



Платформа для строгого технологического моделирования

Кирысов Сергей Сергеевич
Старший менеджер, Сибур Диджитал



ИЦК ХИМИЯ
И ФАРМАЦЕВТИКА



Технологическое моделирование – интегральный инструмент, позволяющий принимать более качественные решения на всем жизненном цикле производства



Создание новых объектов (НИОКР, проектирование)

На этапе создания новой установки ПО позволяет смоделировать процесс «с нуля» ускоряя, повышая качество и митигируя риски масштабирования:

- Разработка технологической схемы
- Расчет материального и теплового балансов:
- Предварительный расчет оборудования (Sizing)
- Выбор рабочих параметров оборудования
- Термодинамический анализ и прогнозирование свойств
- Расчет образования гидратов
- Гидравлические расчеты



Технико-экономическое обоснование

На основе результатов моделирования строится экономика проекта:

- **Расчет капитальных затрат (CAPEX):** Приближенная стоимость основного оборудования, полученная через интеграцию с базами данных
- **Операционные расходы (OPEX):** Расходы на энергоносители, химикаты, воду на тонну продукции
- **Оценка рентабельности:** Расчет сроков окупаемости инвестиций в новую технологию



Оптимизация существующих установок (Эксплуатация)

Технологи используют ПО для анализа работы действующих заводов без остановки производства.

- Поиск «узких мест» (Bottleneck-анализ)
- Анализ энергоэффективности
- Анализ вариантов модернизации
- Анализ чувствительности (What-if анализ)
- Внедрение систем экономической оптимизации в реальном времени (RTO)



Четыре ведущие компании смежных отраслей объединили свой опыт для обеспечения технологического суверенитета и создания индустриального стандарта в области строгого инженерного моделирования технологических процессов

Созаказчики → ТЗ/ФТТ → Разработка платформы → Тестирование → Развитие

- Нефтехимия
- Нефтепереработка
- Минеральные удобрения
- Газопереработка

- Архитектура
- Функциональное наполнение
- Приоритезация и детализация
- Этапность

- Верификация методик
- Проектирование (ТЗ/ЧТЗ)
- Отладка архитектуры и функционала

- Методики тестирования
- Критерии приемки

- Модель вывода на рынок



На первом этапе создается «фундамент» — гибкая клиент-серверная архитектура с потенциалом для расширения и базовым набором функциональности



МАСШТАБИРУЕМОСТЬ

Автоматическое масштабирование на Kubernetes



ГИБКОСТЬ НАСТРОЙКИ

Адаптация схем расчётов под отраслевые процессы



ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТЬ

Параллельные вычисления, Redis-кэширование, оптимизация алгоритмов



БИБЛИОТЕКА ДАННЫХ

Расширяемая база компонентов, оборудования, термодинамических пакетов

Возможность интеграции ГОСТов/СНИПов в библиотеки и методики



ОТКРЫТАЯ ПЛАТФОРМА

REST/gRPC API для разработки собственных расчётных модулей



ИНТЕГРАЦИЯ

Import/export сервисы, RabbitMQ, поддержка XLSX, JSON, CSV

Есть возможность как разработки, так и подключения собственных компонентов с использованием стандартизированных API

Компоненты могут подключаться к системе как внешние: это могут быть расчётные модули оборудования, термодинамические пакеты, а также сервисы импорта и актуализации справочников

Функциональное наполнение, этап 1-3

Покрытие других, доступных на рынке решений – не более 60%

MVP1, Q1 25

MVP2, Q4 25

ОПЭ, Q2 26

Компоненты:

- H₂O, CO, CO₂, H₂, N₂, H₂S, NH₃, O₂, инерты
 - n- и изо- алканы до C₆
 - Гликоли (МЭГ, ДЭГ, ТЭГ)
 - Гипокомпоненты
 - Псевдокомпоненты по разгонке
 - Импорт библиотек
- Ограниченный набор свойств, анализ фазового равновесия, свойств смеси

- +алканы до C₂₀, алкены до C₈, арены, цикло до C₁₀, алифатические спирты, альдегиды, простые и сложные эфиры, карбоновые кислоты, амины, меркаптаны, COS, Nox, Ih
- Расширение набора свойств инд. компонентов и потока

- + карбонат калия, гидрокарбонат калия

- Расширение набора свойств инд. компонентов и потока
+ работа с азеотропами

Термодинамические пакеты:

Пенг-Роббинсон, CPA

+ NRTL, IAPWS-95/97, AMINES

+ UNIQUAC

Поток – материальный, энергетический
Делитель, смеситель
Нагреватель, холодильник
Трубопровод, глапан, дроссель
Насос, компрессор
Сепаратор двухфазный
Простая колонна

