1. НАЗНАЧЕНИЕ И ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ ПРОГРАММЫ

Refinery Modeling System – программный продукт, предназначенный моделирования нефтеперерабатывающих, газоперерабатывающих, нефтехимических и химических комплексов, а также расчета выбросов углекислого газа на данных предприятиях.

Используя входные данные о загрузке предприятия по сырью, материальных балансах основных узлов предприятия – установок, а также расхода утилит на каждой из них и в целом по заводу, программа осуществляет моделирование работы установок на предприятии (расчет материального баланса), а также рассчитывает выбросы парниковых газов в разрезе основных источников и узлов модели.

Программа имеет в своем составе несколько функциональных блоков:

1. Блок моделирования

Основной функционал блока состоит в расчете материальных балансов промышленных установок, входящих в состав предприятия, на основе следующих исходных данных:

- Фактическая загрузка установки. Для специальной установки («Вход») загрузка по сырью задается на основании вводимых пользователем данных в т/сутки. Для прочих установок (сырьем которых являются продукты установки «Вход» и других установок) мощность определяется автоматически на основании материальных потоков входящих компонентов при нажатии кнопки «Рассчитать модель» на вкладке «Результат».
- Фактический выход продуктов. Задается пользователем в % масс. от загрузки установки по сырью – программа в процессе расчета определяет фактический выход продуктов в абсолютном значении (т/сутки).
- Расход утилит, включающих:
 - Расход топлива на установке в т/т сырья.
 - Расход электричества на установках в кВт*ч/т сырья.
 - Расход перегретого пара в кг/т сырья.

Блок позволяет осуществлять пропорциональный (согласно материальным балансам в % масс.) пересчет загрузки установок при изменении загрузки первичных установок.

Блок не осуществляет оптимизацию производства и не задает ограничений по мощности установок. Также блок не осуществляет смешение потоков для получения многокомпонентных смесей. Каждый из потоков внутри блока имеет строго один и вход и строго один выход (или не имеет последнего, если поток не отправляется на иные установки на предприятии).

Блок моделирования передает информацию о фактических загрузках установок и расходе утилит на блок расчета углеродоемкости предприятия. Отдельной статьей передается суммарная загрузка установок производства водородв за вычетом производимого на предприятии водородсодержащего газа (ВСГ). 2. Блок расчета углеродоемкости

Основной функционал блока состоит в расчете выбросов углекислого газа, связанных с деятельностью предприятия. Имеется несколько основных источников выбросов CO₂:

1) Прямые выбросы от сжигания топлива.

Определяются на основании следующих исходных данных:

- Состав топливного газа на установке.
- Удельный расход топлива на установке (импортируется из Блока моделирования).
- Загрузка установки по сырью (импортируется из Блока моделирования).

Выбросы от сжигания топлива рассчитываются по разработанной методике математическими методами и представляются в разрезе установок и типов топлива в Блоке представления результатов.

2) Прямые выбросы с установки производства водорода

Ввиду особенностей производства водорода паровой конверсией метана на предприятии подсчет его выбросов осуществляется отдельно по разработанной методике. Исходными данными для расчета является суммарная загрузка установок по водороду за вычетом ВСГ, получаемая из Блока моделирования.

3) Косвенные выбросы от потребления электроэнергии

Выбросы CO₂ от использования электричества зависят от источника энергии. В среде программы выбор энергоисточника осуществляется путем выбора необходимого пункта из выпадающего списка, статьями в котором являются: «Теплоэлектростанция», «Атомная электростанция», «Гидроэлектростанция», «Ветряная электростанция», «Солнечная электростанция». Расчет углеродоемкости осуществляется по разработанной методике, зависящей от потребления электроэнергии на установках, в свою очередь пропорциональной загрузке установки. Расход электричества на установках вводится пользователем в качестве исходных данных в кВт*ч/т сырья.

Допускается использование нескольких источников электроэнергии на предприятии. При этом пользователю всегда необходимо вводить долю использования электричества каждого из типов в % (100%, если источник один).

