

Opracował dr hab. inż. Andrzej Kaim, prof. UW

## Ćwiczenie 11

→ CHEMCAD WAS DEVELOPED TO  
BROADEN AN ENGINEER'S CAPABILITIES



### Wstęp

Pakiet programów CHEMCAD firmy Chemstations Inc. należy do nowoczesnych programów stosowanych w Komputerowo Wspomaganej Inżynierii Procesowej (*ang. Computer Aided Chemical Engineering - CACHÉ*) zwanych symulatorami procesów przemysłowych znajdujących zastosowanie w przemyśle naftowym i gazowym, petrochemii, biopaliw i produkcji chemikaliów (w tym, w przemyśle farmaceutycznym). ChemCad pozwala na modelowanie ponad 95% zadań technologicznych spotykanych w przemyśle chemicznym. Siedzibą korporacji jest Houston w Teksasie (USA). Firma posiada sieć przedstawicielstw i ekspertów w 66 krajach.



Poza CHEMCADem do popularniejszych pakietów w inżynierii chemicznej należą:

AspenTech



ProVision GUI Package



For Windows



Niekiedy owe pakiety programowe zwane są w języku polskim (niezbyt fortunnie) symulatorami flowsheetingowymi, choć bardziej poprawnie powinno się je nazywać symulatorami procesowymi. CHEMCAD należy do programów CAD (Computer-Aided Design) stosowanych szeroko przy projektowaniu. Poza CHEMCADem znanych jest szereg innych programów typu CAD jak AutoCAD, DesignCad czy ArchiCad. Poza grupą programów CAD znane są programy typu CAE (Computer-Aided Engineering) oraz CAM (Computer-Aided Manufacturing). Wszystkie one pozwalają projektantom, inżynierom i technikom projektować, dokumentować i realizować technologie szybciej i dokładniej, często przy jednoczesnym wykorzystaniu wewnętrznej sieci komputerowej przedsiębiorstwa.

Profesjonalne programy symulacyjne są zwykle bardzo drogie i pozostają własnością producenta a ich użytkowanie jest odpłatne. Posiadają skuteczne zabezpieczenia (tzw. kości) przed nielicencjonowanym użytkowaniem.

CHEMCAD w wersji 6.x jest kolejną wersją programu pracującego pod kontrolą systemu operacyjnego Windows firmy Microsoft, co czyni go intuicyjnym i przyjaznym w użytkowaniu a także kompatybilnym z innymi popularnymi aplikacjami pracującymi pod kontrolą tego środowiska, na przykład pakietem Microsoft Office.

Profesjonalne pakiety typu CHEMCAD symulacyjne służą do matematycznego modelowania pracy zarówno pojedynczych aparatów jak i symulacji złożonych procesów technologicznych stosowanych w przemyśle chemicznym, petrochemicznym, farmaceutycznym i w ochronie środowiska.

CHEMCAD 6 składa się z 6 modułów (części) zarządzanych jednym programem. Każdy z modułów wymaga osobnej, odnawialnej (zwykle corocznie) licencji

Obecnie w skład CHEMCADA 6 wchodzi następujące moduły:

**MCADA 6 wchodzi następujące moduły:**

**CC-STEADY STATE**

Główny składnik ChemCada. Służy do projektowania, wyznaczania szybkości i optymalizacji procesów w warunkach równowagowych.

**CC-DYNAMICS**

Służy do projektowania i wyznaczania szybkości procesów zmiennych w czasie (dynamicznych). Moduł ten jest całkowicie zintegrowany z pozostałymi elementami ChemCada, co pozwala na łatwe przełączanie z warunków dynamicznych na równowagowe, i na odwrot.

Moduł jest narzędziem bardzo uniwersalnym, pozwala na symulacje urządzeń o zróżnicowanym stopniu skomplikowania: od prostych zbiorników akumulacyjnych co kompleksowej kontroli systemu kolumn. Jest dogodnym narzędziem symulacyjnym reaktorów przepływowych z mieszaniem (CSTR) z uwzględnieniem szybkości złożonych reakcji chemicznych oraz ciśnienia roboczego.

**CC-BATCH**

Przeznaczony do projektowania, wyznaczania szybkości i

optymalizacji kolumny  
destylacyjnej periodycznej.

#### CC-THERM

do symulacji pojedynczych  
wymyenników ciepła  
płaszczowych, płytowych i typu  
„rura w rurze”.

#### CC-SAFETY-NET

do symulacji sieci przesyłowych (rur),  
systemów bezpieczeństwa  
pracujących zarówno w trybie  
równowagowym jaki  
dynamicznym.

#### CC-FLASH

Zawiera bazy danych  
fizykochemicznych substancji i  
równowag fazowych oraz  
pozwala na estymacje  
właściwości fizykochemicznych  
układów i ich regresje. CC-  
FLASH jest częścią CC-STEADY  
STATE i przeznaczony jest dla  
użytkowników mniej obeznanych  
z symulatorami procesowymi.

Symulator procesowy CHEMCAD  
można stosować zarówno w  
dotknięciu do nieskomplikowanych  
procesów nieciągłych jak i do wielkich  
chemicznych procesów  
technologicznych pracujących w sposób  
ciągły. Firma Chemstations Inc. szacuje,  
że pakiet CHEMCAD używany jest w  
ponad 400 czołowych firmach  
światowych jako podstawowe  
oprogramowanie do symulacji  
procesowej, z czego co najmniej 90%  
odnawia corocznie prawo do jego  
użytkowania.

Obliczenia symulacyjne przy pomocy  
symulatora CHEMCAD można w  
szczególności prowadzić w celu  
rozwiązywania problemów związanych  
m. in. z takimi procesami i operacjami  
jak:

Destylacja/Ekstrakcja (tryb ciągły i  
nieciągły)

Reakcje (tryb ciągły i nieciągły)

Procesy elektrolityczne

Obliczenia własności termicznych i  
fizycznych

Obliczenia równowag para/ciecz /ciecz

Skalowanie aparatury

Wymiana ciepła

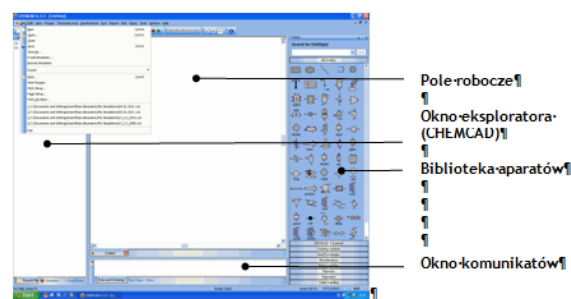
Obliczenia dot. ochrony środowiska

Analiza ryzyka (bezpieczeństwa)

Sporządzanie kosztorysów

## ORGANIZACJA EKRANU

Po uruchomieniu programu  
CHEMCAD 6 otwiera się następujący  
ekran:

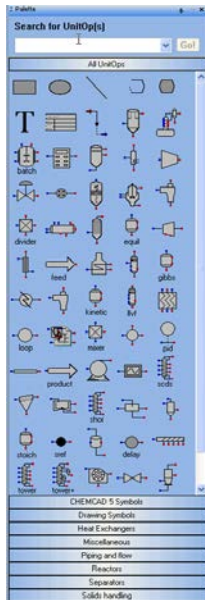


### Pole robocze

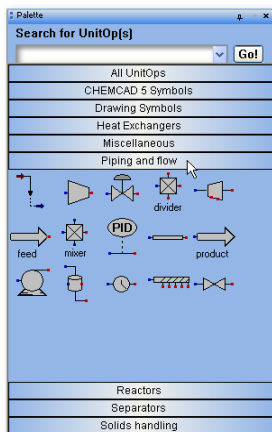
Pole robocze przeznaczone jest do  
rysowania ew. otwierania poprzednio  
zapamiętanych schematów przepływów  
i przeglądania rysunków. Poniżej pola  
roboczego widoczny jest pasek  
informujący o otwartych dokumentach  
(schematach itp.) wraz z ich przyciskami  
zamknięcia x.

### Biblioteka aparatów

Po prawej stronie ekranu umieszczona  
jest **Biblioteka aparatów** zatytułowana  
**Palette** zawierająca ikony aparatów i  
narzędzi niezbędnych do rysowania  
schematów. Ikony te są pogrupowane  
według funkcji i rodzaju urządzeń.  
Domyślne ustawienie nazwane **All  
UnitOps** zawiera wszystkie dostępne  
ikony i narzędzia rysowania.



W celu przełączenia się na inny zestaw aparatów należy nacisnąć zakładkę z zestawem aparatów danego typu. Wybrany zestaw rozwija się po najechaniu na niego myszką jak pokazano poniżej dla zestawu Piping and Flow (np. Orurowanie i przepływy): Poszukując jakiegoś aparatu należy wpisać nazwę szukanego aparatu na wolnym polu poniżej **Search for UnitOp(s)** > i nacisnąć **Go!**



### Okno komunikatów

Okno komunikatów zawiera trzy przyciski: **Errors and Warnings**, **Run Trace** i **Notes**.



