

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
ДЕРЖАВНИЙ ВИЩИЙ НАВЧАЛЬНИЙ ЗАКЛАД  
«УКРАЇНСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИЙ  
УНІВЕРСИТЕТ»

МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ  
ДО ПРАКТИЧНИХ ЗАНЯТЬ З ДИСЦИПЛІНИ  
«КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ» ЗА ОСВІТНІМ РІВНЕМ «МАГІСТР»  
ДЛЯ СТУДЕНТІВ СПЕЦІАЛЬНОСТЕЙ 151 «АВТОМАТИЗАЦІЯ ТА  
КОМП'ЮТЕРНО-ІНТЕГРОВАНІ ТЕХНОЛОГІЇ», 161 «ХІМІЧНІ ТЕХНОЛОГІЇ  
ТА ІНЖЕНЕРІЯ»

Затверджено на засіданні кафедри  
комп'ютерно-інтегрованих технологій  
та автоматизації  
Протокол № 2 від 22.11.2018

Методичні вказівки до практичних занять з дисципліни „Комп'ютерне моделювання" за освітнім рівнем «Магістр» для студентів спеціальностей 151 «Автоматизація та комп'ютерно-інтегровані технології», 161 «Хімічні технології та інженерія» / Укл.: О.П. Мисов, М.О. Савченко. – Дніпро: ДВНЗ УДХТУ, 2018. – 34 с.

Укладачі: О.П. Мисов, канд. техн. наук  
М.О. Савченко, канд. техн. наук

Відповідальний за випуск О.П. Мисов, канд. техн. наук

#### Навчальне видання

Методичні вказівки до практичних занять з дисципліни „Комп'ютерне моделювання" за освітнім рівнем «Магістр» для студентів спеціальностей 151 «Автоматизація та комп'ютерно-інтегровані технології», 161 «Хімічні технології та інженерія»

Укладачі: МИСОВ Олег Петрович  
САВЧЕНКО Марія Олегівна

Технічний редактор Л.Я. Гоцуцова  
Комп'ютерна верстка Л.Я. Гоцуцова

Підписано до друку 20.11.18. Формат 60×84/16. Папір ксерокс. Друк різнограф. Умов. друк. арк. 1,23. Облік.-вид. арк. 1,27. Тираж 100 прим. Зам. № 107. Свідоцтво ДК № 5026 від 16.12.2015.

---

ДВНЗ УДХТУ, 49005, м. Дніпро – 5, просп. Гагаріна, 8.

---

Редакційно видавничий відділ

## ЗМІСТ

ЗАГАЛЬНІ ВКАЗІВКИ.....	4
ЗАГАЛЬНІ ПОЛОЖЕННЯ.....	5
ПРАКТИЧНЕ ЗАНЯТТЯ № 1 .....	17
ПРАКТИЧНЕ ЗАНЯТТЯ № 2 .....	20
ПРАКТИЧНЕ ЗАНЯТТЯ № 3 .....	23
ПРАКТИЧНЕ ЗАНЯТТЯ № 4 .....	28
Питання для самостійної роботи .....	32
СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ.....	34

## ЗАГАЛЬНІ ВКАЗІВКИ

Ці вказівки рекомендуються в якості методичного матеріалу при роботі на практичних заняттях за курсом „Комп'ютерне моделювання“. У доповненні до методичних вказівок припускається використання спеціальної літератури, перелік якої додається.

Використання комп'ютерних програмних моделюючих комплексів має велике значення для навчання студентів, дозволяючи понизити матеріальні і тимчасові витрати, навчити персонал основним законам і особливостям регулювання, показати різні варіанти автоматизованих систем управління. Можливість застосування програмного комплексу ChemCAD, відіграє важливу роль у процесах навчання студентів за дисципліною «Комп'ютерне моделювання». Цьому сприяє декілька важливих особливостей ChemCAD:

- можливість дослідження моделі реального об'єкта на комп'ютері, уникаючи енергетичних втрат, втрат сировини, поломки устаткування і аварійних ситуацій із-за проведення експерименту на реальній установці;
- можливість моделювання і розрахунку системи при різних збуреннях (включаючи критичні);
- можливість моделювання різних систем автоматизованого управління, визначення показників якості перехідних процесів;
- швидкість і зручність розрахунку установки.

Тематика практичних занять охоплює наступні розділи програми курсу:

Тема 1.1. Типові технологічні оператори ХТП. Основні методи розрахунку ХТП. Інтегральні і декомпозиційні методи розрахунків ХТП.

Тема 1.2. Використання пакета ChemCAD для моделювання ХТП. Використання контролерів. Візуалізація результатів. Особливості застосування твердофазних потоків у пакеті ChemCAD. Моделювання ХТП з використанням реактора Гіббса.

Тема 1.3. Динамічний і стаціонарний режими моделювання ХТП у пакеті ChemCAD. Використання ПІД-контролерів у динамічному режимі. Створення моделі ХТП з використанням ПІД-контролера. Визначення коефіцієнтів ПІД-контролера за допомогою пакета Chemcad.

Тема 1.4. Дослідження чутливості перемінних ХТП. Формування аналізу чутливості. Виконання аналізу чутливості. Перегляд результатів аналізу чутливості.

Тема 1.5 Оптимізація та аналіз ХТП з використанням пакета ChemCAD. Пошукові змінні. Обмеження на залежні змінні процесу. Налаштування методу розв'язання задачі оптимізації. Рішення задачі оптимізації.

Завдання на практичні заняття складаються таким чином, щоб найбільш повно уявити перераховані вище розділи в рамках одного заняття і завдяки цьому поширити практичні навички студентів при моделюванні технологічних схем. Роботу на практичному занятті слід починати з ознайомлення із завданням. Після цього зробити підбір, вивчення, огляд та аналіз аналогічних схем і вибір структурних елементів, та задання параметрів технологічної схеми.

Виконане завдання містить: завдання на проектування, структурну технологічну схему та її обґрунтування. Також, графічні, графоаналітичні розрахунки (вибір типів приладів, призначення і розрахунок параметрів, що визначають роботу схеми, тощо).

При оформленні розрахункового завдання слід наводити розрахункові формули, а після цього підставляти в них цифрові значення вхідних параметрів.

## ЗАГАЛЬНІ ПОЛОЖЕННЯ

### *Короткий опис пакета прикладних програм ChemCAD і порядок роботи з пакетом*

Програма ChemCAD (версія 6.3) є інструментальним засобом моделювання хіміко-технологічних процесів для вирішення завдань дослідження і проектування хіміко-технологічних систем, у тому числі окремих апаратів.

ChemCAD має модульну структуру і складається з системного і функціонального наповнень, що є засобами та об'єктами розрахунку, а також баз даних та інтерфейсу користувача, що володіє могутніми графічними можливостями.

