9 МПа, t=20°C		С-2 P=8.8 МПа, t=2° С		С-3 P=5 МПа, t= -33°C		РЖ-2 P=2.5 МПа, T=15°C	
	газ	н. конд.	газ	н. конд.	газ	н. конд.	газ	н. конд.
CO ₂	0,81	0,76	0,81	0,87	0,83	1,09	1,34	0,57
N ₂	2,81	0,65	2,87	0,68	3,04	0,42	1,15	0,09
CH ₄	87,50	43,80	88,50	47,77	90,02	42,27	79,92	14,90
C ₂ H ₆	3,47	5,49	3,40	6,27	3,39	9,83	7,72	7,12
C ₃ H ₈	2,48	7,98	2,32	9,03	1,92	16,6	6,16	16,14
i-C ₄ H ₁₀	0,65	3,51	0,57	3,81	0,35	6,55	1,32	7,61
n- C ₄ H ₁₀	0,82	4,03	0,73	4,22	0,37	6,39	1,67	7,73
C ₅₊	1,45	33,78	0,80	27,34	0,08	16,80	0,71	45,85
Расход	215,4	29,6	199,2	16,2	188	25,5	14,3	57
L _{тр} , м	1,4		2,2		2,8			
КПД, %	96,3		97,2		97,7		97,5	
C _ж , 10 ⁻⁵ м ³ /м ³	85,2		40,4		32,7			
ρ, кг/м ³ .	94,93	577,97	100,75	570,27	60,85	585,39	24,52	665,88