**The Errors and Warnings** wyświetla aktualną listę błędów i ostrzeżeń wygenerowanych podczas bieżącej symulacji. Najstarsze znajdują się na górze listy. Jeśli komunikatów jest za

dużo by je wyświetlić (widoczne są ostatnie komunikaty) starsze są również dostępne po ich rozwinięciu.

**Run Trace** wyświetla komunikaty diagnostyczne dla każdej jednostki UnitOp każdorazowo po uruchomieniu symulacji. Informacja ta jest bardzo pomocna, szczególnie w sytuacji, kiedy symulowany proces nie działa właściwie. Tekst nie jest zapisywany wraz z projektem lecz odświeża się po każdym uruchomieniu symulacji.

**Notes** Jest to miejsce do zapisywania dodatkowych informacji o symulacji w formie tekstowej zapamiętywanej z symulacją. Kasowanie przy pomocy klawisza **[delete]** na klawiaturze.

### NOWY PROJEKT

#### Kolejne etapy symulacji dowolnego procesu przy użyciu programu CHEMCAD

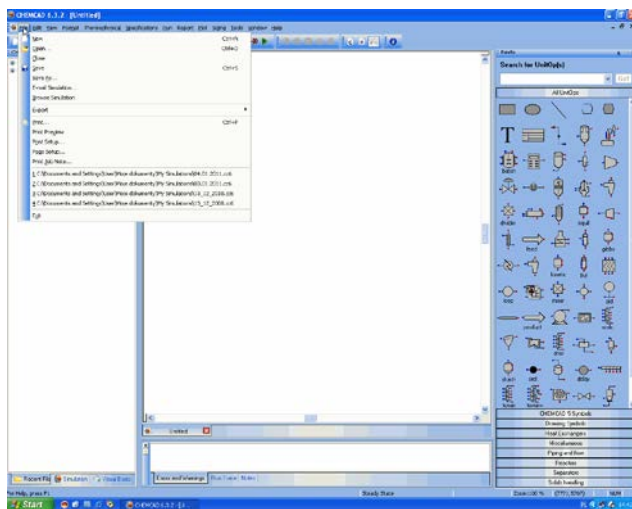
- narysuj schemat instalacji dla badanego procesu technologicznego
- wybierz z listy reagenty biorące udział w procesie
- wybierz odpowiedni model termodynamiczny (parametr K) i opcje entalpowe procesu
- podaj specyfikacje strumieni zasilania
- określ parametry operacji jednostkowych występujących w procesie
- wykonaj obliczenia
- sporządź dokumentację (schemat instalacji + wyniki tabelaryczne)

## PRZYKŁAD PROJEKTU:

Rozdzielanie mieszaniny n-heksan/cykloheksan przy pomocy kolumny rektyfikacyjnej pracującej w sposób ciągły

Z paska linia poleceń wybieramy File, a następnie New:

Wybieramy nazwę dla naszego nowego projektu, np. **Nazwisko\_data**



Symulacje zapisane na dysku mają rozszerzenia .CC6.

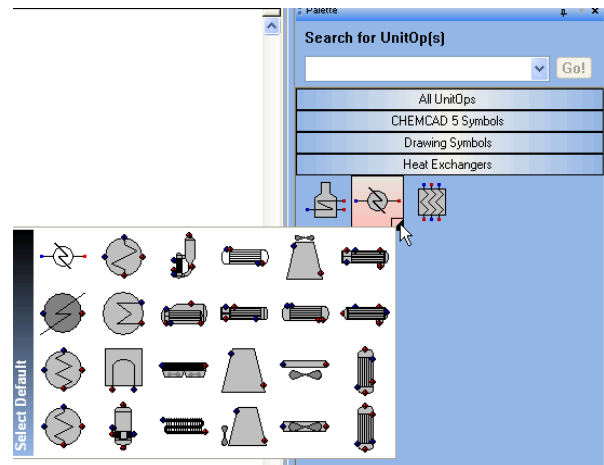
## RYSOWANIE SCHEMATU TECHNOLOGICZNEGO

### APARATY I URZĄDZENIA

Aparaty i urządzenia, w których przebiegają operacje i procesy jednostkowe są przedstawione za pomocą uproszczonych symboli graficznych (ikon) identyfikujących obiekt, lecz z pominięciem szczegółów konstrukcji i bez zachowania proporcji do rzeczywistych rozmiarów.

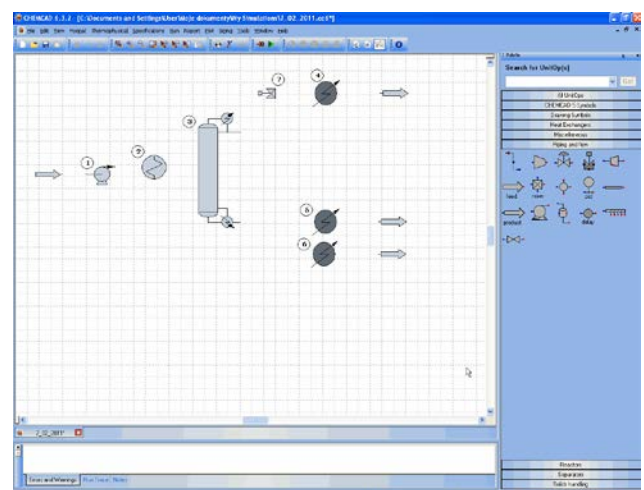
Należy zwrócić uwagę na właściwy dobór aparatów pamiętając, że dla niektórych z nich dostępne są różne ich

wersje widoczne po naciśnięciu lewego przycisku myszy na zagięty prawy dolny róg pola aparatu. Przykładowo, poniżej pokazane są dostępne typy wymienników ciepła typu Heat Exchanger #1:



Po najechaniu kursorem na symbol pojawia się jego nazwa. Ponowne naciśnięcie przyciskiem myszy na pole wyboru kończy możliwość wyboru danego aparatu.

Korzystając z biblioteki aparatów wybieramy odpowiednie aparaty i umiejscawiamy je kolejno na Polu roboczym. W ten sposób budujemy schemat technologiczny dla naszego procesu. W celu ułatwienia pozycjonowania ikon można, korzystając z przycisku **View>Grid visible** zastosować siatkę:



Proszę zauważyć, że każdemu aparatowi nadawany jest numer na okrągłym polu. Nie należy zmieniać położenia tych numerów oraz numerację zaproponowaną przez ChemCada.

## Manipulowanie ikonami aparatów i urządzeń

Po narysowaniu ikon można nimi manipulować, to znaczy:

- przesuwać klikając uprzednio na ikonę kursorem
- zmieniać ich wielkość naciskając na jeden z uchwytów pojawiających się po naciśnięciu na ikonę
- usuwając ikonę naciskając na prawy przycisk myszy i wybierając opcję Delete lub wybierając [Delete] na klawiaturze.

## STRUMIENIE

Narysowane ikony należy następnie połączyć w logicznej kolejności (tzn. zgodnie ze kolejnością w schemacie technologicznym) przy pomocy strumieni.

Linie strumieni materiałowych i energetycznych wskazują kierunek przepływu materiałów i kolejność ich przerobu w poszczególnych stadiach danego procesu.

W trakcie rysowania strumieni obowiązują kilka zasad:

1. Strumienie rysujemy zgodnie z kierunkiem ich przepływu, tj. od źródła (zasilania) do aparatu przeznaczenia.
2. Każdy aparat posiada miejsce (lub miejsca) wlotu (niebieskie) i wylotu (czerwone) strumieni, które stają się widoczne w momencie, kiedy w pobliżu znajduje się kursor. Program automatycznie wskazuje te miejsca po najechnięciu kursorem na aparat.
3. Po wyborze z biblioteki opcji rysowania strumieni kursor przekształca się w mały czarny krzyżyk. Należy

najechnąć kursorem na miejsce wylotu w aparacie zasilającym, wówczas kursor zamienia się w małą czarną strzałkę wskazującą przecięcie dwóch ruchomych osi.

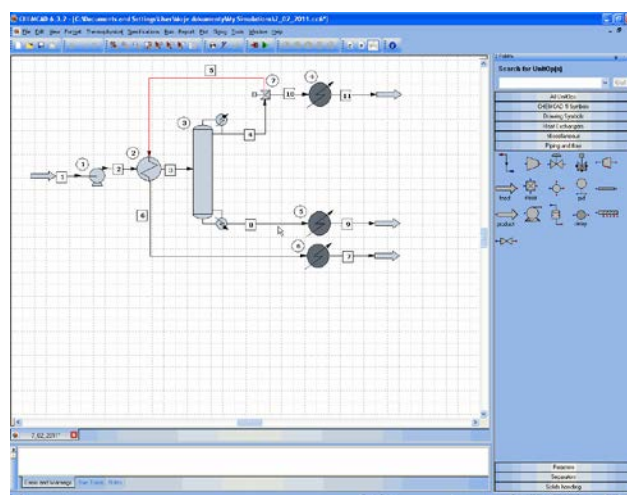
4. W trakcie prowadzenia strumienia do aparatu docelowego kursor pozostaje czarną strzałką. W pobliżu miejsca wpływu strumienia do aparatu docelowego na aparacie pojawia się miejsce wlotu (małe kółeczko). Wprowadzenie strumienia do aparatu docelowego uzyskujemy naciskając lewy przycisk myszy.