Для отримання довідкової інформації можна використовувати команду **Help/HelpTopics (Допомога/Зміст довідки)**, після чого на екран виводиться вікно **ChemCad6.3Help (ChemCad6.3 Допомога)**.

Моделювання нової технологічної схеми за допомогою ChemCAD'а припускає наступні етапи:

1. Створити новий файл технологічної схеми.
2. Вибрати технічні розмірності.
3. Вибрати компоненти.
4. Вибрати термодинамічні моделі.
5. Побудувати технологічну схему.
6. Задати параметри вхідних потоків.
7. Задати параметри для всіх одиниць устаткування.
8. Запустити програму моделювання.
9. Проглянути результати моделювання на екрані.
10. Роздрукувати результати моделювання на принтері.

Ці етапи не обов'язково виконувати в такій же послідовності, не обов'язково також проходити через всі ці етапи при побудові технологічної схеми, оскільки для деяких з них існує інформація за замовчуванням; але всі ці етапи, принаймні, слід взяти до уваги при рішенні кожної задачі.

**1. Створення нового файлу технологічної схеми.** При роботі із завданням (технологічною схемою) мається на увазі його завантаження, збереження та управління цим завданням. Для відкриття нового завдання використовується команда **File/New (Файл/новий)** на панелі інструментів,

після чого програма у вікні **Збереження файлу** запропонує ввести ім'я файлу. Файл, що існує на диску, можна відкрити, використовуючи команду **File/Open (Файл/відкрить)** на панелі інструментів. Всі подальші дії виконуються стандартним чином, як для будь-якого додатка Windows. Після відкриття нового файлу в заголовку вікна виводиться його ім'я, відображаються меню, панель інструментів і **Palette (палітра)**. Поточний режим програми вказується в рядку стану: поточним режимом програми є режим **Mode: Simulation (Режим: Моделювання)**.

**2. Вибір технічних розмірностей.** При створенні технологічної схеми необхідно вибрати технічні розмірності. У програмі надані набори одиниць вимірювання: англійський, метричний і СІ. Ці набори називаються профілями одиниць вимірювання.

Для вибору технічних розмірностей використовується команда **Format/EngineeringUnits (Формат/Одиниці вимірювання)**. На екран виводиться вікно **EngineeringUnitSelection (Вибір Одиниць Вимірювання)**. В списках області **StreamFlowUnits (Витратні Одиниці Потoku)** вибираються глобальні розмірності витрати:

- **TotalFlow (Загальна Витрата)** – загальної витрати.
- **ComponentFlow (Витрата Компонентів)** – витрати компонентів потоку.

Вибір поточних розмірностей проводиться за допомогою відповідних кнопок, розташованих у нижній частині вікна: **English (Англійська)**, **SI (СІ)**, **Metric (Метрична)**.

**3. Вибір компонентів.** Відповідно до етапів моделювання наступним кроком є завдання списку хімічних компонентів процесу. Вибір компонентів проводиться з банку даних програми. Для цього використовується команда **Thermophysical/SelectComponents (Термофізика/Вибір Компонентів)** на панелі інструментів. Після виконання команди на екран виводиться вікно **ComponentSelection (Вибрати Компонент)**. Команда і кнопка доступні в режимі: **Simulation (Моделювання)**.

В області **ComponentDatabank (Банк даних компонентів)** перераховані всі компоненти всіх баз даних системи і локальних призначених для користувача баз даних. Список компонентів складений за збільшенням їх ідентифікаційних номерів (ID). У полі **Searchfor (Пошук по)** компоненти вводяться або за ID номерами, або за назвами або формулами. За допомогою кнопки **Next (Наступний)** можна переміщатися за списком області **ComponentDatabank** відповідності з введеним у полі **Searchfor** пошуковим контекстом.

У правій частині вікна в області **SelectedComponents (Вибрані компоненти)** відображається список компонентів, використовуваних у завданні. Він створюється за мірою вибору потрібного компонента із списку області **ComponentDatabank**. Для вибору потрібного компонента потрібно або

набрати його номер у полі **Searchfor (Пошук по)** і натиснути клавішу [ENTER], або двічі клацнути лівою клавішею миші на імені компонента.

- **Add (Додавати)** нові компоненти в список. Для цього треба або вибрати потрібний компонент в області **ComponentDatabank**, або ввести його номер у поле **Searchfor** та натиснути кнопку **Add**. Доданий компонент з'явиться в кінці списку, створеного в області **SelectedComponents**.

- **Insert (Вставляти)** нові компоненти в список. Для цього треба встановити курсор миші на тому компоненті, перед яким вставлятиметься новий, вибрати потрібний компонент в області **ComponentDatabank** та натиснути кнопку **Insert**.

- **Delete (Видаляти)** компонент із списку. Для цього вибирається компонент, що видаляється, і натискається кнопка **Delete**. Причому вся інформація і посилання на видалений компонент також забираються з моделі.

- **Clear (Очистити)** всі присутні в списку компоненти.

Для збереження створеного списку компонентів треба натиснути кнопку **OK**. Програма перешле ці дані в файл завдання і повернеться в режим **Mode: Simulation**.

**4. Вибір термодинамічних моделей.** Термодинамічні властивості потоків визначаються завданням будь-яких двох параметрів з наступних: температура, тиск, частка пари та ентальпія. Щоб отримати точні результати розрахунків, необхідно вибрати метод, найбільш відповідний для даної хімічної системи. Вибір термодинамічних моделей зводиться переважно до вибору придатних методів розрахунку констант фазової рівноваги, ентальпії, ентропії, щільності, в'язкості, теплопровідності і поверхневого натягнення вмісту потоку. ChemCAD містить приблизно 50 методів розрахунку констант фазової рівноваги з різними варіантами і близько 12 способів розрахунку ентальпії. Для вибору термодинамічних методів використовуються команди меню **ThermoPhysical (Термофізика)**, доступні у режимі: **Simulation (Моделювання)**.

**5. Побудова технологічної схеми.** Створення схеми зводиться, в основному, до розміщення зображень технологічного устаткування (далі апаратів або піктограм апаратів) на екрані і з'єднання їх потоками. Іноді на етапі побудови схеми виникає необхідність у створенні нових модифікацій і піктограм. Розглянемо послідовність виконання цих кроків.

5.1. Розміщення зображень апаратів. Виставляння зображень апаратів виконується в режимі режим: редагування технологічної схеми. При створенні нового файлу перехід у цей режим виконується автоматично.