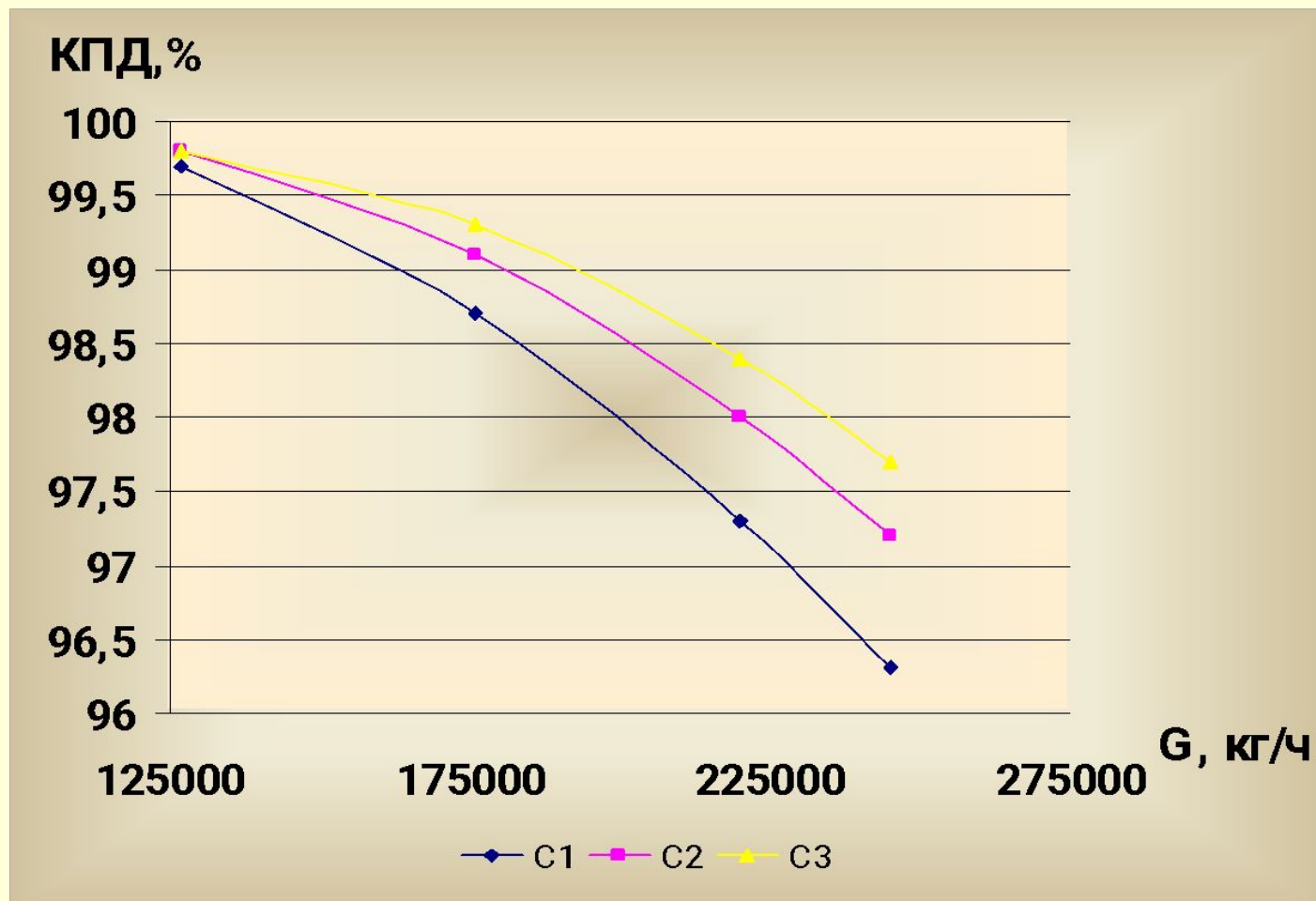


Рисунок16.- Изменение КПД в зависимости от расхода.

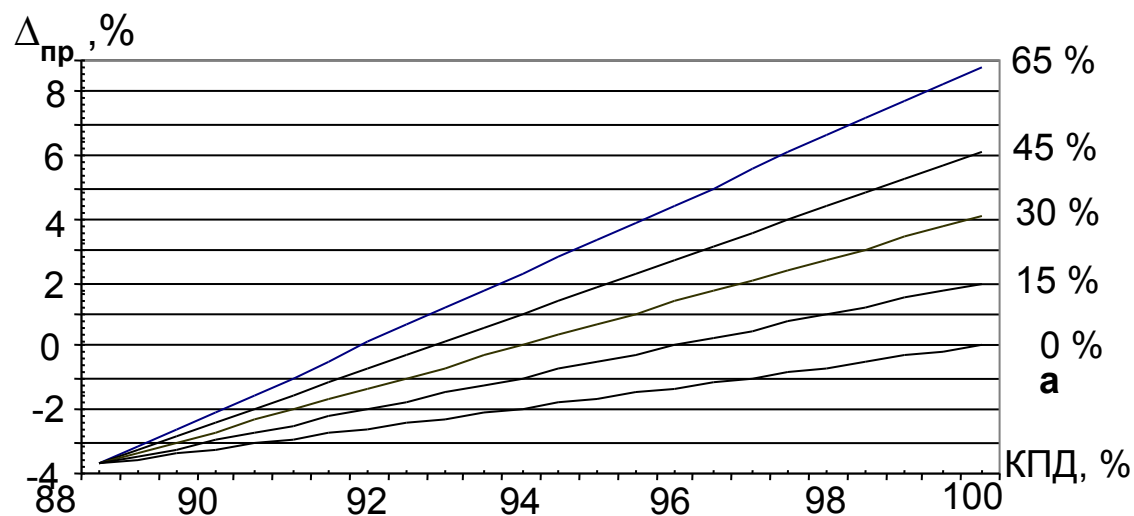


Рисунок17.- Относительный прирост выхода нестабильного конденсата при изменении степени рециркуляции и КПД конечного газосепаратора.