5. Można zmieniać pozycję uprzednio narysowanych strumieni "chwytając" (podwójne kliknięcie lewym przyciskiem myszy) strumień i przeciągając go na nowe miejsce.

6. Aby narysować kilka strumieni nie jest konieczne ponowne wybranie tej opcji z biblioteki opcji rysowania strumieni.

7. Dwukrotne kliknięcie lewym przyciskiem myszy kończy tryb rysowania strumieni.

Gotowy schemat technologiczny dla procesu **Rozdzielania mieszaniny n-heksan/cykloheksan przy pomocy kolumny rektyfikacyjnej** wygląda następująco:

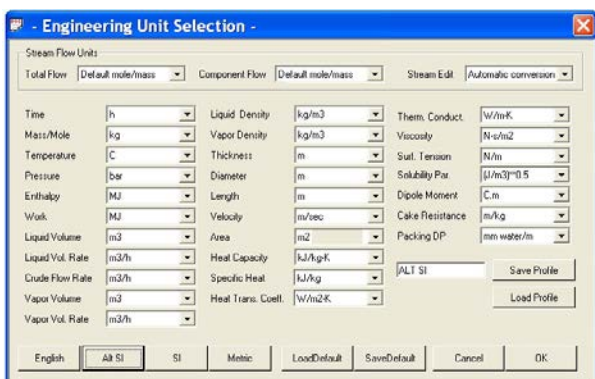


Należy zauważyć, że narysowane aparaty i strumienie otrzymują automatycznie kolejne numery (aparaty w kółku, strumienie w kwadracie).

Numery te można przesuwać i edytować, ale nie należy zmieniać ich pierwotnego przyporządkowania.

## WYBÓR JEDNOSTEK

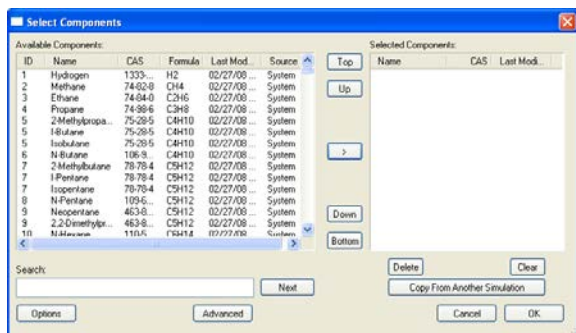
W celu wyboru odpowiedniego systemu jednostek należy wybrać polecenie **Format** a następnie **Engineering Units**. Należy wybrać odpowiedni zestaw jednostek i posługiwać się nim konsekwentnie podczas dalszej pracy nad projektem.



## WYBÓR REAGENTÓW

Z linii poleceń należy wybrać **ThermoPhysical** a następnie opcję **Component List**.

Pojawia się okno dialogowe:



Należy wpisać do okienka **Search for** angielską nazwę reagenta a następnie kliknąć przycisk **Add**.

### UWAGA

Kolejność wpisywania reagentów (składników) może nie być obojętna. Np. dla rozdzielania mieszanin przy pomocy

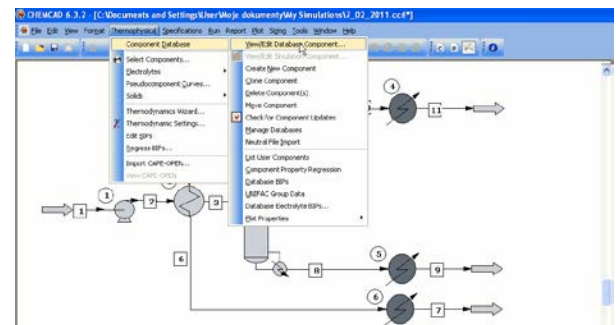
rektyfikacji należy wpisać – zgodnie z obowiązującą konwencją - składnik bardziej lotny jako pierwszy.

Jeśli nie jesteśmy pewni, który składnik z badanego układu jest bardziej lotny można skorzystać z **Banku danych**.

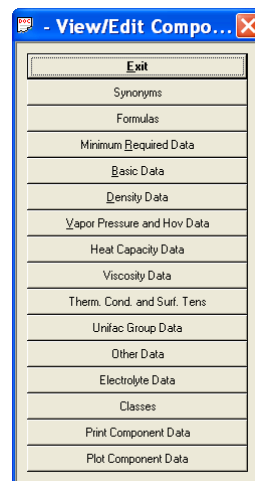
W tym celu należy wybrać **ThermoPhysical** a następnie opcję **Databank**

i kolejno **View-Edit**.

Po wpisaniu w okienko **Search** nazwy związku, którego właściwości chcemy poznać i zatwierdzeniu (**Ok**)

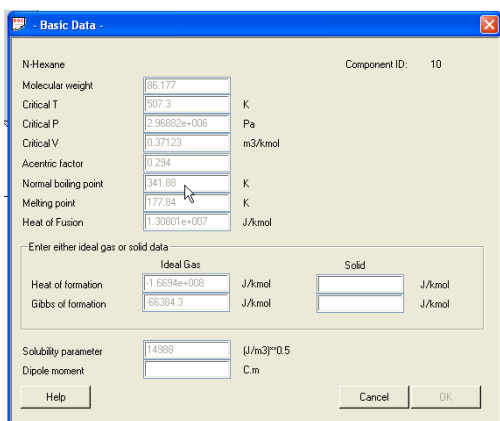


pojawia się okienko dialogowe



wybierając **Basic Data** otwieramy okienko z podstawowymi danymi na temat wybranego związku chemicznego.





Po uzyskaniu informacji o interesujących nas własnościach (np. temperatury wrzenia pod danym ciśnieniem) wybranego związku chemicznego możemy zakończyć etap **Wyboru Reagentów** powracając (ew. otwierając go po raz pierwszy) do okienka dialogowego **Select Components**.

## Wybór parametru K i opcji entalpowych

Wybór modelu termodynamicznego oznacza w przybliżeniu wybór modelu lub metody stosowanych do obliczeń opisujących równowagę fazową typu ciec-z-para (lub ciec-z-ciecz-para) (tzw. **the K-value option**) oraz wybór modelu lub metody stosowanej do obliczeń bilansu energetycznego (tzw. **the enthalpy option**).

W tym celu należy wybrać polecenie **ThermoPhysical** z linii poleceń (to samo, które użyliśmy do wyboru reagentów).

CHEMCAD posiada w bibliotece ok. 50 modeli **K-value** z wieloma dodatkowymi opcjami oraz ok. 12 modeli entalpowych do obliczania bilansu energetycznego.

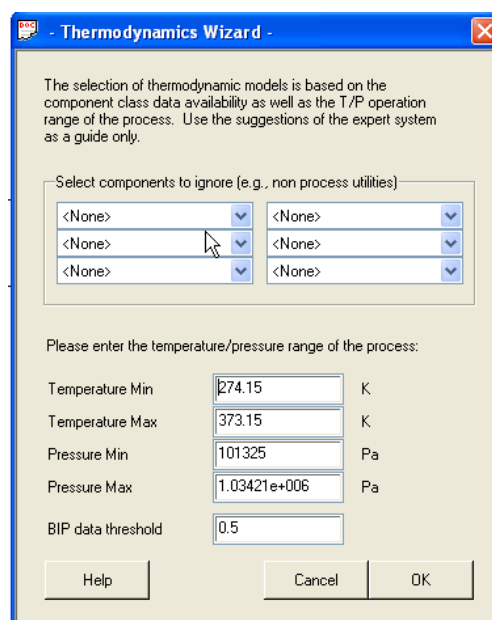
W związku z tym odpowiedni wybór modeli może niekiedy nastroczać pewnych trudności. Problemy te, wraz z poprawnymi technikami wyboru obu typów modeli, opisano dokładnie w rozdziale **Thermodynamics** w podręczniku „manual on-line”. Ponadto, CHEMCAD wyposażony jest w system ekspertcki, który pomaga wybrać

odpowiednie modele termodynamiczne. System ten nazywa się **Thermo Wizard** i jest również dokładnie opisany we wspomnianym podręczniku.

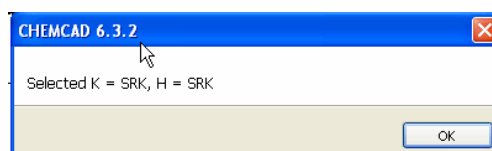
Użyjmy systemu eksperckiego do wyznaczenia **K-value option**.