Расширение спецификаций оборудования

+Гидравлический расчет трубопровода
+Трехфазный сепаратор
+Теплообменник

- Расширение спецификаций оборудования, в т.ч.:
- колонн - конфигурирование (конденсатор, ребойлер, стриппинги, боковые отборы), гидравлический расчет, конструкция, Rate-based
 - теплообменников – конфигурация под различные типы

Функции (15+)

- Пользовательский интерфейс
- Менеджер нефтей
- Подключение внешних компонентов

Пользовательский опыт:

- Подсхема, рецикл, конструктор отчетов, азеотропный анализ
- Функции оптимизации и анализа:
- азеотропный анализ, adjust, design spec, set, Сервис таблиц (spreadsheet)
- Менеджер скриптов

Компоненты (150+),
т/д пакеты (6)

Оборудование (16+)



Методика испытаний и тестирование – ключевой элемент разработки конкурентноспособного ПО



Полнота функционала

- Проверка покрытия основным функционалом **(да/нет)**
- Расширение/улучшение функционала



Качество расчетов

- Сверка баз данных
- Сравнительное тестирование* точности расчетов в допустимом диапазоне температур, давлений и составов для пакета свойств (*более 25000 сценариев для каждого типа расчета*)
- Оценка точности через метрики R2, СКО, макс. ошибка, кол-во грубых ошибок и др.



Быстродействие

Время выполнения расчетов должно быть не больше, чем в референсном ПО**
Тесты на масштабируемость



Корректность сценариев

- Отсутствие системных ошибок, зависания расчета и пр.
- Расчеты в критических диапазонах, крайние составы (чистые компоненты, азеотропы)
- Плохие начальные приближения: работа с заведомо нереалистичными начальными значениями

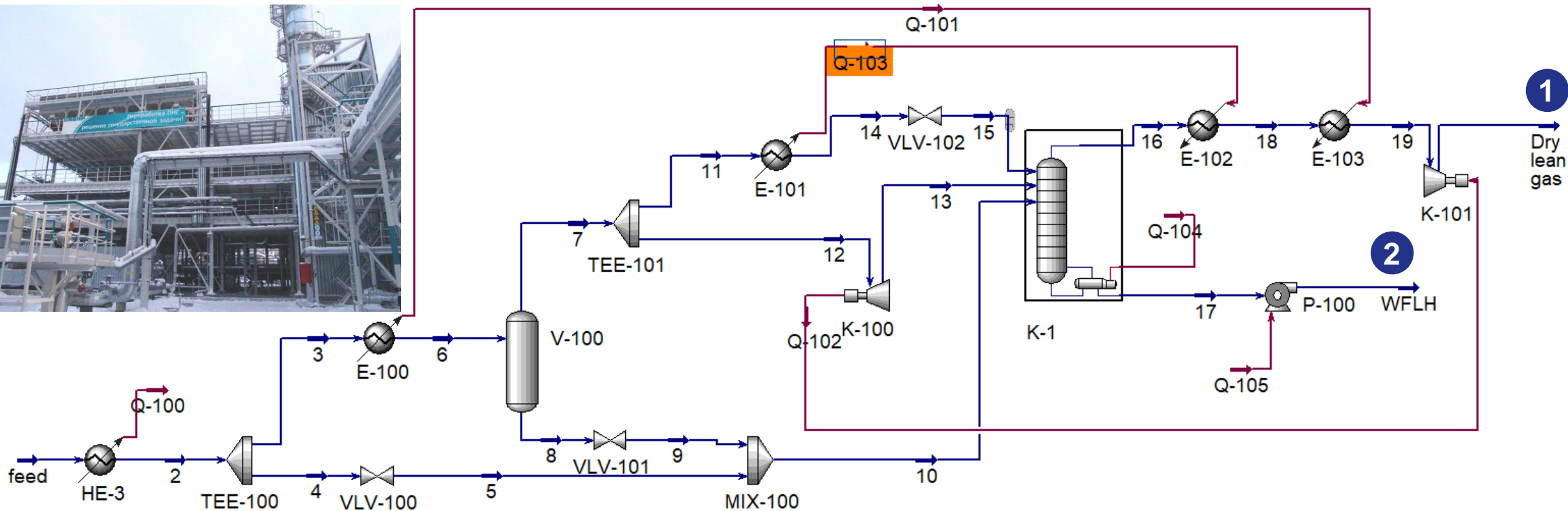
* - В рамках тестирования расчетного модуля программного обеспечения должны быть проведены следующие мероприятия:

- тестирование расчета фазового равновесия материального потока
- тестирование расчета свойств материального потока (плотность, вязкость и т.д.)
- тестирование базового оборудования (смеситель, делитель)
- тестирование сложного оборудования (колонна, трубопровод)