На екран виводиться **Palette (палітра)**. Кожен квадрат палітри містить символ, що вказує його функції, і піктограми апаратів. Вивести/прибрати основну палітру можна за допомогою команди **View/ Palette (Перегляд/палітра)**, на панелі інструментів. Окрім основної палітри для ряду піктограм виводиться **SubPalettes (Підпалітра)** з додатковими варіантами піктограм апарата. Виклик підпалітри виконується клацанням правої кнопки

миші на зображенні піктограми. Для вибору піктограми апарата треба встановити на ній курсор миші, з'явиться підказка з назвою піктограми, і далі клацнути лівою клавішею миші. Після цього на екрані відображається курсор у вигляді квадрата, який можна переміщати по екрану. Для відмови від виставлення піктограми на екран виконується команда **Edit/Undo (Редагування/відмінити)**. Команда дозволяє послідовно відмовитися від всіх виставлених на екран піктограм апаратів. Для відновлення на екрані відмінених раніше піктограм здійснюється команда **Edit/Redo (Редагування/)**. Розміщення зображень апаратів технологічної схеми починається, як правило, з виставлення піктограми **Feed (Живлення)**. Для розміщення вибраної піктограми треба клацнути лівою клавішею миші та у вказаному місці вона відобразиться. Поряд з піктограмою автоматично виставляється її ID (ідентифікаційний номер). Ці номери привласнюються послідовно, починаючи з 1, в порядку виставлення піктограм. Після розміщення першої піктограми на екрані знову з'являється основна палітра для вибору іншої піктограми апарата. Всі подальші дії з вибору і розміщення піктограм виконуються аналогічним чином. Завершення розміщення зображень апаратів технологічної схеми закінчується виставленням піктограм **Product (Продукт)**. На кожному етапі виставлення апаратів або при завершенні цього процесу можна зберегти введену інформацію, виконавши команду **File/Save (Файл/Зберегти)** або **File/SaveAsCase (Файл/Зберегти як варіант)**.

5.2. Створення і модифікація піктограм апаратів. У кожного апарата, як правило, мається багато піктограм. Проте для вирішення практичних завдань цього може виявитися недостатнім. Тому програмою передбачені широкі можливості модифікації піктограм. Для цього треба виділити піктограму, клацнувши на ній правою кнопкою миші, після чого на екран виводиться контекстне меню з наступними командами:

- **Cut (Вирізувати)** – вирізує виділений об'єкт і поміщає його в буфер обміну.
- **Copy (Копіювати)** – копіює виділений об'єкт у буфер обміну.
- **Delete (Видалити)** – видаляє виділений об'єкт.
- **SelectAll (Виділити все)** – виділяє всі об'єкти, розташовані в робочій області вікна.
- **FlipHorizontal X (Обертання об'єкта щодо осі X)** – виконує поворот виділеного об'єкта відносно осі X.
- **FlipVertical Y (Обертання об'єкта щодо осі Y)** – виконує поворот виділеного об'єкта щодо осі Y.
- **90 Clockwise (Поворот за годинниковою стрілкою на 90 градусів)** – виконує поворот виділеного об'єкта за годинниковою стрілкою на 90 градусів.
- **90 Conunter CW (Поворот проти годинникової стрілки на 90 градусів)** – виконує поворот виділеного об'єкта проти годинникової стрілки на 90 градусів.
- **Edit ID (Редагування ID номеру)** – виконує редагування ID номера виділеного об'єкта. У вікні **Enter a newunit ID orpresscancel (Введіть новий**



**ID номер устаткування або натисніть відмову)** у відповідне поле треба ввести новий номер ID і натиснути кнопку **ОК**.

- **EditName (Редагування імені)** – дозволяє ввести мітку завдовжки не більше 12 символів для виділеного об'єкта. У вікні **Enternewlabelorpresscancel (Введіть нову мітку або натисніть відмову)** у відповідне поле треба ввести мітку і натиснути кнопку **ОК**.

- **Show ID (Показати ID номер)** – виділяє порядковий номер об'єкта.

- **Redraw (Відновити)** – оновлює зображення на екрані.

5.3. Зображення потоків на технологічній схемі. Після завершення розміщення апаратів технологічної схеми необхідно з'єднати їх матеріальними потоками. При зображенні потоків слід керуватися низкою загальних правил.

а) Кожен потік направлений від апарата-джерела до апарата-приймача.

б) Кожен апарат має позиції входу і виходу. Вони зупиняються при створенні піктограми апарата. Програма орієнтує потоки за відношенням до цих позицій. Потік завжди направлений з виходу апарата-джерела до входу апарата-приймача.

в) Початок потоку визначається появою курсору у вигляді стрілки поряд з позицією виходу з апарата-джерела. При натиснутій лівій кнопці миші програма будує потік з цієї позиції.

г) При зображенні потоку, наближаючись до позиції входу апарата, знов з'являється курсор у вигляді стрілки. Потік фіксується натисненням лівої клавіші миші. Одночасно поряд з потоком відображається його ID номер.

д) Для відмови від зображення потоку треба натиснути праву кнопку і виконати **Stopdrawingstream (Припинити зображення потоку)**. З'єднання апаратів потоками виконується в режимі: **FlowSheet**. У **Pallete (палітрі)** треба вибрати символ **Stream (Потік)**, який дозволить вказати початок і кінець потоку. Після виконаних дій курсор миші приймає вид маленького хреста. Для зображення потоку курсор підводиться близько до піктограми живлення. Коли з'явиться стрілка поряд з виходом апарата, фіксується ліва кнопка миші і за допомогою миші у відповідному напрямі рисується потік. Коли з'явиться стрілка вхідного потоку наступної піктограми, знову фіксується ліва кнопка миші. Програма зобразить потік, що йде прямо в цю крапку та автоматично привласнить йому його ID (ідентифікаційний номер).

За допомогою відповідних команд контекстного меню можна, за аналогією з модифікацією виставлених піктограм апаратів, виконувати різні модифікації потоків і їх ID номерів.

На кожному етапі з'єднання апаратів потоками або при завершенні цього процесу можна зберегти введену інформацію, виконавши команду **File/Save (Файл/Зберегти)** або **File/SaveAsCase (Файл/Зберегти як варіант)**.

## **6. Завдання параметрів потоків живлення і потоків, що розриваються.**

Наступним етапом є завдання параметрів потоків живлення і потоків, що розриваються. Термодинамічний стан потоку визначається будь-якими двома параметрами з трьох наступних: температури, тиску і доль пари; зазвичай

задаються температура і тиск. При завданні всіх трьох параметрів ChemCAD виводить повідомлення про надлишкове визначення потоку. Для кожного потоку живлення потрібно задати витрату за всіма речовинами включеними в список компонентів, або задатися сумарною витратою компонентів і їх концентраціями. Якщо в схемі присутні рецикліві (що розриваються) потоки, то для розрахунку схеми використовується ітераційний процес. У цьому випадку завдання початкових наближень параметрів потоків, що розриваються, не обов'язкове, програма приймає в їх якості нульові значення. Проте вдалий підбір відмінних від нуля початкових наближень може прискорити збіжність. Завдання параметрів потоку можна виконати наступними способами: двічі клацнути лівою клавiшею миші на потоці, що цікавить; використовувати команду контекстного меню **EditUnitOpStreams (Редагування потоків одиниці устаткування)** для завдання параметрів потоків вибраної одиниці обладнання; за допомогою команд меню **Specifications (Специфікації)**. Завдання параметрів потоків виконується в режимі: **Simulation**. Роздивимось команди меню **Specifications**.