W tym celu z linii poleceń wybieramy **ThermoPhysical** a następnie opcję **K-Value Wizard**.

Pojawia się okienko **Thermodynamic Wizard**, w którym potwierdzamy (lub modyfikujemy podane wartości domyślne) zakresy temperatury i ciśnienia, jakie przewidujemy w naszym procesie:



Po potwierdzeniu **OK** pojawi się propozycja dla obu modeli:



Po potwierdzeniu **OK** pojawia się okienko **K Value Options**

**UWAGA:** Należy użyć pomocy (HELP) by dowiedzieć się jakie modele termodynamiczne zostały zaproponowane i zaakceptowane, tj. jakie modele termodynamiczne kryją

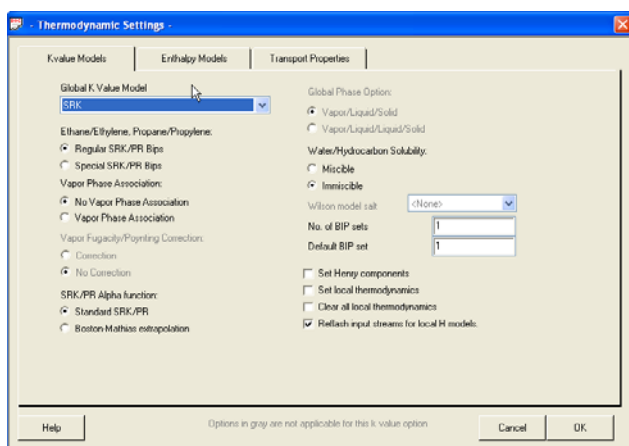
się za skrótami nazw tych modeli (np. co oznacza skrót SRK)

Po potwierdzeniu OK pojawia się okienko K Value Options

Należy uważnie przyglądać się czy opcje termodynamiczne, które zostały zaproponowane pasują do naszego układu.

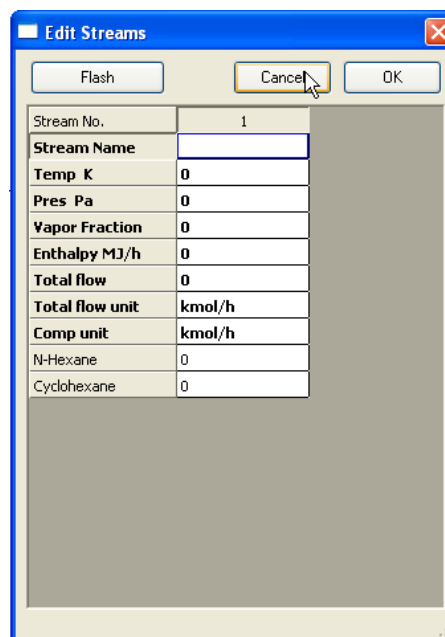
Jeśli zgodzimy się na zaproponowane opcje naciskając OK co oznacza, że wybieramy równanie Soave-Redlich-Kwonga, które jest bardzo efektywne w estymowaniu parametrów **K (K-values)** dla układów złożonych z węglowodorów pod średnimi i wysokimi ciśnieniami.

Proszę zauważyć, że zawsze aktywny jest przycisk **Help**. Pozwala on na uzyskaniu wyczerpującej informacji dot. opcji zawartych w aktywnym oknie.



## SPECYFIKACJA STRUMIENI ZASILANIA

Podwójne kliknięcie strumienia, który mamy zdefiniować (wyspecyfikować) otwiera okno **Edit Streams**. Należy wypełnić aktywne (edytowalne) pola okna jak przykładowo pokazano dla strumienia 1



Poza pierwszym polem (**Stream Name**) cztery kolejne pola przeznaczone są kolejno dla temperatury, ciśnienia, ułamka fazy gazowej i entalpii, czyli czterech parametrów termodynamicznych opisujących strumień 1.

Zgodnie z regułą faz Gibbsa dla danego składu wystarczą dwa z czterech parametrów by opisać stan termodynamiczny strumienia. Zatem należy określić dowolne dwa z czterech wymienionych parametrów, przykładowo temperaturę i ciśnienie.

Zgodnie jednak z zasadami przyjętymi przez CHEMCAD entalpię strumienia oblicza sam program, choć w szczególnych przypadkach wartość entalpii może narzucić operator programu.

Dla czystych składników (niemieszanin) niekiedy wymagane jest określenie trzech parametrów termodynamicznych. Opcja **Comp(osition) unit** dopuszcza różne możliwości określania składu mieszaniny, dostępne po kliknięciu żółtego pola tego parametru. Po wybraniu jednej (ułamek molarowy, masowy, objętościowy) udostępnione zostaje okienko **Total Flow Units**. Jeżeli natomiast **Comp Units** określone zostaną w jednostkach strumienia

wówczas okienko **Total Flow Units** nie jest dostępne.

Jeżeli **Comp Units**  określone zostaną w jednostkach strumienia (w przeciwieństwie do ułamka molowego, masowego czy objętościowego), wówczas, po wpisaniu wartości dla strumieni poszczególnych składników, są one automatycznie sumowane a wynik zostaje wyświetlony w okienku **Total Flow**.

W lewym górnym rogu znajduje się przycisk **Flash**. Po naciśnięciu, program wykonuje szybkie obliczenia wykorzystując dane wprowadzane do okienka dialogowego. Pozwala to na wykonanie obliczeń objętych tą opcją bez konieczności opuszczania okienka dialogowego.

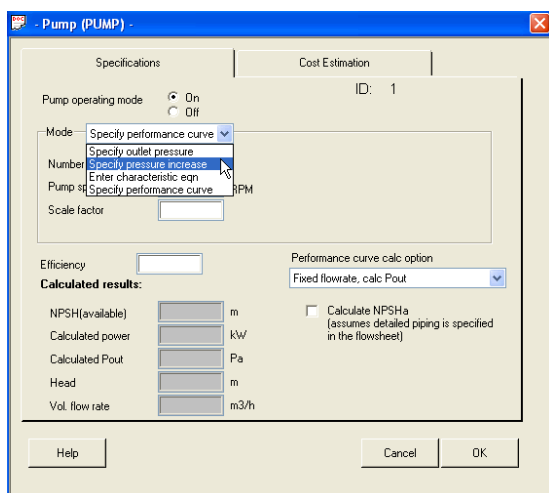
Ułamki są automatycznie normalizowane do 1.0 w momencie zamykania okienka dialogowego.

## PARAMETRY OPERACJI JEDNOSTKOWYCH (APARATÓW I URZĄDZEŃ)

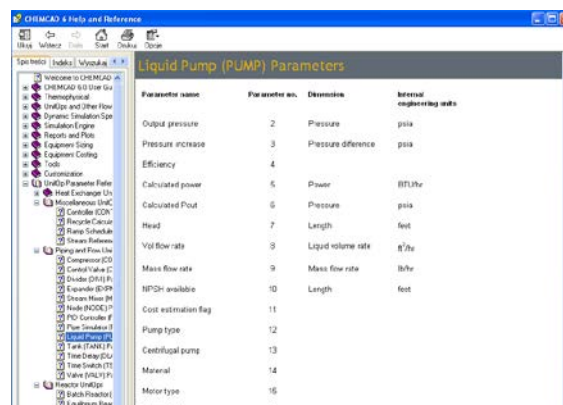
### POMPA

Podobnie jak to czyniliśmy dla specyfikacji strumieni, podwójne kliknięcie aparatu, którego parametry pracy należy zdefiniować otwiera okno z parametrami pracy tego urządzenia.

Przykładowo, w przypadku pompy 1 otwiera się następujące okno **Pump**:

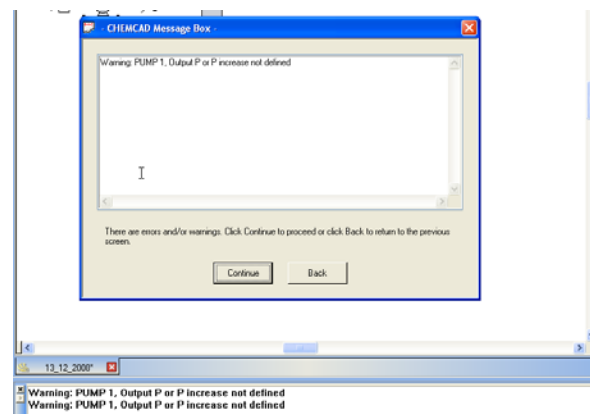


W okienku **Mode** należy wybrać jeden ze sposobów określania trybu pracy pompy. W przypadku wyboru **Specify outlet pressure** należy wpisać odpowiednią wartość w okienko **Output pressure**. Jak zawsze w przypadku wątpliwości można uruchomić pomoc naciskając przycisk **Help**. Pojawia się wówczas okienko zawierające potrzebne informacje:



### UWAGA:

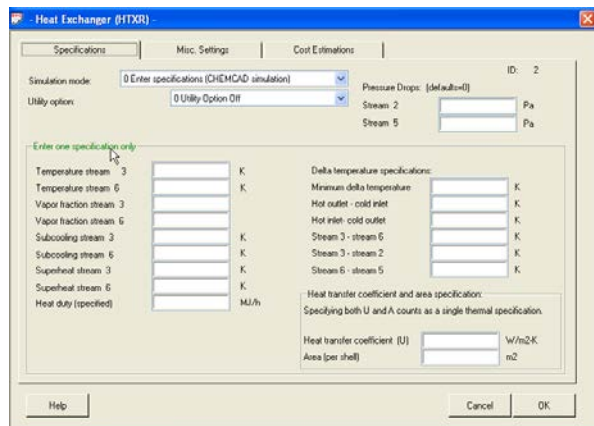
W przypadku pominięcia koniecznego określenia trybu pracy pompy CHEMCAD wyświetla odpowiedni komunikat o błędzie:



Należy przypomnieć, że w razie wątpliwości można skorzystać z pomocy **Help**.