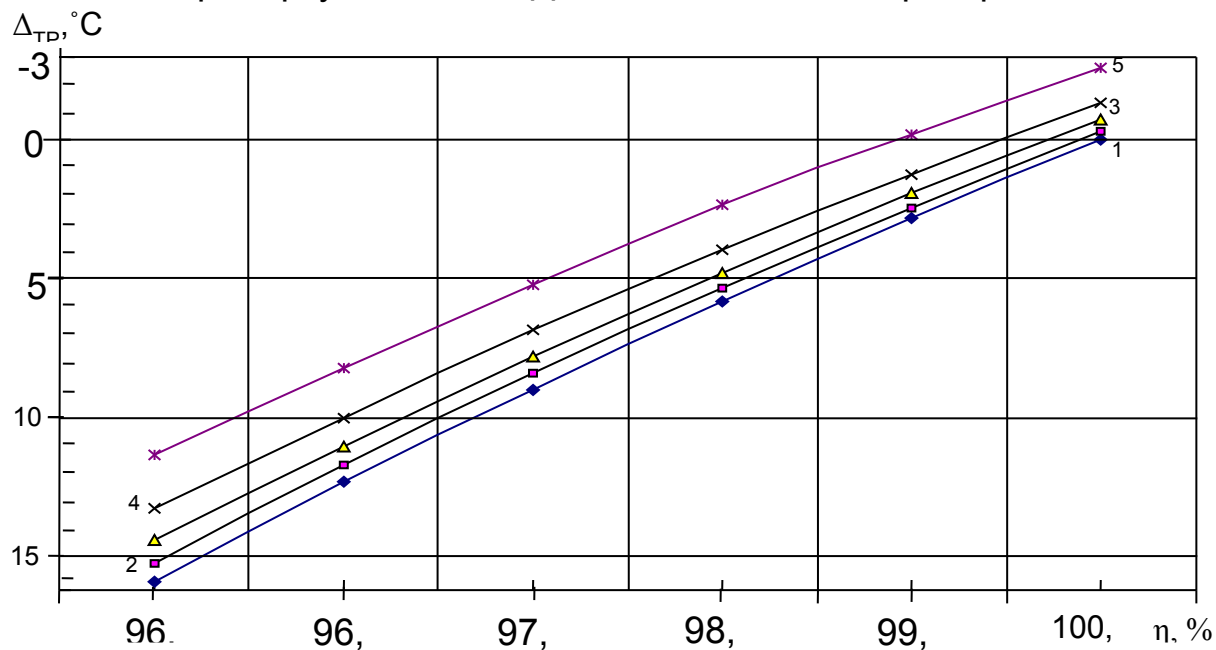
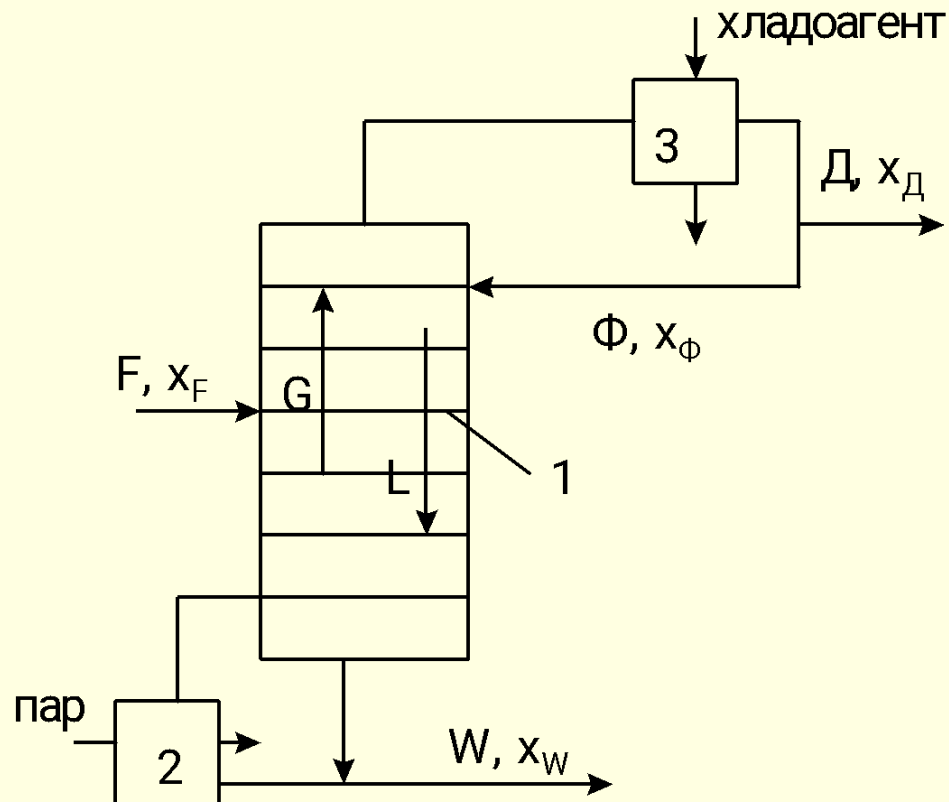