Команда **SelectStreams (Вибір потоків)** дозволяє вибирати потоки технологічної схеми, що цікавлять. Після виконання команди на екран виводиться вікно **SelectStreams** для введення ID номера потоку. Цей номер можна або безпосередньо ввести в поле, або клацнути лівою клавiшею миші на потрібному потоці, та його номер з'явиться в полі вікна. Після натиснення кнопки **Вікна** екран виводиться вікно **EditStreams (Редагування потоків)**. Введення даних за складом і параметрами стану потоку виконується у відповідні поля і завершується кожного разу натисненням клавiші [ENTER]. Дані можна редагувати і видаляти. Кнопка **Flash (Випаровування)** використовується для розрахунку випаровування параметрів складу, температури і тиску. Кнопка **CompList (Список компонентів)** виводить на екран поточний список компонентів. Вікно **EditStreams** може охоплювати всі вибрані на технологічній схемі потоки. Після визначення всіх параметрів потоку натискається кнопка **Ок**. Усі подальші команди меню **Specifications**, що належать до завдання параметрів потоків, виконуються аналогічно команді **SelectStreams** і дозволяють:

- **FeedStreams (Потоки живлення)** автоматично обрати всі потоки живлення технологічної схеми.
- **CutStreams (Потоки, що розриваються)** редагувати потоки технологічної схеми, що розриваються.
- **CopyStream (Копіювання потоку)** копіювати всі дані, що належать до одного потоку, в другий потік. Для цього треба у вікні **CopyStream (Копійований потік)** у полях **CopyStreamto (Копіювати потоки)** ввести, відповідно, номери початкового потоку і потоку, в який копіюватимуться дані.
- **SelectCutStreams (Вибрати потоки, що розриваються)** перевизначити потоки технологічної схеми, що розриваються.
- **ResetCutStreams (Відновити початкові потоки, що розриваються)** відновити початкові номери і стан потоків, що розриваються.

**7. Введення параметрів устаткування.** За аналогією із завданням параметрів потоку, для введення параметрів обладнання також використовуються: подвійне клацання лівою клавішею миші на одиниці устаткування, команда контекстного меню **EditUnitOpData (Редагування параметрів одиниці устаткування)** і відповідні команди меню **Specifications (Специфікації)**. Завдання параметрів устаткування виконується в режимі **Mode: Simulation**.

Команда **Specifications/SelectUnitOps (Специфікації/вибір устаткування)** дозволяє вибрати окремі одиниці устаткування. Їх вибір виконується аналогічно вибору потоків.

Команда **Specifications/AllUnitOps (Специфікації/все устаткування)** дозволяє автоматично вибрати все устаткування технологічної схеми. Вікна для введення параметрів з'являються на екрані послідовно, відповідно до ID номерами устаткування. Вид вікна введення параметрів визначається типом устаткування і використовуваними параметрами устаткування, які закладені в його модулях розрахунку. Вікно може містити один і більше за розділи.

**8. Реактори.** ChemCAD надає засоби для вирішення великої кількості завдань, зв'язаних з реакторами, починаючи з простих стехіометричних реакцій і закінчуючи множинними кінетичними реакціями.

8.1 Модуль **Stoichiometricreactor (REAC)** моделює стехіометричний реактор за наявності набору стехіометричних коефіцієнтів, ключових компонентів і ступенів перетворення. Реактор може бути адіабатичним, ізотермічним або з підведенням/відведенням тепла. Вікно модуля містить два розділи. У розділі **GeneralSpecifications (Загальні специфікації)** надані опції для завдання загальних технічних умов. В області **SpecifyThermalMode: (Спеціальний тепловий режим:)** вибирається тепловий режим роботи реактора:

**Adiabatic (Адіабатичний)** – адіабатичний.

**Isothermal (Ізотермічний)** – ізотермічний.

**HeatDuty (Теплове навантаження)** – із заданим тепловим навантаженням.

У списку **Keycomponent (Ключовий компонент)** визначається позиція ключового компонента. Передбачається, що ключовий компонент є реагентом. Це обов'язковий для введення параметр. У наступних полях задаються значення:

- **Frac. Conversion (Ступінь перетворення)** – ступені перетворення ключового компонента (значення від 0 до 1). Це обов'язковий для введення параметр.

- **HeatofReaction (Теплота реакції)** – теплоти реакції. Вона задається за стандартних умов, тобто при 25°C. Ця величина позитивна для ендотермічних реакцій і негативна для екзотермічних. Параметр не обов'язковий для введення,

якщо теплота реакції не задана, то програма оцінить її за даними про теплоутворення кожного компонента з бази даних.

- **ReactorPressure (Тиск у реакторі)** – тиск у реакторі. Якщо заданий 0, то тиск у реакторі буде рівний тиску вхідного потоку.

- **Calc H of Reac. (Розрах. значення теплоти реакції).**

У **StoichiometricCoefficients: (Стехіометричні коефіцієнти:)** задаються послідовний набір стехіометричних коефіцієнтів: негативних – для реагентів, позитивних – для продуктів і нульових – для речовин, що не беруть участь у реакції. При необхідності завдання стехіометричних коефіцієнтів можна продовжити, вибравши розділ **MoreComponents (Інші компоненти)**. У модуля REAC може бути один вхід і до трьох виходів. Якщо є декілька виходів, то перший тримає пару (якщо такий присутній), а другий і третій містять рідини (якщо такі присутні).

8.2. Модуль **KineticReactor (KREA)** служить для перевірного і проектного розрахунків кінетичних реакторів ідеального витіснення **PFR (PIB)** і реакторів ідеального змішення **CSTR (PIS)**. Кожен з реакторів (**Piv\_іліріс**) може бути рідкофазним або газофазним. Допускаються також двофазні реактори, але реакція може мати місце тільки в одній фазі. Вікно модуля має два розділи. Розділ **GeneralSpecifications (Загальні специфікації)** містить параметри, які використовуються як для реактора PIB, так і для реактора PIS.

У полі **Numberofreactions (Кількість реакцій)** вводиться число реакцій. Допускається до 20 одночасних реакцій.

У полі **Reactorpressure (Тиск у реакторі)** задається тиск на вході в реактор. Якщо воно не задане, то використовується тиск у вхідному потоці.

У **PressureDrop (Перепад тиску)** визначається тиск, при якому протікає хімічна реакція в реакторі. Для PIS ця величина рівна нулю. Для PIB профіль тиску рівномірно розподіляється між входом і виходом за числом кроків інтеграції.