# KRZYŻOWY WYMIENNIK CIEPŁA

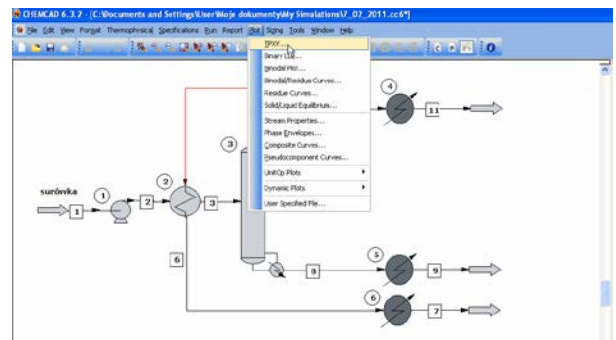
Po podwójnym kliknięciu ikony wymiennika 2 otwiera się następujące okno:



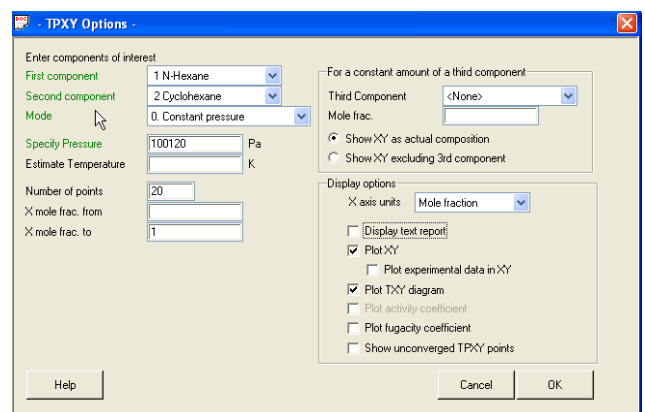
Jest wiele parametrów, które określają rodzaj wymiennika ciepła i sposób jego pracy. Znajdują się one na trzech stronach (zakładkach) widocznych na powyższym zdjęciu: **Specifications**, **Utility Rating** i **Cost Estimations**.

Program może dobrać domyślnie wiele parametrów. Przykładowo, spadek ciśnienia na wymienniku (Pressure drop): można wprowadzić wartość dodatnią określającą spadek ciśnienia lub pozostawić wartość domyślną 0 (zalecane). Zgodnie z nakazem w kolorze zielonym (**For design mode, enter only ONE of the following**) należy jednak obowiązkowo określić co najmniej jeden z wymienionych parametrów. Przykładowo, najbardziej istotnym parametrem opisującym pracę wymiennika jest temperatura strumienia 3, tj. temperatura strumienia surówki 3 opuszczającego wymiennik ciepła.

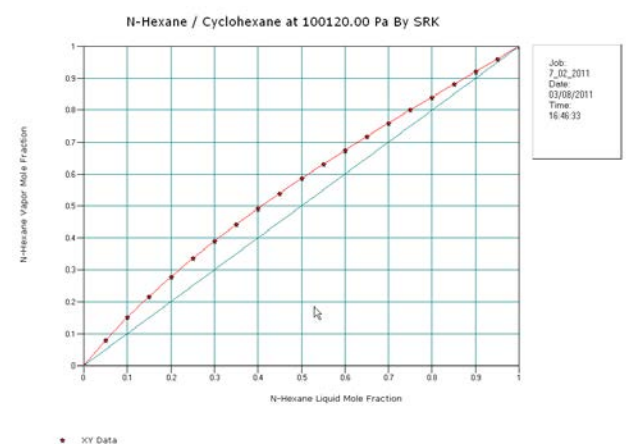
Temperaturę strumienia 3 należy określić mając na uwadze temperatury wrzenia składników tworzących rozdzielaną mieszaninę. Nie powinna ona przykładowo przekraczać temperatury wrzenia mieszaniny. Tę ostatnio można określić następująco. Należy wybrać polecenie **Plot** z lini poleceń, a następnie, **TPXY** jak poniżej::



a następnie wypełnić konieczne parametry w okienku dialogowym:



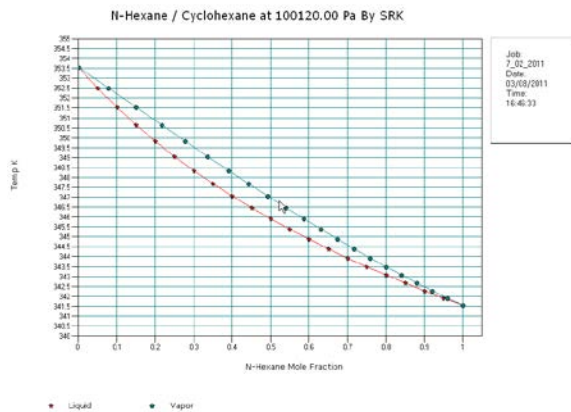
Po zaakceptowaniu wyborów uzyskujemy liczbowe wyniki symulacji a następnie po zamknięciu tego okna uzyskujemy graficzne przedstawienie tych wyników:



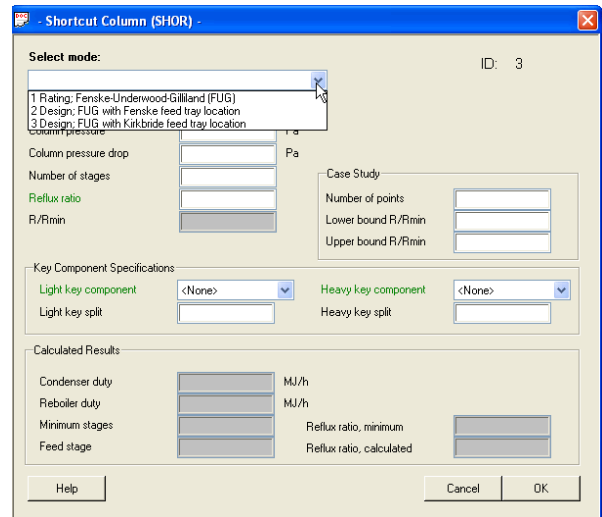
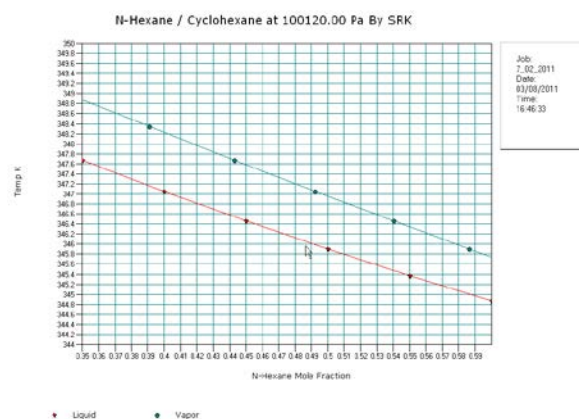
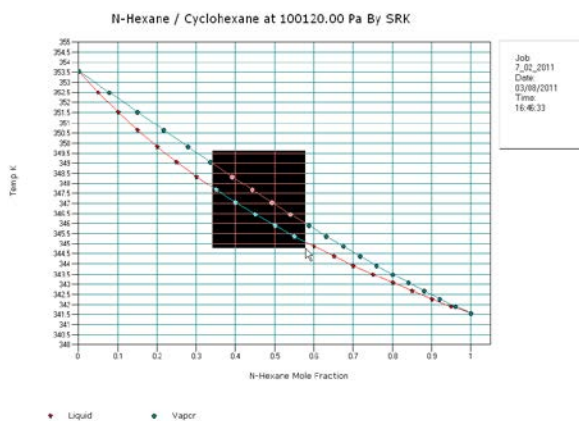
Po zamknięciu wykresu  $y=f(x)$  (kwadrat jednostkowy dla badanego układu) wyświetlony zostaje wykres izobary, z której można odczytać temperaturę wrzenia mieszaniny:

# KOLUMNY DESTYLACYJNE

Podwójne kliknięcie na ikonę kolumny rektyfikacyjnej **3** otwiera okienko dialogowe z wyborem parametrów dla tego uproszczonego modelu kolumny destylacyjnej **SHORTCUT DISTILLATION (SHOR)**:



Zakreślenie kursorem interesującego nas obszaru odpowiadającego składowi surowki włącza opcję „lupy”. Powiększony obraz ułatwia dokładne określenie temperatury wrzenia surowki o określonym uprzednio składzie.