Рисунок18.- Зависимость изменения точки росы товарного газа от КПД конечной ступени сепарации и давления в магистральном газопроводе: 1- $P_{газ} = P_{сеп}$; 2- $P_{газ} = 0,9P_{сеп}$; 3- $P_{газ} = 0,8P_{сеп}$; 4- $P_{газ} = 0,7P_{сеп}$; 5- $P_{газ} = 0,6P_{сеп}$.

**Таблица 14. Влияние расхода сырья на качественные показатели продукции
УКПГ.**

ПАРАМЕТРЫ	ВТОРОЙ год разработки				ПЯТНАДЦАТЫЙ год разработки
Расход на входе установки, кг/ч.	127000	176000	220000	245000	100000
КПД С-3, %	99,82	99,27	98,37	97,70	99,01
Точка росы по УВ, °С	-33,70	-31,80	-28,90	-26,40	-26,6
Выход газа, кг/ч.	97539	134839	168878	188050	89854
Выход конденсата, кг/ч.	29461	41161	51122	56950	10146
Унос C_{5+} с газом, кг/ч.	18	89	244	383	46
Унос C_{3+} с газом, кг/ч.	26	136	375	590	72
унос компонентов легче C_3 с конденсатом, кг/ч.	77	159	258	354	27

Моделирование процесса ректификации



При построении математической модели процесса ректификации сформулируем следующие допущения:

1. Исходная смесь подаётся в колонну при температуре кипения.
2. Жидкость на тарелках в колонне находится при температуре кипения, а пар- при температуре точки росы, т.е. насыщения.
3. Потоки пара и жидкости по высоте колонны постоянны.
4. Давление по высоте колонны постоянно.
5. Флегма но орошение для расчёта
6. Массопередача на тарелках эквимолярная, т.е. изменение в молях не происходит.
7. В зоне массообмена на тарелке осуществляется идеальное перемешивание жидкости, а пар движется в режиме идеального вытеснения.
8. Эффективность тарелок постоянна.