4) Косвенные выбросы от получения/производства перегретого пара

Выбросы CO₂ от получения перегретого пара рассчитываются по разработанной методике, в качестве исходных данных пользователем вводятся данные о расходе перегретого пара на каждой установке в кг/т сырья и составе газа, необходимого для его производства.

3. Блок представления результатов

В данном блоке конструируются результаты, основанные на данных, вводимых в Блоке моделирования и Блоке расчета углеродоемкости. Результаты представляются в виде отчета в формате, представленном ниже: 1) Выбросы по предприятию в разрезе установок:

Таблица 1 – Формат таблицы выбросов предприятия в разрезе установок

№ статьи	Статья выбросов	Значение, т СО ₂ -экв./сутки	Вклад в углеродоемкость установки, %
1	Прямые выбросы в результате сгорания топлива, из них	(сумма по пп. 1.1-1.3)	Отношение п. 1 к п. 4 в %
1.1	от газового топлива	По результатам расчета	Отношение п. 1.1 к п. 4 в %
1.2	от жидкого топлива	По результатам расчета	Отношение п. 1.2 к п. 4 в %
1.3	от кокса	По результатам расчета	Отношение п. 1.3 к п. 4 в %
2.	Косвенные выбросы от выработки электроэнергии	По результатам расчета	Отношение п. 2 к п. 4 в %
3.	Косвенные выбросы от получения водяного пара	По результатам расчета	Отношение п. 3 к п. 4 в %
4.	Общая углеродоемкость установки	(сумма по пп. 1-3)	100,00

Название установки (производительность, т/сутки)

Название установки (производительность, т/сутки)

... И т.д.

 Общие выбросы по предприятию в разрезе источников выбросов: Таблица 2 – Формат таблицы выбросов предприятия в разрезе источников выбросов

Общие выбросы по модели *Название модели* (*производительность*, т/сутки)

№ статьи	Статья выбросов	Значение, т СО ₂ -экв./сутки	Вклад в углеродоемкость
1	Прямые выбросы в результате сгорания топлива, из них	Сумма по пп. 1.1-1.3	Отношение п. 1 к п. 5 в %
1.1	от газового топлива	Сумма по выбросам от сжигания газового топлива на всех установках	Отношение п. 1.1 к п. 5 в %

1.2	от жидкого топлива	Сумма по выбросам от	Отношение п. 1.2 к п. 5 в %
		сжигания	
		жидкого	
		топлива на	
		всех	
		установках	
1.3	от кокса	Сумма по	Отношение п.
		выбросам от	1.3 к п. 5 в %
		сжигания кокса	
		на всех	
		установках	
2.	Прямые выбросы от	Сумма прямых	Отношение п. 2
	УПВ	выбросов от	кп. 5 в %
		работы УПВ на	
		всех	
		установках	
3.	Косвенные выбросы	Сумма	Отношение п. 3
	от выработки	косвенных	кп. 5в%
	электроэнергии	выбросов от	
		выработки	
		электроэнергии	
		на всех	
		установках	
4.	Косвенные выбросы	Сумма	Отношение п. 4
	от получения	косвенных	кп. 5в%
	водяного пара	выбросов от	
		получения	
		водяного пара	
		на всех	
		установках	
5.	Общая	Сумма по пп. 1-	100,00
	углеродоемкость	4	
	модели		

Отчет по результатам расчета имеет возможность экспорта в формате Excel и HTML.

1.1. Блок моделирования

Для осуществления основных функций Блока моделирования используются две базовые таблицы: таблица узлов и таблица потоков.

Таблица потоков представляет собой перечень всех потоков, фигурирующих на предприятии, включая сырье, промежуточные и торговые продукты. Каждому из потоков присваивается свое оригинальное Название-идентификатор, которое не может быть идентичным для двух и более потоков. Таблица потоков служит своеобразным словарем (перечнем), к которому программа обращается при составлении Материального баланса в Окнах установок. При начале работы с таблицей потоков в ней уже находится потоки «Водород» и «ВСГ». Данные потоки нельзя редактировать или удалить, поскольку они непосредственно связаны с расчетом выбросов от установки производства водорода. В случае, если на предприятии отсутствуют потоки водорода и/или ВСГ, их необходимо игнорировать.