Dostępne są trzy tryby pracy uproszczonej kolumny: tryb umożliwiający badanie danego projektu (tzw. **Rating Case**) oraz dwa **tryby projektowe**. Wszystkie trzy tryby korzystają z metody Fenske-Underwood-Gillilanda do symulacji pracy kolumny z jednym strumieniem zasilania i dwoma strumieniami produktów (destylat i ciecz wyczerpana).

Tryb **Rating Case** pozwala na badanie wpływu zmiany R/Rmin w określonych granicach na wyniki pracy kolumny. Należy pamiętać, że uproszczony model kolumny destylacyjnej może nie być wystarczająco dokładny dla bardziej skomplikowanych układów. Przykładowo, nie należy stosować tego modelu kolumny w trybie projektowym dla układów azeotropowych. Należy wówczas sięgnąć po bardziej złożone modele kolumn, takie jak **Tower Plus**, **Tower**, czy **SCDS**.

## PARAMETRY PRACY KOLUMNY

Select mode:

Wybrać tryb pracy kolumny z proponowanego menu:

**Rating case** by Fenske-Underwood-Gilliland method. (Tryb badawczy).

Dla tego trybu należy obowiązkowo wpisać liczbę pól (Number of stages) i powrót (Reflux ratio).

**Design case** by Fenske-Underwood-Gilliland method, miejsce zasilania wyznaczone metodą Fenske'go. (Tryb projektowy). Dla tego trybu należy obowiązkowo wpisać powrót (Reflux ratio) lub stosunek powrotu do powrotu minimalnego (R/Rmin)

**Design case** by Fenske-Underwood-Gilliland method, miejsce zasilania wyznaczone wg równania Kirkbride'a. (Tryb projektowy)

### Select condenser type

Wybrać tryb pracy skraplacza w głowicy kolumny z menu:

0 Całkowita kondensacja. Cały destylat ciekły (Opcja zalecana).

1 Częściowa kondensacja. Destylat w fazie gazowej.

### Column pressure

Jeśli nie wpisano przyjmowane jest ciśnienie strumienia zasilającego.

### Column pressure drop

Określić spadek ciśnienia na długości kolumny. Suma wartości spadku ciśnienia na kolumnie plus ciśnienie z opcji **Column pressure** odpowiada ciśnieniu w dolnej części kolumny. (Pozostawiamy bez wpisu).

### Number of stages

Liczba pól w kolumnie. Ten parametr jest wymagany dla przypadku **Rating case**.

### Reflux ratio

Stosunek powrotu do powrotu minimalnego. Ten parametr jest wymagany dla przypadku **Rating case**. Dla przypadku **Design case** parametr jest obliczany.

### W obszarze **Key Component Specifications**

#### Light key component

Obowiązkowy wybór z listy składnika bardziej lotnego.

#### Light key split

Ułamek składnika bardziej lotnego w surówce, który przejdzie do destylatu. Wartość między 0.5 a 1. Obowiązkowy wpis dla **trybu projektowego**.

Dla **Rating case** wpisana wartość jest wartością początkową dla obliczeń iteracyjnych prowadzonej przez program po komendzie **Run All**.

Jeśli nie wpisujemy żadnej wartości program wybierze 0,95 jako wartość początkową dla tej iteracji.

#### Heavy key component

Obowiązkowy wybór z listy

#### Heavy key split

Ułamek składnika mniej lotnego w surówce, który przejdzie do destylatu. Obowiązkowy wpis wartości między 0 a 0,5.

To, jakie parametry są niezbędne do parametryzacji kolumny **SHOR** zależy od trybu jej pracy.

Np., dla trybu **1 Rating case by Fenske-Underwood-Gilliland method** należy podać liczbę pól teoretycznych, **R/Rmin** oraz **Heavy key split**.

Pamiętajmy, że powyższe parametry są ze sobą związane odpowiednimi zależnościami. Przykładowo parametry: **Light key split** (Ułamek składnika bardziej lotnego, który znajdzie się w destylacie) i **Heavy key split** (Ułamek

ul.mas.skl.b.lotn.w.dest. = ul.mas.skl.b.lotn.w.sur. • str.surówki • ul.str.skl.b.lotn.z.sur.który.przejdzie.do.dest. • ul.str.skl.m.lotn.z.sur.który.przejdzie.do.dest. + ul.mas.skl.m.lotn.w.sur. • str.surówki • ul.str.skl.b.lotn.z.sur.który.przejdzie.do.dest.

składnika mniej lotnego, który znajdzie się w destylacie) mają bezpośredni związek ze składami destylatu i cieczy wyczerpanej (bilans materiałowy). Zatem, jeśli przykładowo chcemy uzyskać pewien interesujący nas skład destylatu należy wyznaczyć go biorąc pod uwagę odpowiednie zależności bilansowe (patrz Przykład poniżej).

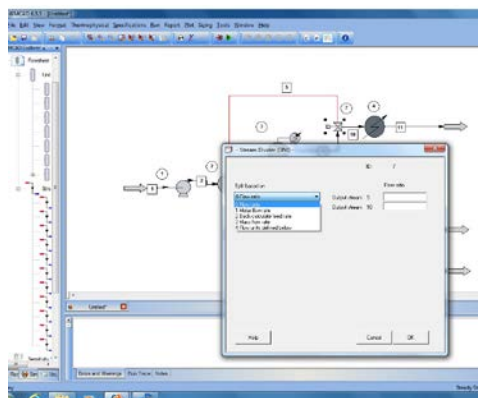
**Przykład:**

Założmy, że strumień surówki  $1 = 300$  kg/h. Biorąc pod uwagę jego skład ( $x_{wag}^{n\text{-heksan}}=0,45$ ) można wyliczyć, że w surówce płynie 135 kg/h n-heksanu i 165 kg/h cykloheksanu. Przypuśćmy, że  $R/R_{min}=2$ . Założmy też, że chcemy by z surówki do destylatu przeszło 0,25 ułamka wagowego składnika mniej lotnego (parametr **Heavy key split**). Z bilansu materiałowego wynika, że parametry strumieni surówki i destylatu związane są następującym równaniem (pochodzenie poszczególnych wartości wyjaśniono w równaniu bilansowym na marginesie:

$$x_D^{n\text{-heksan}} = 0,75 = \frac{0,450 \cdot 300 \cdot 0,91}{0,450 \cdot 300 \cdot 0,91 + 0,550 \cdot 300 \cdot 0,250}$$

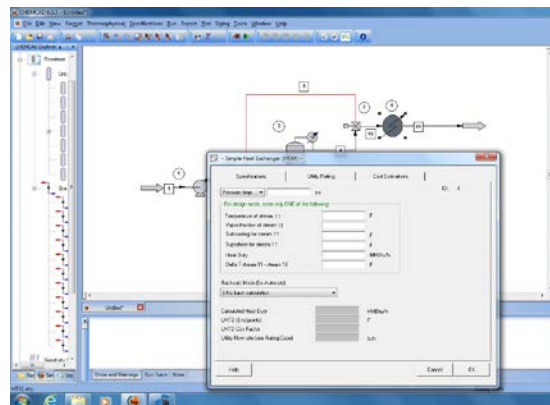
**Dzielnik strumienia**

Strumień destylatu można podzielić przy pomocy dzielnika strumienia na dwa strumienie, z których jeden można użyć do wstępnego podgrzania surówki. W tym celu należy zdefiniować sposób pracy dzielnika:



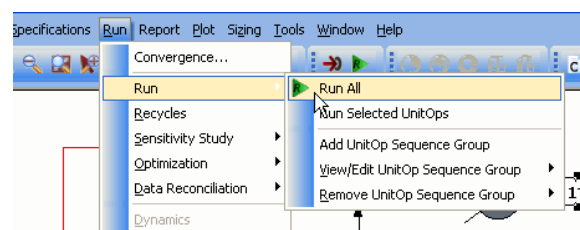
**Wymienniki ciepła produktów**

Jeśli w zadaniu zdefiniowano wymagane temperatury produktów należy sparametryzować pracę wymienników ciepła produktów.