** - Для сравнения используется референсное ПО – Aspen Hysys и Aspen Plus



Технологическая схема процесса разделения ПНГ в HYSYS

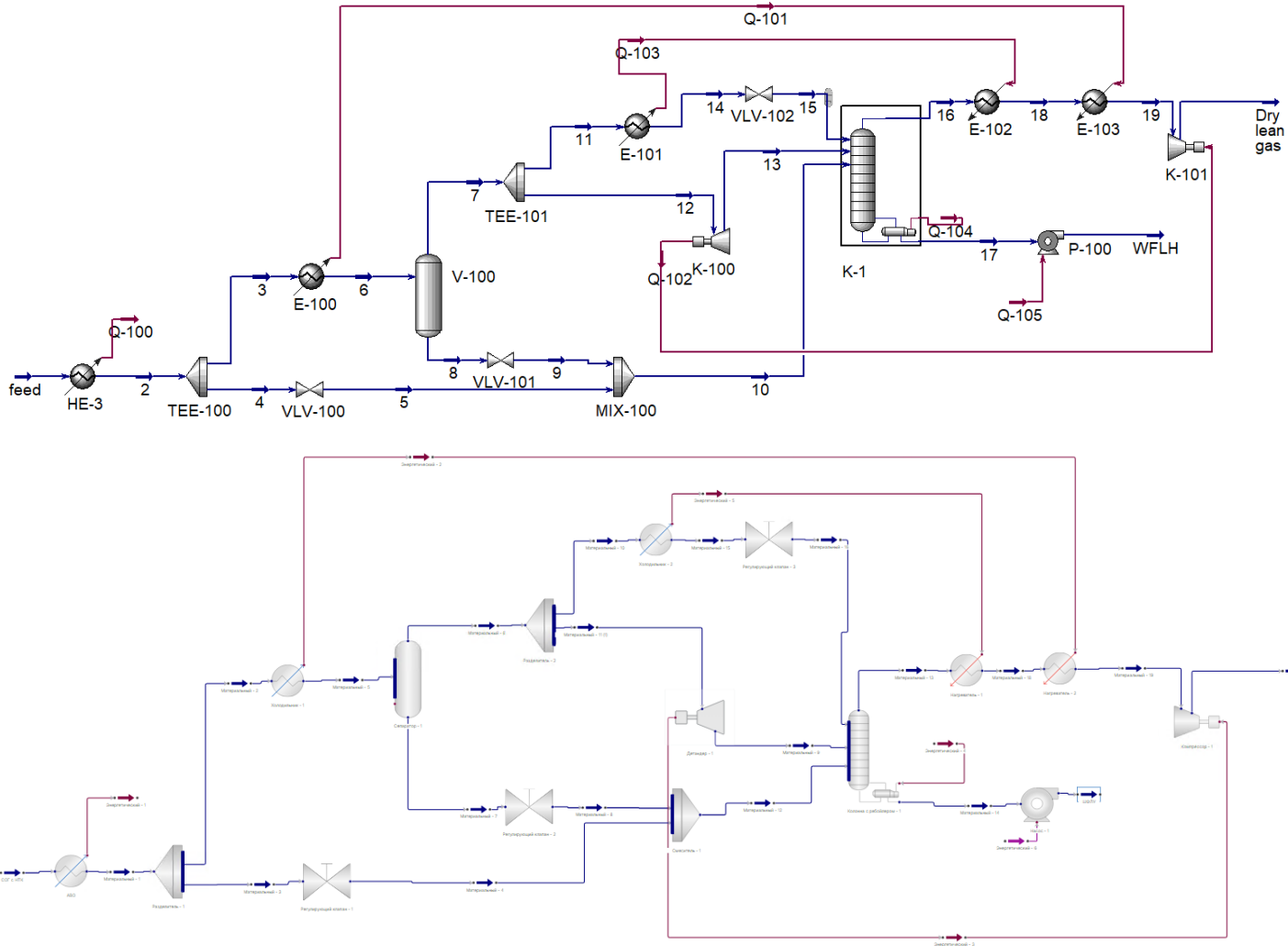


Первый передел СИБУР, в котором происходит разделение попутного нефтяного газа (ПНГ) на:

- 1 Сухой отбензиненный газ (СОГ) – метан и этан
- 2 Широкую фракцию легких углеводородов (ШФЛУ) – пропан и выше, которые поступают на дальнейшие переделы СИБУРа – фракционирование и пиролиз



Сравнительный анализ СТМ и Hysys на примере процесса разделения ПНГ на СОГ и ШФЛУ