Таблица узлов представляет собой перечень всех установок, присутствующих на предприятии, а также специальный узел – «Вход». Каждому из узлов (установок) присваивается собственное название, которое не может быть идентичным названию других установок. При двойном клике на любом из узлов открывается Окно установки, содержащее две вкладки: «Материальный баланс» и «Расход утилит». Вид вкладки «Материальный баланс» представлен ниже.

Установка Название установк	u	— 🗌 🗙		
Материальный баланс Расход	утилит			
Активное окно Кнопка открытия выпадающего списка для выбора материального потока				
+ Материальный поток	Расход, % масс.	Расход, т/сутки		
Баланс	0,00	0,00		

Рисунок 1 – Формат вкладки «Материальный баланс» Окна установки

Таблица 3 – Формат таблицы материального баланса установок (кроме узла «Вход»)

Материальный баланс установки Название установки

Материальный поток	Расход, % масс.	Расход, т/сутки
Сырьевой поток 1	50,00	500,00
Сырьевой поток 2	50,00	500,00
Продуктовый поток 1	-24,95	-249,50
Продуктовый поток 2	-25,05	-250,50
Продуктовый поток 3	-50,00	-500,00
Баланс	0,00	0,00

Примечание: здесь и далее желтым выделены редактируемые графы, серым – недоступные для редактирования.

Таблица 4 – Формат таблицы материального баланса узла «Вход»

Материальный баланс продуктов, поступающих на предприятие

Материальный поток	Расход, % масс.	Расход, т/сутки
Поток 1	-23,50	-235,00
Поток 2	-50,00	-500,00
Поток 3	-26,50	-265,00
Итого	-100,00	-1000,00

Все установки, за исключением узла «Вход», имеют в своем составе два типа потоков: сырьевые и продуктовые. Отличие одного типа от другого в среде программы обеспечивается путем задания материального баланса, в котором для сырьевых потоков указываются значения со знаком «плюс», а для продуктовых – со знаком «минус». Нижняя строка таблицы – «Баланс» – выдает сумму расходов всех входящих в материальный баланс потоков по % масс. и т в сутки. При верном задании всех параметров «Баланс» должен быть равен нулю. Выбор потоков, участвующих в процессе на каждой из установок, осуществляется путем множественного выбора статей из выпадающего списка, формируемого на основе Таблицы потоков.

Задание материального баланса для каждого из потоков осуществляется в % масс. В заблокированном для редактирования столбце («Расход, т/сутки») после нажатия кнопки «Рассчитать модель», находящейся на вкладке «Результаты», производится расчет расхода на основании загрузки установки по сырью и значений в редактируемом столбце.

Особенность узла «Вход» состоит в том, что в него входит только один из двух типов потоков – продуктовый, а также в том, что потоки в нем задаются в т/сутки. Данный узел предназначен для того, чтобы на его основе мог быть произведен дальнейший расчет материальных потоков и балансов в прочих установках.

Для узла «Вход» отсутствует возможность задания Расхода в % масс., а вместо строки «Баланс» установлена статья «Итого», значение в ней рассчитывается как сумма всех входящих в таблицу расходов материальных потоков. Все значения задаются со знаком «минус» (поскольку все потоки являются продуктовыми).

Вкладка «Расход утилит» Окна установки имеет следующий вид:

Установка Название	установки	— [X
Материальный баланс	Расход утилит		
	Расход утилит	Значение	
Топливо, т/т сь	ірья, в т.ч.:		
Газ			
Жидкое топли	во		
Кокс			
Электроэнерги	я, кВт*ч/т сырья		
Перегретый па	р, кг/т сырья		

Рисунок 2 – Вид вкладки «Расход утилит» Окна установки Таблица расхода утилит заполняется пользователем на основании исходных данных с использованием единиц измерения, представленных в заголовках строк.