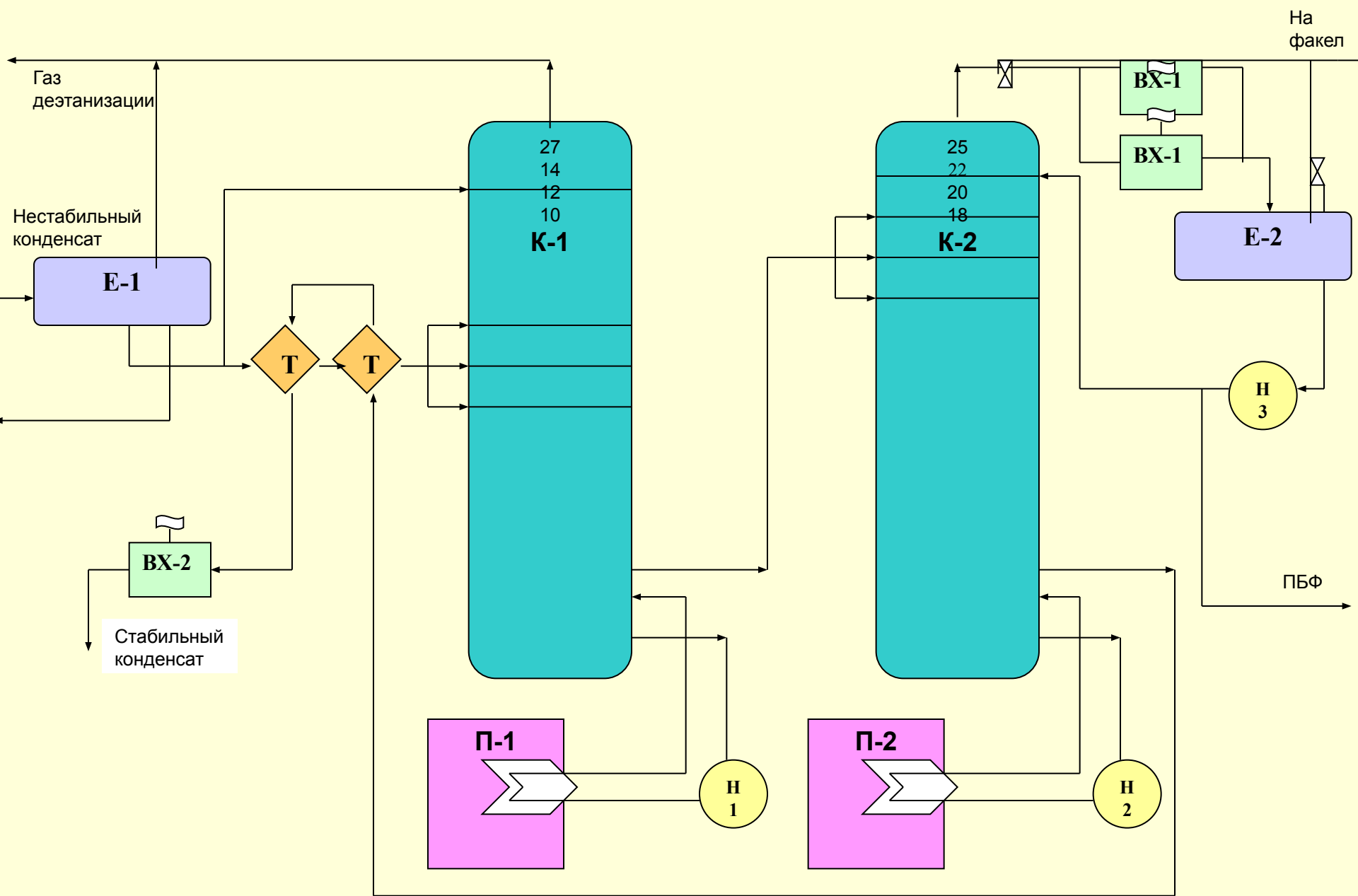


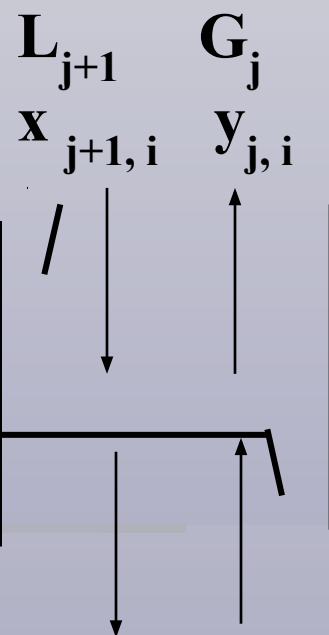
Рис. 1.5 Схема УДСК Мыльджинского ГКМ

$$L_{j+1} - L_j + G_{j-1} - G_j = 0; \quad L_{j+1} \cdot x_{j+1,i} - L_j \cdot x_{j,i} + G_{j-1} \cdot y_{j-1,i} - G_j \cdot y_{j,i} = 0$$

$$L_{j+1} = G_j - G_{j-1} + L_j; \quad (4) \quad G_j = \sum_{i=1}^k (G_{j-1,i} + \eta \cdot (G_{j,i}^* - G_{j-1,i})); \quad (3)$$