**Wykonanie obliczeń**

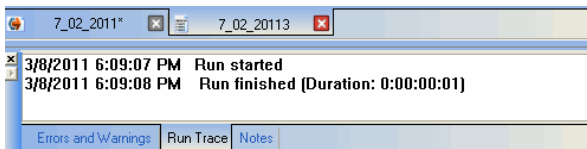
W celu wykonania obliczeń symulacyjnych należy wybrać polecenie **RUN** z linii poleceń. Dla wykonania obliczeń dla procesów stacjonarnych należy wybrać opcję **Run All**.



Podobnie działa przycisk **RUN** na linii narzędzi:



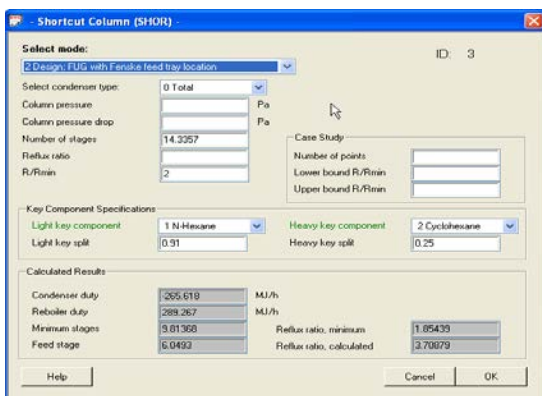
W **Oknie komunikatów** pojawia się komunikat:



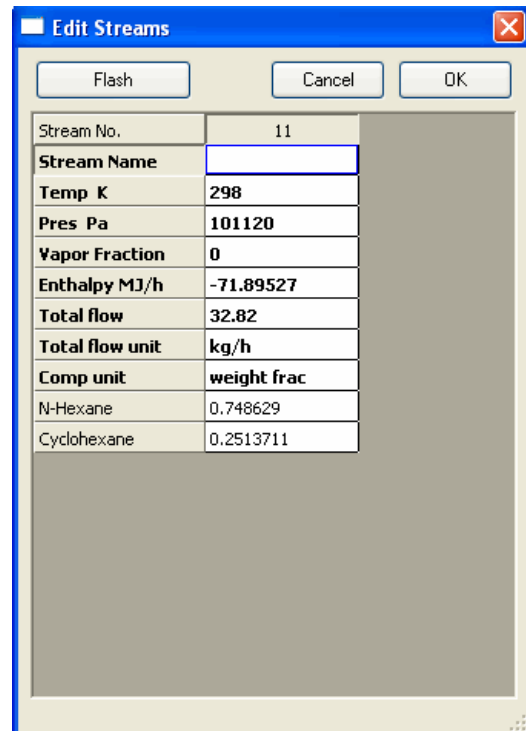
Czas obliczeń zależy jest od złożoności obliczeń i mocy obliczeniowej komputera. W przypadku prostych zadań (jak w naszym przykładzie) wynik otrzymujemy natychmiast.

## WYNIKI

Z przeprowadzonych obliczeń wynika, że przy dokonanych założeniach ok. 0,91 części n-heksanu zawartego w surówce powinno przejść do destylatu by jego udział w destylacie wyniósł  $x_D^{n\text{-heksan}} = 0,75$



Z danych dot. Strumienia destylatu, tj. strumienia **11** wynika, że uzyskano 32,82 kg/h destylatu o stężeniu n-heksanu równym 0.75 ułamka wagowego.



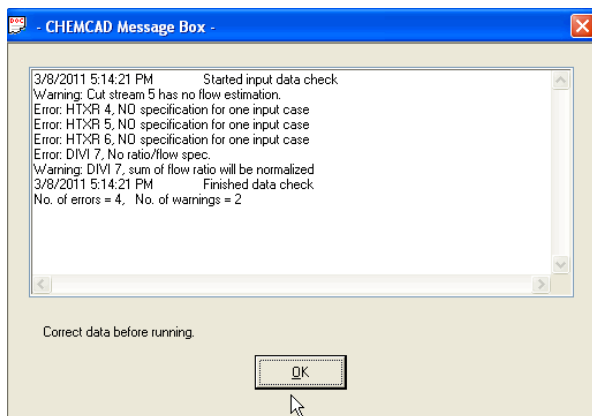
### Uwaga 1:

Należy pamiętać, że pozytywny wynik symulacji (uzbieżnienie obliczeń) możliwe jest tylko wtedy, kiedy dla danej wielkości strumienia surówki uzgodnione zostaną następujące parametry: liczba pól, powrót, Light key split i Heavy key split. Jeśli obliczenia nie zbiegają się należy zmienić jeden lub więcej wskazanych parametrów.

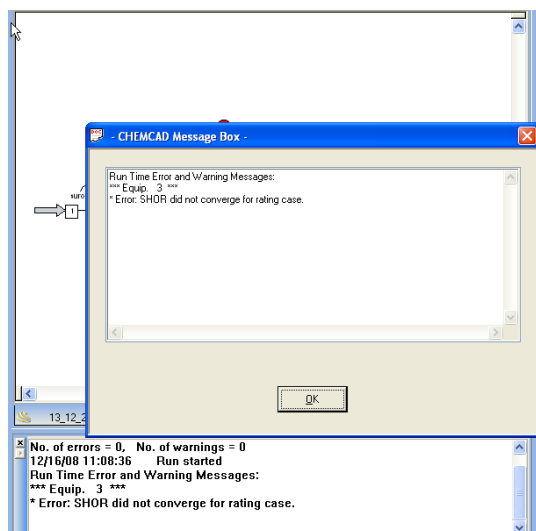
### Uwaga 2:

W przypadku niekompletnego lub niewłaściwego podania danych wejściowych do obliczeń pojawi się komunikat informujący o błędach ew. ostrzeżeniach. Np poniższy komunikat informuje o dwóch ostrzeżeniach i czterech błędach, tj. odpowiednio: braku przepływu strumienia 5 i zamierzonej normalizacji podziału strumieni w dzielniku 7 oraz braku specyfikacji parametrów pracy wymienników 4, 5 i 6 oraz braku parametru podziału strumienia zasilającego dzielnik 7.





Inny przykład. Poniższy komunikat wskazuje na niewłaściwe sparametryzowanie pracy kolumny SHOR 3.

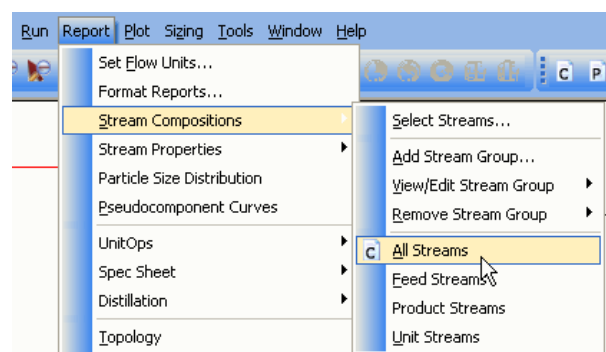


## SPORZĄDZANIE RAPORTU KOŃCOWEGO

Jeśli otrzymane wyniki odpowiadają założeniom (wyniki należy sprawdzić porównując np. skład strumienia otrzymanego destylatu z założeniami, co pokazano w rozdziale WYNIKI) należy sporządzić Raport.

Raport z wykonanej pracy można sporządzić korzystając z opcji **Report** z polecenia **OUTPUT** w linii poleceń. Dostępne menu raportu pozwala na zdefiniowanie interesujących nas wielkości, które powinny się znaleźć w raporcie a także jego format.

Przykładowo, jeśli interesuje nas zestawienie wszystkich strumieni, korzystamy z następującej opcji:



Otrzymujemy wówczas zestawienie wszystkich strumieni z domyślnie przyjętym zakresem parametrów :

CHEMCAD 4.3.2 (7.02.2011)

Simulation: T\_02\_UCS1 Date: 03/05/2011 Time: 10:14:59

FLUX STREAMS:

Stream No.	1	2	3	4
Stream Name	298.0000	298.0002	310.0000	143.0611
Temp F	100110.0000*	101110.0000	101110.0000	101110.0000
Press Pa	-436.39	-436.39	-609.11	-742.12
Molar mol/h	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
Total mol/h	3.5171	3.5171	3.5271	1.9337
Total kg/h	300.0000	300.0000	300.0000	164.1000
Total std L m³/h	6.4141	6.4141	6.4141	0.2379
Total std V m³/h	79.05	79.05	79.05	42.34
Flow cases in kg/h	115.0000	115.0000	115.0000	121.8000
W-Recovery	141.0000	141.0000	141.0000	41.1000
Component				
Stream No.	5	6	7	8
Stream Name	341.3411	319.0516	298.0000	152.1018
Temp F	101110.0000	101110.0000	101110.0000	101110.0000
Press Pa	-274.18	-161.17	-187.58	-242.83
Molar mol/h	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
Total mol/h	1.3125	1.3125	1.3125	1.6114
Total kg/h	111.1800	111.1800	111.1800	116.9000
Total std L m³/h	6.1163	6.1163	6.1163	0.1163
Total std V m³/h	34.15	34.15	34.15	16.12
Flow cases in kg/h	98.2800	98.2800	98.2800	12.1500
W-Recovery	31.0000	31.0000	31.0000	123.1000
Component				
Stream No.	9	10	11	
Stream Name	298.0000	143.0611	298.0000	
Temp F	101110.0000	101110.0000	101110.0000	
Press Pa	-357.12	-68.144	-71.894	
Molar mol/h	0.00000	0.00000	0.00000	
Total mol/h	1.6114	0.3811	0.3811	
Total kg/h	110.9000	31.8000	31.8000	
Total std L m³/h	6.1163	0.0476	0.0476	
Total std V m³/h	34.12	6.49	6.49	
Flow cases in kg/h	12.1500	24.6700	24.6700	
W-Recovery	110.7000	6.1000	6.1000	