1.2. Блок расчета углеродоемкости

Данный блок предназначен для введения данных и расчета выбросов CO₂, ассоциированных с деятельностью установок. Блок разделен на три основные вкладки: прямые выбросы от сжигания топлива, косвенные выбросы от потребления электроэнергии, косвенные выбросы от производства перегретого водяного пара. Вид Блока расчета углеродоемкости представлен ниже.

Модель Название модели					-		X
Файл Сохранить Помощь	Активн	ое окно	Клик Резу	для переключения на вкладку льтатов			
Моделирование Углеродоемкость			Результат При наведении курсора на кнопку «Углеродоемкость» открывается				
	Топливо	4		выпадающий список, из которого можно выбрать необход	имую вкла	адку	
Выберите установку	Электроэнергия		<mark>ا</mark>	Тринять состав газа равным составу на уста	новке.		
	Пар			Массовая доля, %			
	H ₂						
	СО						
	CO ₂						
	CH ₄						
	C ₂ H ₆						
	C ₂ H ₄						
	C ₃ H ₈						
	<u>C₃H₆</u>						
	C ₄ H ₁₀						
	C ₄ H ₈	_					
	<u>п₂5</u> СОS						
	<u> </u>						
	H ₂ O						
	C ₆						
	Итого						

Модел	ъ <i>Название</i>	модели							X
Файл	Сохранить	Помощь	Выпадающий список с перечнем установок, поименованных в таблице узлов						
	Моделирова	ние	Углеродоемкость			Результат		Позволяет импортировать состав из таблицы другой установк	и
Выб	ерите устано	овку		•	V]	П	ринять состав газа равным составу на установке	
			Компонент				N	Массовая доля, %	
			H ₂						
			CO ₂						
			CH ₄						
			C ₂ H ₆						
			C ₂ H ₄						
			C_3Hg						
			C ₄ H ₁₀						
			C ₄ H ₈						
			NH ₃						
			N ₂ +Ar						
			H ₂ S						
			H ₂ O						
			C ₅						
			Итого						

б)

Рисунок 3 – Вид блока расчета углеродоемкости программы: а) – с открытым выпадающим списком выбора вкладок; б) – с закрытым выпадающим списком (вкладка «Топливо»)

Прямые выбросы от сжигания газового топлива рассчитываются по следующему алгоритму:

1. Пользователем вводятся данные о компонентном составе топливного газа в % масс.

2. На основании удельного расхода топливного газа на установке и загрузке установки по сырью, заданных в Блоке моделирования, и п. 1 рассчитывается расход каждого из компонентов топливного газа.

3. По заданным в базе программы молекулярным массам компонентов и стехиометрическому соотношению входящих в реакцию веществ рассчитывается требуемое на сжигание количество кислорода.

4. На основании п.3 рассчитывается состав компонентов дымового газа и его расход.

5. Объем выделившегося CO₂ от сгорания газового топлива на установке записывается в Блок представления результатов.

Для облегчения работы существует возможность импортировать состав газа из другой установки. Для этого после нажатия кнопки «Принять состав газа равным составу на установке...» открывается окно выбора установки, состав газа которой необходимо импортировать.

Прямые выбросы от сжигания жидкого топлива рассчитываются на основе данных о сжигании мазута как наиболее часто используемого жидкого топлива на нефтеперерабатывающих предприятиях. В среде программы расчет осуществляется исходя из данных об удельном расходе жидкого топлива на установках и их загрузке по сырью, введенных в Блоке моделирования, и специального коэффициента пересчета.

Косвенные выбросы от потребления электроэнергии напрямую зависят от источника получения электричества. В программе предусмотрен выбор одного или

нескольких источников электроэнергии на предприятии, которые выбираются пользователем на основе множественного выбора из выпадающего списка. После выбора типа электроэнергии возникает таблица, в которой необходимо задать долю всех типов в структуре предприятия (рисунок 4).

