

Поскольку математическое моделирование основывается на данных экспериментов, возникают этапы (в, г), требующие уточнения параметров уравнений модели, которые будут использованы при расчетах промышленных объектов. На этих этапах математического моделирования широко привлекаются данные, полученные на аналогичных укрупненных или промышленных установках.

Обработку экспериментальных данных с целью получения расчетных зависимостей выполняют с привлечением безразмерных критериев подобия, позволяющих применять уравнения для целого класса подобных процессов (аппаратов). Если уравнения модели достаточно хорошо разработаны и их форма удобна для расчетной инженерной практики, то параметры соответствующих уравнений определяют на основе экспериментальных данных.

В настоящее время пользователям персональных ЭВМ предлагаются различные программы для математического моделирования процессов и аппаратов нефтегазопереработки и нефтехимии. Большая часть предлагаемых программ включает как минимум три составляющих: "библиотеку" баз данных по свойствам индивидуальных компонентов, составленную Институтом по расчетам физических свойств (Design Institute for Physical Property Research) и (или) Американским институтом инженеров химиков (American Institute of Chemical Engineers) и др.; средства для обработки информации с применением одного или нескольких методов расчета; алгоритмы для синтеза данных по физическим свойствам, например с помощью метода регрессии.

Американская компания Simulation Sciences Inc. (Бри, шт. Калифорния) разработала несколько программ для инженерных расчетов в нефтеперерабатывающей, химической и газовой промышленности, среди которых можно выделить PRO/II для моделирования и оптимизации технологических процессов, HEXTRAN для моделирования систем теплообмена, INPLANT для расчета заводских трубопроводов, PROTISS для динамического моделирования и др. Программы компании Simulation Sciences Inc дополнены графическим интерфейсом PROvision на базе Microsoft Windows, облегчающем ввод и анализ данных по моделированию.

Интегрированный пакет программ под названием Nysus для статического и динамического моделирования разработала канадская фирма Hyprotech Ltd. (Калгари, пров. Альберта). Вся система Nysus для повышения ее приспособляемости и универсальности была переписана на языке C++.

Можно отметить также пакет программ ChemCad III американской компании Chemstations Inc. (Хьюстон) и моделирующую программу Prosim компании Bryan Research & Engineering (Брайен, шт. Техас), разработанную в основном для нефтегазовой промышленности. Программа Prosim позволяет решать задачи, связанные с разделением сырой нефти и переработкой природного и нефтяного газа, например обезвоживания гликолями, выделения и фракционного разделения жидких нефтяных газов. Её аналог Tsweet предназначен специально для процессов очистки газов аминами.