В області **ReactorModel (Модель реактора)** визначається тип реактора і фаза протікання реакції.

Тип реактора вибирається в списку **Specifyreactortype: (Визначення типу реактора:)**

- **ContStirTankReac. (CSTR)** – реактор ідеального змішення (PI3).

- **PlugFlowReactor (PFR)** – реактор ідеального витіснення (PIB).

Наступні опції дозволяють задати фазу протікання реакції:

- **Liquid (Тільки рідина)** – (за умовчанням).

- **Vaporonly (Тільки пара).**

- **Liquidreaction, Mixedphase** – реакція протікає в рідкій фазі, змішана фаза.

- **Vaporreaction, Mixedphase** – реакція протікає в паровій фазі, змішана фаза.

В області **Thermalmode: (Тепловий режим:)** вибирається тепловий режим (варіант розрахунку):

• **Isothermal (specifytemp) (Ізотермічний (визначити температуру))**. Для нього розраховується теплове навантаження. В цьому випадку в полі навпроти необхідно ввести значення температури. В осоружному випадку використовується температура вхідного потоку.

• **Adiabatic (noheatexchange) (Адіабатичний (без зміни тепла))**. Для цього режиму розраховується температура для РІЗ і температурний профіль для РІВ.

• **Specifyheatduty (Задане теплове навантаження)**. Для цього режиму у випадку РІЗ із заданим тепловим навантаженням ітераційно визначається температура. У полі навпроти задається кількість тепла, яке добавилося або віднялося від реакції. Використовуються глобальні одиниці вимірювання. У разі РІВ теплове навантаження рівномірно розподіляється на кожному кроці інтеграції і потім використовується для розрахунку температурного профілю.

• **Spec PFR temp. profile(later) (Заданий температурний профіль для РІВ)**. Цей режим використовується тільки у разі РІВ. Задаються значення температур на кожному кроці інтеграції і для них розраховуються відповідні теплові навантаження. Потім вони підсумовуються і визначається загальне теплове навантаження.

• **Specify PFR utility U (Задана умова допоміжного потоку для РІВ)**. У цьому режимі теплове навантаження на кожному кроці інтеграції обчислюється індивідуально з використанням загального коефіцієнта теплопередачі. У поле навпроти вводиться значення коефіцієнта теплопередачі. Це значення необхідне тільки для РІВ.

В області **Specifycalculationmode (Визначення режиму розрахунку)** вибирається режим розрахунку:

• **SpecifyVolume, Calculateconversion (Заданий об'єм, розрахувати ступінь перетворення)**.

• **Specifyconversion, Calculatevolume (Заданий ступінь перетворення, розрахувати об'єм)**.

Якщо обраний режим розрахунку **specifyvolume, Calculateconversion**, то в полі **ReactorVolume (Об'ємреактора)** для РІЗ задається об'єм. Для РІВ вводиться або об'єм, або об'єм як творення довжини, діаметра труб і числа труб. У режимі **Specify PFR utility U** об'єм задається тільки у вигляді творення. При режимі **SpecifyVolume; Calculateconversion** об'єм реактора використовується для обчислення ступеня перетворення реагентів, а також вихідних складових і умов.

Якщо вибраний режим розрахунку **Specifyconversion, Calculatevolume**, то об'єм використовується в РІВ для визначення розміру реактора.

У списку **KeyComponent (Ключовий компонент)** вибирається номер ключового компонента, щодо якого визначається об'єм реактора. Розрахунок пов'язаний із ступенем перетворення одного (ключового) компонента незалежно від числа реакцій.

Якщо вибраний режим розрахунку **Specifyconversion, Calculatevolume**, то в полі **Conversion (Ступінь перетворення)** задається ступінь перетворення

ключового компонента. При заданні цього параметра визначається об'єм реактора. Для РІЗ об'єм визначається часом перебування, для РІВ – поки не буде досягнутий необхідний ступінь перетворення ключового компонента.

Розділ **MoreSpecifications (Інші умови)** містить геометричні параметри і чисельні параметри для виконання рахунку. У цьому розділі вказується номер редагованої реакції.

Діалогове меню **Reaction (Реакція)** дозволяє користувачеві задати стехіометрію і кінетику реакції.

У діалоговому вікні повинна бути описана кожна реакція. Загальна кількість реакцій задається при заповненні поля **Numericreactions (Кількість реакцій)** з діалогового вікна **GeneralSpecifications (Загальні специфікації)**.

Моделювання кінетики хімічних реакцій виконується на підставі експериментальних даних з накопичення продуктів реакції, отриманих в експерименті. В результаті рішення цієї задачі можна визначити основні параметри рівняння Арреніуса кінетики хімічних реакцій:

$$r_i = A_i e^{-E_i / RT} * \prod_k^n (C_k)^{a_{ki}}$$

де  $r_i$  – швидкість  $i$ -ої хімічної реакції;

$A_i$  – передекспоненціальний множник в  $i$ -ої реакції;

$E_i$  – енергія активації  $i$ -ої реакції;  $C_k$  – концентрація  $k$ -ого компонента в  $i$ -ій реакції;

$a_{ki}$  – порядок  $i$ -ої реакції для  $k$ -ого компонента.

Топологія модуля KREA залежить від наявності допоміжного потоку. Якщо цей потік відсутній (термічні режими 1–4), то у реактора може бути безліч входів і три виходи, де 1 = пара, 2 = перша рідина, 3 = друга рідина. Якщо заданий допоміжний потік (термічний режим = 5), то у реактора може бути два входи і два виходи. Перший вхід і вихід містять потоки процесу, а другий вхід і вихід – допоміжні потоки.

**9. Запуск програми моделювання.** Для проведення моделювання технологічної схеми використовуються команди меню **Run (Рахунок)**. За допомогою цих команд можна задавати послідовність розрахунку і виконувати контроль над ходом розрахунку.

Розглянемо варіанти моделювання технологічної схеми:

- **RunAll (Рахунок всього)** – розраховує все устаткування технологічної схеми. При цьому програма в першу чергу перевіряє всі дані перед початком розрахунків. У процесі перевірки вона може видавати як попередження, так і повідомлення про помилки. Розрахунок не виконуватиметься до тих пір, поки не будуть усунені причини цих помилок. Послідовність розрахунку модулів устаткування визначається програмою автоматично.

- **RunSelectedUnits (Рахунок вибраного устаткування)** – виконує розрахунок одної або більше за одну одиницю вибраного устаткування. Процес вибору той же, що і при роботі з командою **UnitOps (Устаткування)**. Команда може використовуватися для завдання послідовності розрахунку.

- **Recycles (Рецикли)** – дозволяє ідентифікувати порядок розрахунку рециклів технологічної схеми та розрахувати їх.

- **Calculationsequence (Послідовність розрахунку)** – дозволяє задати свою послідовність розрахунку.