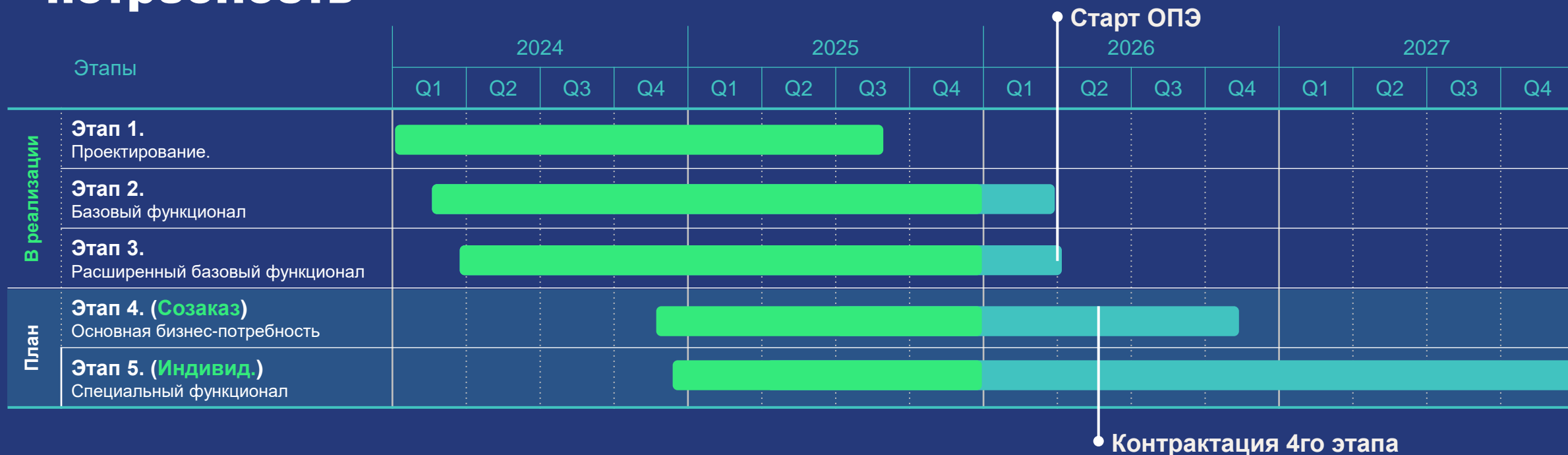
Параметры	K1		
	СТМ	Hysys	Дельта
Температура верха	195,5	195,4	0,1%
Температура куба	299,05	298,7	0,1%
Доля этана в ШФЛУ	18,75	19,07	0,3%
Доля пропана в СОГ	0,26	0,26	0,0%

Параметры	Мат. поток СОГ		
	СТМ	Hysys	Дельта
Температура	319,14	319,3	0,1%
Давление	2 460 258	2 457 327	0,1%
Расход	84,81	84,72	0,1%

Параметры	Мат. поток ШФЛУ		
	СТМ	Hysys	Дельта
Температура	314,52	314,25	0,1%
Давление	2 220 000	2 220 000	0,0%
Расход	15,19	15,27	0,5%



Параллельно с завершением текущего этапа запущена работа по формированию требований дальнейшего наращивания функционала под текущую бизнес-потребность



Этап 1-3

Реализовано 16 типовых аппаратов, 15 манипуляторов, 150+ компонентов в базе, 6 термодинамических пакетов

Готовность «ядра» 90%

Этап 4

Продвинутый расчет 18+ аппаратов, Расширение БД на 550+ компонентов в базе, 17 термодинамических пакетов дополнительно 9 манипуляторов



Этап 4 - Продвинутая функциональность ПО для решения прикладных задач промышленных пользователей

ХИМИЧЕСКИЕ КОМПОНЕНТЫ

- Расширение базы у/в, полимеры, сложные соли, металлоорганические соединения, цеолиты, алюмосиликаты

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ПАКЕТЫ СВОЙСТВ

- Т/д пакеты для специализированных процессов, условий, компонентов: PSRK, WILSON, ELECNRTL, SR-Polar, EOS Redlich-Kwong, GERG, SRK, ENRTL-RK, с модификацией RKS-BM, Sour PR, Glycol Package, Solids, UNIFAC, Peng-Robinson – LK, Acid Gas - Chemical Solvents, PC-SAFT, Peng-Robinson – SV, NRTL-RK

ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ БЛОКИ

- Гидравлический расчет сети трубопроводов
- Детальный расчет теплообменного, сепарационного, колонного оборудования с учетом конфигурации внутренней конструкции, гидравлический расчет
- Сложные колонны – реакционно-ректификационные, со сложной обвязкой, выносными стриппингами, комбинированными внутренними устройствами и т.д.
- Библиотеки динамического оборудования – клапана, насосы, компрессоры, детандеры
- Реактора с библиотеками реакционных процессов
- Аппараты с твердой фазой

МЕТОДЫ И АЛГОРИТМЫ

- Equation oriented-солвер, мат. методы (Монте-Карло и др.) для расчета кинетики полимерных реакций и свойств полимеров

ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ МОДУЛИ

- Набор компонентов для систем RTO
- Внутренний язык программирования для кастом-моделирования