$$G_{j,i}^* = y_{j,i}^* (e \cdot L_j); \quad (2)$$

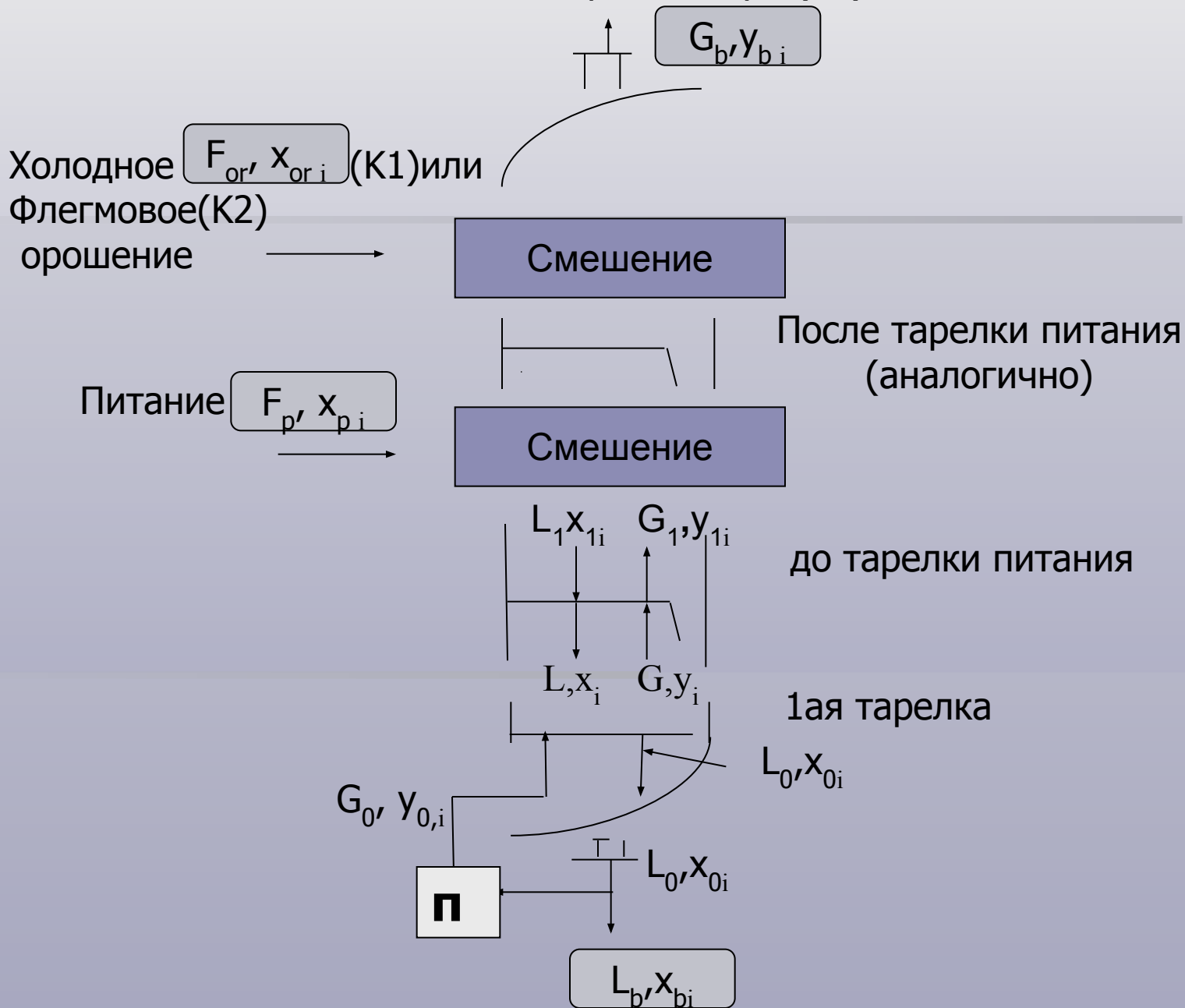
$$x_{j+1,i} = \frac{G_j \cdot y_{j,i} - G_{j-1} \cdot y_{j-1,i} + L_j \cdot x_{j,i}}{L_{j+1}}; \quad (5)$$



$$y_{j,i} = y_{j-1,i} + \eta \cdot (y_{j,i}^* - y_{j-1,i}); \quad (1)$$

$L_j, x_{j,i}$ $G_{j-1}, y_{j-1,i}$
 ↙ ↘
 Исходные данные
 для расчета тарелки

Расчет дефлегматора (K2)



Результаты расчета колонны деэтанзации К1.