Модель Название модели			- 🗌 🗙
Файл Сохранить Помощь			
Моделирование	Углеродоемкость	Результат	
		- Выпалающий с	NUMPOK
Выберите тип электроэнерг	ии	V	
Теплоэлектростанция		V	
Атомная электростанция			
Гидроэлектростанция		V	
Ветряная электростанция		Возможность Множественного	выбора
Солнечная электростанция			
Модель Название модели Файл Сохранить Помощь		a)	X
Моделирование	Углеродоемкость	Результат	
Выберите тип электроэнерги	ш	V	
Источник электро:	энергии Доля в стр	руктуре предприятия, %	
Теплоэлектростанция			
Гидроэлектростанция			
Итого		0,00	
		б)	

Рисунок 4 – Вид Блока расчета углеродоемкости (вкладка расчета выбросов от производства электроэнергии): а) выбор источника электроэнергии; б) указание доли электроэнергии определенного типа в структуре предприятия.

После указания типов электроэнергии и их долей в структуре программа рассчитывает выбросы, связанные с производством каждого из них, в

соответствующих пропорциях и выдает результат в Блоке представления результатов.

Расчет углеродоемкости получения перегретого пара на установках производится на основе данных о его удельном расходе на установках, заданных в Блоке моделирования, свойствах – температуре и давлении, – компонентном составе газа, сжигаемого для нагрева воды и пара, и коэффициенте полезного действия (КПД) парогенератора или печи (рисунок 5). Предусмотрена возможность дублирования состава топливного газа из вкладки «Топливо» Блока расчета углеродоемкости.

Моде	пь Название	е модели					-	X
Файл	Сохранить	Помощь						
	Моделирова	ние	Углеродоемкость	Результат				
Co	став топли	зного газа,	используемого для получен	ия пара				
	Компо	онент	Массовая до	оля, %				
	Н	2						
	C	0						
	C(D ₂				Принять состав газа равным		
	Cł	H ₄				топливному газу на установке		
	C ₂	H ₆						
	C ₂	H ₄						
	C ₃	H ₈						
	C ₃	H ₆			Про	чие параметры:		
	C ₄ ł	H ₁₀						
	C ₄	H ₈						
	Nł	H ₃			Дав	вление пара, Мпа		
	N ₂ +	Ar						
	H2	S						
	CC)S			Тем	пература пара, °С		
	S	D ₂						
	H ₂	0						
	C	5			КПД	ц парогенератора/печи, %		
	Ито	ого						

Рисунок 5 – Вид вкладки расчета выбросов от генерации перегретого пара

Расчет углеродоемкости парогенерации осуществляется по следующему алгоритму:

1. Пользователем вводятся данные о компонентном составе топливного газа в % масс., температуре и давлении перегретого пара, КПД парогенератора или печи.

2. На основании введенного давления по установленным зависимостям программой рассчитываются значения температуры кипения, удельной энтальпии и теплоемкости пара.

3. На основе введенного значения температуры рассчитывается количество тепла, требуемого на перегрев и генерацию водяного пара.

4. Производится расчет теплотворной способности топлива на введенный компонентный состав.

5. Расчет количества топлива на генерацию водяного пара.

6. Расчет выбросов CO₂ при генерации водяного пара с помощью удельного значения выбросов и расхода пара на установке.

Эмиссии CO₂ от работы установки производства водорода рассчитываются программой автоматически на основе суммарного расхода водорода на установках предприятия за вычетом производства ВСГ по следующему алгоритму:

1. Программа составляет сводную таблицу производства ВСГ и потребления водорода на установках в виде:

Материальный поток	Расход, т/сутки	Расход с поправкой на долю водорода в ВСГ, т/сутки
Поток ВСГ	-50,00	-40,00
Поток водорода	55,00	55,00
Итого	-	15,00

В таблицу сводятся данные о потоке ВСГ, образующемся на установках предприятия (со знаком «минус»), и потоке водорода, затрачиваемого на установках (со знаком «плюс»). Каждый из расходов является суммой соответствующих значений со всех установок.