Після виконання команди на екран виводиться вікно **ChemCadMessagebox** повідомленням про результат їх розрахунку. Для продовження розрахунку треба натиснути кнопку **Yes (Так)**, інакше **No (Немає)**.

### 9.1. Інтерактивний перегляд результатів.

Переглядання отриманих результатів використовується як на проміжних етапах моделювання технологічної схеми, так і після його завершення. При перегляданні у будь-який момент всі дані для моделювання і його результати можна роздрукувати або записати у файл.

Для перегляду використовуються команди меню **Results (Результати)** і **Plot (Граф.)**, доступні в режимі **Mode: Simulation**.

### 9.2. Переглядання за допомогою меню Results (Результати).

Команди меню **Results (Результати)** використовуються при перегляді на екрані всіх даних для моделювання і результатів моделювання в табличній формі. Результати перегляду виводяться у вікні редактора **Word Pad**. Перед переглядом за допомогою команди **Results/SetFlowUnits (Результати/розмірності витрати)**, при необхідності, можна вибрати нові глобальні розмірності витрати.

Команда **Results/StreamCompositions (Результати/Склади потоків)** виводить на екран підменю з різними командами для переглядання складу потоків технологічної схеми:

- **SelectStreams (Вибір потоків)** – дозволяє задати один або більше за потоки для перегляду на екрані.

Вибір потоків виконується аналогічно вибору, описаному раніше для команди **SelectStreams (Вибір потоків)**:

- **AllStreams (Всі потоки)** – виводить на екран складу всіх потоків технологічної схеми.

- **FeedStreams (Потоки живлення)** – дозволяє проглянути складу тільки потоків живлення технологічної схеми.

- **ProductStreams (Потоки продуктів)** – вибирає для перегляду тільки продуктиві потоки.

- **UnitStreams (Потоки одиниці устаткування)** – виводить на екран тільки ті потоки, які пов'язані з обраною одиницею устаткування.

Команда **Results/StreamProperties (Перегляд/властивості потоків)** виводить на екран підменю з різними командами для переглядання властивостей потоків.

Команда **SelectProperties (Вибрати властивості)** дозволяє вибрати потрібні властивості потоків, які виводитимуться при перегляді.

Вибір потоків виконується аналогічно вибору, описаного для команди **StreamCompositions (Склади потоків)**.

За допомогою наступних команд меню **Results** можна:

- **UnitOp's (Устаткування)** – проглянути початкові дані і розраховані величини для однієї або більше вибраних одиниць устаткування.

- **Topology (Топологія)** – вивести на екран матрицю процесу.

- **Thermodynamics (Термодинаміка)** – вивести на екран встановлені для поточного завдання термодинамічні опції.

- **TowerProfiles (Профілі по колоні)** – проглянути профіль ректифікації для вибраної колони: число ступенів, температуру, тиск, витрати рідини і пари, витрату живлення, вихід продукту, теплове навантаження кип'ятильника і конденсатора, витрату, навантаження циркуляційного насоса.

- **TrayCompositions (Склади на тарілках)** – вивести на екран значення температури, тиску, складу рідини і пари, константи рівноваги для кожного ступеня вибраної колони ректифікації.

- **TrayProperties (Властивості на тарілках)** – виконати переглядання транспортних властивостей рідини і пари для вказаних ступенів вибраної колони ректифікації.

- **DistillationCurves (Криві дистиляції)** – вибрати один або більше потоків для переглядання повного набору кривих дистиляції в табличній формі.

- **Convergence (Збіжність)** – вивести на екран всі встановлені параметри збіжності.

Результати перегляду можна зберегти у файлі формату **doc**, виконавши команду **Файл/зберегти**.

## 10. Перегляд за допомогою меню **Plot(Граф.)**

Для графічного зображення результатів моделювання використовуються команди меню **Plot(Граф.)**. За допомогою цих команд можна викреслити профілі по колонах, зміни властивостей потоків і діаграми парорідкісної рівноваги.

## 11. Складання звіту. **ChemCad**

дозволяє створювати звіт про результати моделювання у вигляді таблиць. Їх можна вивести на екран, зберегти в текстовому файлі із стандартним кодуванням символів (ASCII), у файлі типу (PRN) або послати звіт на пристрій друкування. Програма має стандартний формат виведення звіту, проте при необхідності його можна змінити. Можна вказати, які частини звіту, а також які потоки і властивості будуть включені в звіт. Є опції для задання формату виведених чисел. Звіт можна отримати в табличній (текстовій) формі та у вигляді діаграми технологічного процесу.



## ПРАКТИЧНЕ ЗАНЯТТЯ № 1

### Тема: Моделювання вузла нейтралізації кислотних стоків підприємства з використанням пакета прикладних програм ChemCAD

**Мета:** придбання навиків роботи з пакетом прикладних програм моделювання об'єктів хімічної технології ChemCAD.

**Завдання:** Побудувати схему нейтралізації кислотних стоків на базі стехіометричного реактора, провести розрахунки матеріального балансу і дослідним шляхом визначити оптимальні параметри ПД-регулятора.

**Виконання:** задати параметри вхідного потоку; задати параметри реактора; запустити програму моделювання в статичному і динамічному режимах; знайти оптимальні параметри ПД-регулятора при  $\text{pH}=7$ ; проглянути результати моделювання на екрані; побудувати графіки зміни витрати NaOH,  $\text{pH}$  від часу.

**Оцінка:** Формування необхідних уявлень про пакет прикладних програм CHEMCAD.

Час виконання завдань: 4 години.

#### Робоче завдання

1. Завантажити пакет прикладних програм CHEMCAD.
2. Створити новий файл технологічної схеми:  $\text{pH\_ФІО}$ .
3. Побудувати технологічну схему відповідно до з рис. 1. Ввести роботу моделі в статичний режим: **Run/Convergence/SteadyState**.

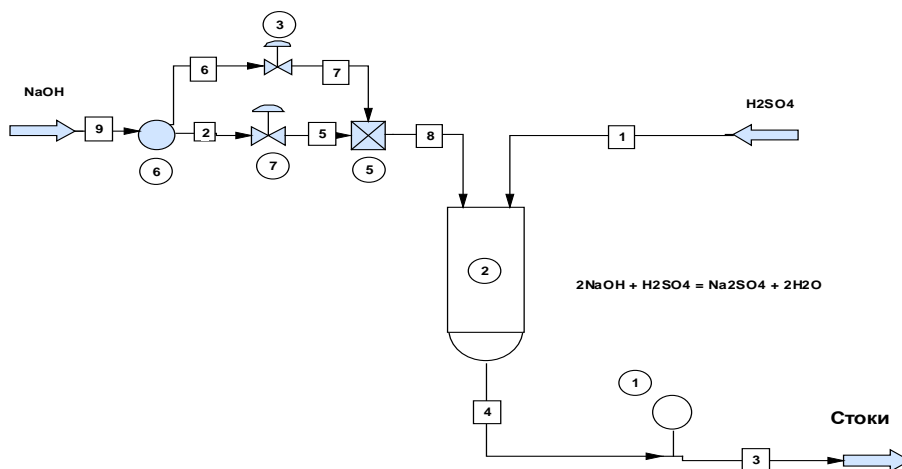


Рис. 1 – Схема нейтралізації кислотних стоків на базі стехіометричного реактора

4. Ввести початкові параметри технологічних потоків.