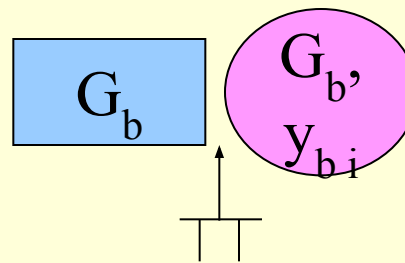
Вещество	Содержание, %мольн.						
	Нестаб. Конд.	Метан-этановая фракция			Деэтанизированный конденсат		
		Расчет	Экспери- мент	Δ, %	Расчет	Экспери- мент	Δ, %
<i>Метан</i>	10,73	53,52	54,51	1,8	1,25	1,01	19,2
<i>Этан</i>	6,56	25,86	25,18	2,7	2,28	2,34	2,7
<i>Пропан</i>	15,49	15,32	14,23	7,7	15,53	15,73	1,3
<i>И-бутан</i>	7,51	2,39	2,10	12	8,65	8,71	0,7
<i>Н-бутан</i>	11,47	2,03	2,01	1,0	13,56	13,59	0,2
<i>И-пентан</i>	7,2	0,46	0,43	6,9	8,69	8,71	0,23
<i>Н-пентан</i>	7,35	0,35	0,31	11,4	8,90	8,92	0,2
<i>C₆₊</i>	33,69	0,0	0,0	-	41,14	41,20	0,15
<i>Расход, кг/ч</i>	31243	2142	2146	-	29093	29097	-

Результаты расчета колонны стабилизации К2.

Вещество	Содкржание, %мольн.						
	Дэтан. Конден.	Пропан-бутановая фракция			Стабильный конденсат		
		Расчет	Экспери- мент	Δ,%	Расчет	Экспери- мент	Δ,%
Метан	1,25	3,03	2,33	23	0,0	0,0	-
Этан	2,28	7,12	6,76	5,3	0,0	0,0	-
Пропан	15,53	44,52	45,07	1,2	0,0	0,0	-
И-бутан	8,65	22,03	22,66	2,9	1,37	1,09	20,4
Н-бутан	13,56	20,46	20,76	1,5	9,76	9,71	0,5
И-пентан	8,69	1,65	1,56	5,5	12,44	12,51	0,6
Н-пентан	8,90	0,88	0,86	2,3	13,18	13,10	0,6
C ₆₊	41,14	0,0	0,0	-	62,97	63,58	1
Расход,кг/ч	29097	6413	6393	-	22704	22684	-



- Исходные данные



- Результаты расчета

F_{or}, t_{or}

F_p, x_p
 i, t_p

$t_{\text{вых из печи}}$

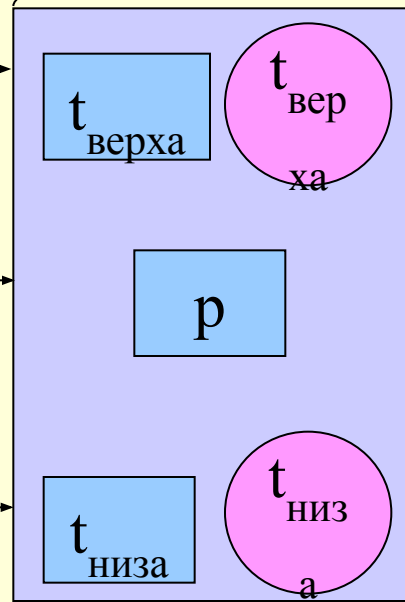
$t_{\text{верха}}$

$t_{\text{верха}}$

p

$t_{\text{низа}}$

$t_{\text{низа}}$



G_b

$G_b,$
 y_{bi}

$L_b,$
 x_{bi}

	УКПГ			К1		К2	
Состав, % мольн	Пластов ый газ	Сухой газ	Н К	МЭФ	ДЭК	ПБФ	СК
Метан	86,76	92,34	16,3	57,8	3,33	8,81	0,1
Этан	3,74	4,279	6,89	20,44	2,68	6,56	0,39
Пропан	2,17	2,35	13,72	14,03	13,73	34,92	1,25
И-бутан	0,59	0,414	8,97	4,35	10,51	25,22	1,84
Н-бутан	0,78	0,502	12,12	2,11	15,38	23,01	10,83
И-пентан	0,46	0,034	3,71	0,43	4,78	0,57	7,22
Н-пентан	0,39	0,032	3,01	0,22	3,91	0,02	6,17
С6+	1,42	0	34,63	0	45,67	0	72,19
Расход, кг/ч	1344000 т/год	194097	37647	3795	33851	7495	26356
Темп. Орош. 32С; температура в РЖ2 20С							