2. Значение расхода ВСГ умножается на поправочный коэффициент, учитывающий среднее содержание водорода в ВСГ.

3. Итоговое значение суммы двух потоков соответствует значению водорода, которое необходимо получить на установке производства водорода и равняется ее загрузке.

4. Выбросы CO₂ на УПВ рассчитываются по разработанной методике через коэффициент выхода CO₂.

В случае, если значение в строке «Итого» оказывается отрицательным, программа принимает его равным нулю.

Стоит отметить, что программа не учитывает выбросы парниковых газов, связанные с утечками на производстве (утечки метана). Данная статья хоть и может иметь значительный вклад в углеродоемкость эксплуатации предприятия, но не является сколько-либо прогнозируемой.

1.3. Блок представления результатов

Блок представления результатов предназначен для свода данных, рассчитанных программой, в единую вкладку, вид которой представлен на рисунке 6.

Предоставление результатов пользователю осуществляется после введения всех исходных данных и нажатия кнопки «Рассчитать модель» на вкладке «Результат». При этом модель должна удовлетворять следующим признакам:

– Все значения строки «Баланс» в Материальных балансах установок равны нулю.

– Сумма долей компонентов топливного газа равна 100%.

– Сумма долей различных видов электроэнергии в структуре предприятия равна 100%.

– Вводимое значение КПД парогенератора/печи равно 100%.

При невыполнении любого из признаков пользователю высвечивается соответствующая ошибка.

Модель Название модели — 🗌 🗙									
Файл	Сохранить	Помощь							
Моделирование Углеродоемкос			гь Результат				:		
Результат расчета модели Название модели Общие выбросы по модели Название модели (производительность, т/сутки)							Обновить расчет Ползунок модели		Ползунок
№ стат	ьи	Статья выбросов			ачение, т СО ₂ /сутки	Е углер мс	клад в одоемкость одели, %		
1	Прямые топлива	Прямые выбросы в результате сгорания топлива, из них							Прокрутка вниз
1.1	от газов	от газового топлива							
1.2	от жидко	от жидкого топлива							для показа всех
1.3	от кокса	от кокса							
2.	Прямые	Прямые выбросы от УПВ							
3.	Косвенн электро:	Косвенные выбросы от потребления электроэнергии							
4.	Косвенн пара	Косвенные выбросы от получения водяного пара							
5.	Общая углеродоемкость модели						100,00		
							Экспорт	BHINL	Skchopt B Excel

Рисунок 6 – Общий вид Блока представления результатов

2. ИСХОДНЫЕ И ВЫХОДНЫЕ ДАННЫЕ

Исходными данными для расчета выбросов парниковых газов на предприятии являются:

1. Загрузка предприятия по сырью в т/сутки.

- 2. Материальные балансы установок, сходящих в состав схемы предприятия.
- 3. Расход топлива на единицу сырья для каждой из установок.
- 4. Расход электроэнергии на каждой из установок.
- 5. Расход перегретого водяного пара на каждой из установок.

6. Состав топливного газа для использования в качестве топлива на установках.

7. Коэффициент избытка воздуха при сжигании топливного газа.

8. Состав топливного газа для перегрева пара.

9. Давление перегретого пара.

10. Температура перегретого пара.

11. Коэффициент полезного действия парогенератора или печи, предназначенных для генерации и нагрева пара.

12. Источники генерации электроэнергии для предприятия и их доля в структуре предприятия.

В качестве выходных данных программа выдает отчет, содержащий общие выбросы парниковых газов на предприятии (в т CO₂), а также их же в разрезе:

 Источника выбросов (прямые выбросы от сгорания топлива с распределением по виду топлива, прямые выбросы от работы УПВ, косвенные выбросы от генерации электричества, косвенные выбросы от получения перегретого пара)

– Установок (отдельная таблица для каждой из установки с разбивкой по источникам выбросов)

Данный отчет может быть экспортирован в формате MS Excel или HTML.