ID stream		1	9
Sodium hydroxide	kg/h		1.0
H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	kg/h	10.0	
Water	kg/h	90.0	9.0
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	kg/h		
T	C	25	25
P	atm	2	2

5. Ввести параметри стехіометричного реактора.

Isothermal, 3	60
Key component	H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>
Frac. conversion	0.999
Stoichiometric coefficients	
Sodium hydroxide	-2
H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	-1
Water	2
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	1
<b>molbase</b>	+
<b>Liquid state</b>	+

6. Ввести параметри NodeUnitOp.

Variablepressure	+
9 stream	UseCurrentStreamRate
6 stream	Flow set by UnitOp
2 stream	Flow set by UnitOp

7. Ввести параметр ПД-регулятора.

Activatecontroller	+
Setpoint	7.0
PB*	200
Ti*	1
Td*	0
Controlvalve ID	3
VariableMin	2

VariableMax	10
Ctrl input min, ма	4
Ctrl input max, ма	20
ControlValve	3
Error = Xset – X	+
Stream	4
Variable	22 pH value
Component	none
Variableunit	Internal unit

\*початкові значення

8. Ввести параметри клапанів.

ID	3	7
Cv	1	1
Controller ID	1	
Fix valve position, adjust flowrate	+	
Linearvalve	+	+
Valveposition %	1.0	31.1
Downstreampressure, атм	1.9	1.9

9. Перевірити роботу створеної моделі в стаціонарному режимі. У разі відсутності помилок перейти в динамічний режим: **Run/Convergence/dynamics**.

10. Встановити параметри динамічного режиму Run / **Dynamics /SetRunTime**.

Вкладка	Number of operation states	Time	Run time	Step size, min
General/ головна	1			
Step 1/Крок 1*		+	500	1
Record streams				

\*початкові значення

11. Встановити параметри графічного виведення результатів.

### Вкладка Record streams

ID run timeplot	General	Plot stream properties
4	min	pH value
6	min	mass flowrate

12. Запустити програму (**Run**) і міняючи параметри ПІД-регулятора (PB, Ti, Td), досягти оптимального значення **pH**.

#### Зміст звіту

**Звіт повинен містити: номер, назву і ціль роботи; технологічну схему і короткий її опис; таблиці з даними вимірювань і результатами розрахунку; графіки витрати NaOH і pH; висновки про наслідки досліджень.**

## ПРАКТИЧНЕ ЗАНЯТТЯ № 2

**Тема:** *оптимізація процесу пропан-пропиленової ректифікації з використанням пакета прикладних програм ChemCAD*

### Вступ

Пропан і пропилен є суміснокиплячими речовинами, тому їх дуже важко розділити один від одного. Проте, ректифікація при підвищеному тиску і достатній кількості контактних пристроїв є стандартною технологією.

Парорідинна рівновага сумішей пропан/пропилен, етан/етилен схильні до впливу взаємодії між компонентами. Для компенсації неідеальностей у цих сумішах використовуються спеціальні параметри бінарної взаємодії (VIPs) при розрахунках фазової рівноваги за рівняннями Соаве-Редліха-Квонга або Пенга-Робінсона.

**Мета:** придбання навиків роботи з пакетом прикладних програм моделювання об'єктів хімічної технології ChemCAD.

– моделювання процесу розділення суміснокиплячих сумішей;  
– моделювання колони ректифікації з парціальним конденсатором;  
– оптимізація технологічної системи з використанням вбудованих інструментів ChemCAD.

**Завдання:** Побудувати схему пропан-пропиленової колони ректифікації, провести розрахунки матеріального балансу і дослідним шляхом визначити оптимальні параметри.

**Виконання:** задати параметри вхідного потоку; задати параметри колони ректифікації; запустити програму моделювання в статичному режимі; знайти оптимальні параметри колони ректифікації; проглянути результати моделювання на екрані; побудувати графіки зміни енергії ребойлера залежно від кількості тарілок і місця введення живлення колони.

**Оцінка:** Формування необхідних уявлень про пакет прикладних програм CHEMCAD.

Час виконання завдань: 4 години.

### Робоче завдання

1. Завантажити пакет прикладних програм **CHEMCAD**.
2. Створити новий файл технологічної схеми: **ОРТ\_ФІО**.
3. Побудувати технологічну схему відповідно до з рис. 2. Ввести роботу моделі в статичний режим: **Run/Convergence/SteadyState**.

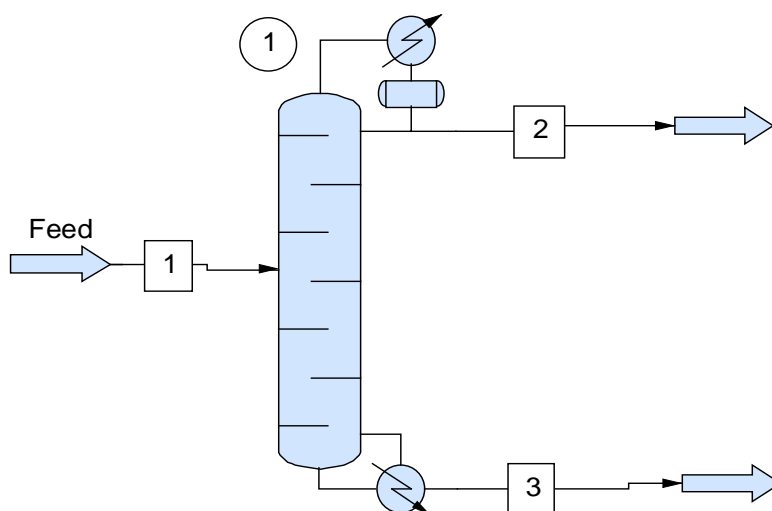


Рис. 2 – Схема розділення пропан-пропиленової фракції в **SCDScolumn**

ID stream	1	
Етан ( $C_2H_6$ )	10.0	kg/h
Пропилен ( $C_3H_6$ )	10500	kg/h
Пропан ( $C_3H_8$ )	4400	kg/h
N-Бутан ( $C_4H_{10}$ )	90.0	kg/h
T	40	С
P	17	бар

5. Ввести специфікацію колони

General		
Тип конденсатора ( <b>CondenserType</b> )	Повний ( <b>TotalorNone</b> )	
Тиск верху колони ( <b>TopPressure</b> )	15.5	бар
Перепад тиску в конденсаторі ( <b>Condpressdrop</b> )	1.5	бар
Перепад тиску в колоні ( <b>Colmpressdrop</b> )	1	бар
Кількість тарілок ( <b>No. of stages</b> )	150	
Тарілка живлення ( <b>Feed tray for stream #</b> )	110	
Convergence/Ефективність тарілок ( <b>Stage efficeincy</b> )		
Верхня тарілка ( <b>Top stage</b> )	0.6	
Остання тарілка ( <b>Last stage</b> )	0.6	
TemperatureEstimates		
Верх колони ( <b>T Top</b> )	40	3
Низ колони ( <b>T Bottom</b> )	50	3
Specifications/Condenser mode		
<b>12 Distillate component mass fraction</b> , пропилен	0.95	
<b>12 Bottom component mass fraction</b> , пропан	0.95	

6. Розрахунок коефіцієнтів фазової рівноваги.