3/8/2011 6:09:07 PM Run started  
 3/8/2011 6:09:08 PM Run finished (Duration: 0:00:00:01)

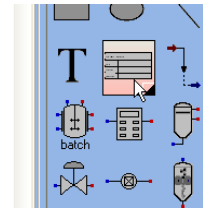
## Tabela

Jeżeli natomiast chcemy zapisać dane w tabeli, można skorzystać z opcji **Add Stream Box** lub **Add UnitOp Box** z polecenia **FORMAT** w linii poleceń. Pozwala to na sformatowanie tabelki zawierającej strumienie i aparaty oraz interesujące nas dane.

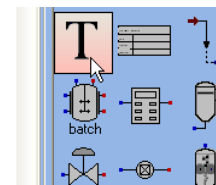


Rysunek należy uzupełnić informacją o autorach projektu. W tym celu wybieramy **Bibliotekę aparatów** i naciskamy tabelkę:

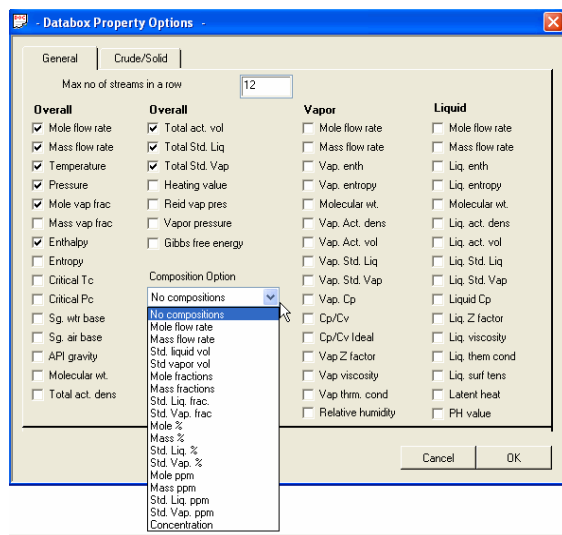
Job Name: 7_02_2011	
Date:	
Checked:	
Approved:	



W celu dokonania odpowiednich wpisów do tabelki wybieramy T i uruchamiamy edytor tekstu.

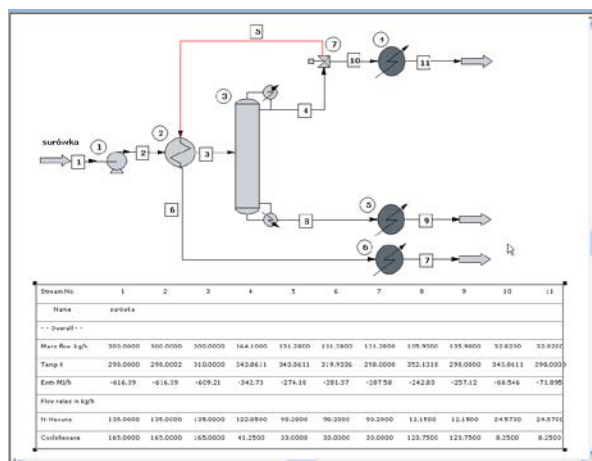


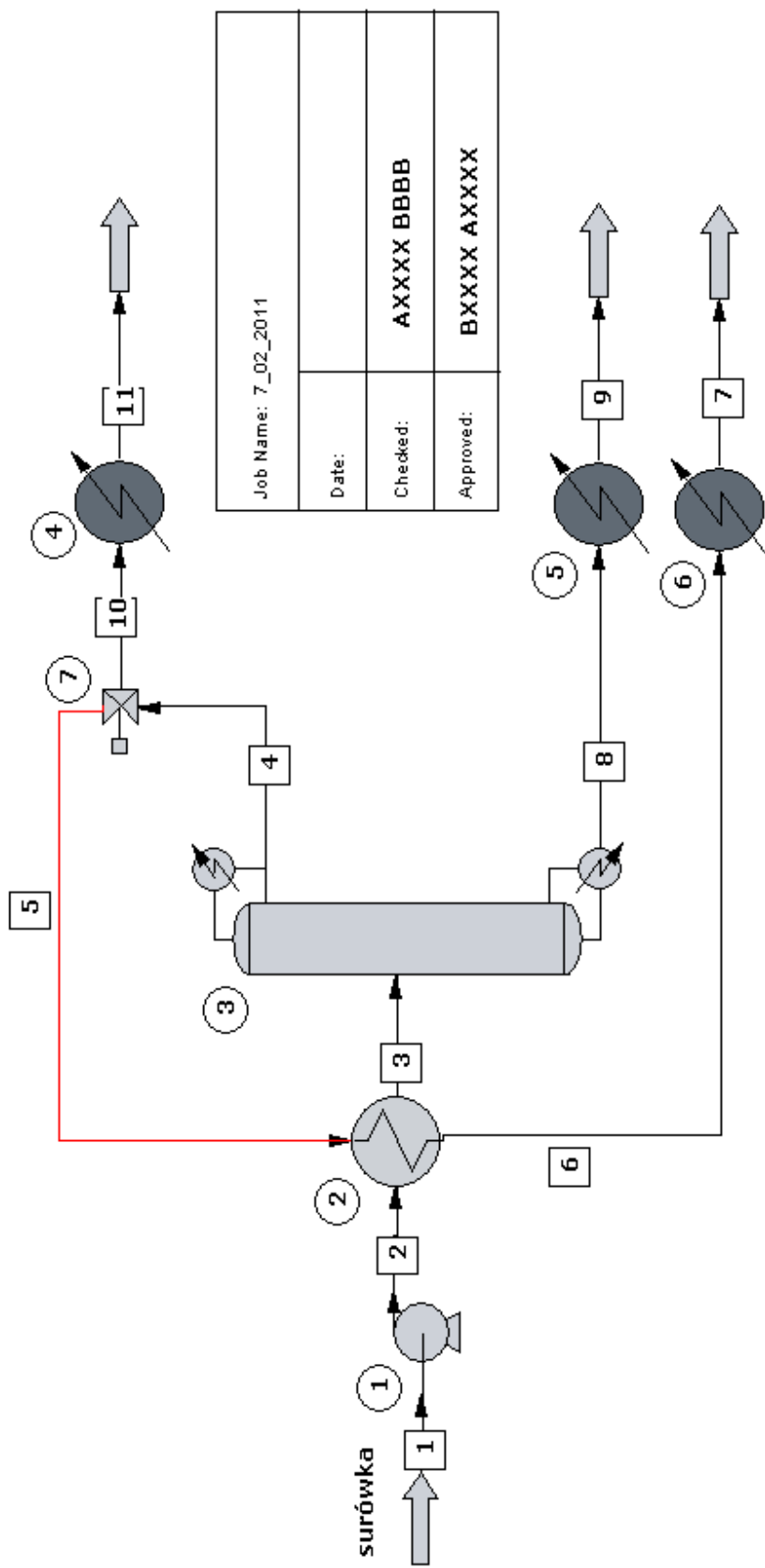
Dane te można wybrać zaznaczając w odpowiednim miejscu opcje w otwierającym się oknie:



W wersji ostatecznej wydrukowany raport (uwaga na układ strony) może wyglądać tak jak przedstawiono na następnym stronie:

W rezultacie uzyskujemy przykładowo następujący obraz:





Stream No.	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
Name	surówka										
-- Overall --											
Mass flow kg/h	300.0000	300.0000	300.0000	164.1000	131.2800	131.2800	131.2800	135.9000	135.9000	32.8200	32.8200
Temp K	298.0000	298.0002	310.0000	343.8611	343.8611	319.9336	298.0000	352.1018	298.0000	343.8611	298.0000
Enth MJ/h	-616.39	-616.39	-609.21	-342.73	-274.18	-281.37	-287.58	-242.83	-257.12	-68.546	-71.895
Flow rates in kg/h											
N-Hexane	135.0000	135.0000	135.0000	122.8500	98.2800	98.2800	98.2800	12.1500	12.1500	24.5700	24.5700
Cyclohexane	165.0000	165.0000	165.0000	41.2500	33.0000	33.0000	33.0000	123.7500	123.7500	8.2500	8.2500