(**Global K Value option**):

Пенг-Робінсон (**Peng-Robinson**);

Спеціальні параметри бінарної взаємодії (**SpecialSRK/PRBips**).

**Інженерні одиниці (Engineering Units) Alt SI.**

7. При заданих параметрах суміші, що розділяється, специфікації колони, необхідній якості розділення підібрати оптимальну тарілку живлення, при якій навантаження на кип'ятильник (**39 calcrebrduty**) є мінімальним.

Рекомендується проводити пошук оптимальної тарілки живлення в інтервалі тарілок [25;125] за допомогою інструменту «**Sensitivitystudy**» (**Аналіз чутливості**). Для прискорення процесу розрахунку рекомендується розбити інтервал на 10 ділянок. Далі, звуживши інтервал пошуку до 50-70 тарілок, уточнити результат пошуку. Провести розрахунок колони з оптимальною тарілкою живлення.

Завдання (додаткове)

При обмеженні на максимальне навантаження на кип'ятильник і необхідній якості пропилену в дистилаті визначити мінімально можливу кількість тарілок у колоні. Максимально допустимі за модулем навантаження на кип'ятильник і необхідний склад пропилену в дистилаті прийняти рівними:

№ варіанта	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Навантаження на кип'ятильник, МДж/год	60 000	65 000	70 000	75 000	80 000	85 000	90 000	95 000	97 000	99 000
Склад пропилену % мас	96.5	96.3	96.1	95.9	95.7	95.5	95.3	95.1	94.9	94.7

Умова оптимальності тарілки живлення також повинна виконуватися.

Пошук рішення  $\min$  (**39 calcrebrduty**) виконується за допомогою інструменту «Sensitivitystudy» (аналіз чутливості). Як незалежна змінна виберіть номер тарілки живлення (50-70); як незалежний параметр – число тарілок у колоні (118-124).

### Зміст звіту

**Звіт повинен містити:** номер, назву і ціль роботи; технологічні схеми і короткий їх опис; таблиці з даними вимірювань і результатами розрахунку; графіки навантаження на кип'ятильник від кількості тарілок і оптимального введення живлення в режимі Sensitivity; розрахунок оптимального введення живлення при даній кількості тарілок і якості виходу продукту в режимі Optimization; порівняння і висновки про наслідки досліджень.

## ПРАКТИЧНЕ ЗАНЯТТЯ № 3

**Тема:** Оптимізація процесу синтезу ацетилену з етилену в кінетичному реакторі із використанням пакета прикладних програм ChemCAD

**Мета:** придбання навиків роботи з пакетом прикладних програм моделювання об'єктів хімічної технології ChemCAD.

**Завдання:** Побудувати схему синтезу ацетилену в кінетичному реакторі, провести розрахунки матеріального балансу та визначити оптимальні параметри синтезу.

**Виконання:** задати параметри вхідного потоку; задати параметри реактора; запустити програму моделювання в статичному і динамічному режимах; знайти оптимальні параметри синтезу ацетилену; проглянути результати моделювання на екрані; побудувати графіки зміни ацетилену, C, H<sub>2</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> від температури.

**Оцінка:** Формування необхідних уявлень про пакет прикладних програм ChemCAD.

Час виконання завдань: 4 години.

### Робоче завдання

1. Завантажити пакет прикладних програм ChemCAD.
2. Створити новий файл технологічної схеми: Opt\_ПІБ.
3. Побудувати технологічну схему відповідно до з рис. 3. Ввести роботу моделі в статичний режим: **Run/Convergence/SteadyState**.

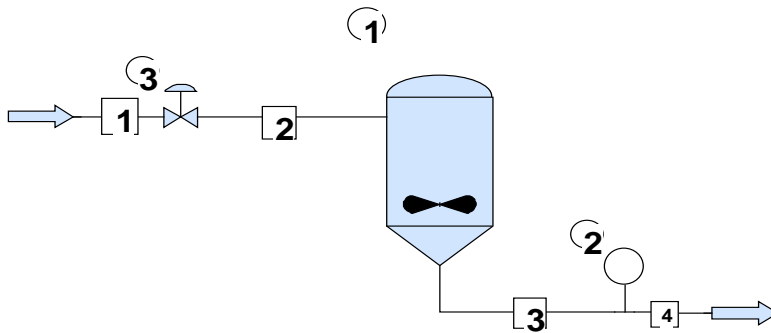


Рис. 3 – Схема стабілізації процесу синтезу ацетилену на базі кінетичного реактора

4. Обрати компоненти реакції: thermophysical/select **components**.

**Етилен/ethene (C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>).**

**Ацетилен/acetylene (C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>).**

**Водень/hydrogen (H<sub>2</sub>).**

**Вуглець/carbon (C).**

5. Ввести початкові параметри технологічних потоків.

ID stream		1
T	C	25
P	atm	1
<b>Ethene</b>	kg/h	600

6. Ввести параметри кінетичного реактора.

Numberofreactions	<b>2</b>	
Kineticrateexpression	<b>Standardall reactions</b>	
Vaporreaction, Mixedphase	+	
Isothermal (specifytemp)	+	
Stoichiometric coefficients		
	Реакція №	
	<b>1</b>	<b>2</b>
<b>Ethene</b>	-1	
<b>Acetylene</b>	1	-1
<b>Hydrogen</b>	1	1
<b>Carbon</b>		2
<b>Frequencyfactor</b>	<b>2e+011</b>	<b>8e+012</b>
<b>ActivationEnergy</b>	<b>65000</b>	<b>87000</b>



7. Ввести параметри ПДД-регулятора.

Activate controller	+
Setpoint	300
PB*	5000
Ti*	1
Td*	0
Controlvalve ID	3
VariableMin	250
VariableMax	400
Ctrl input min, ма	4
Ctrl input max, ма	20
ControlValve	3

\*початкові значення

8. Ввести параметри клапана.

ID	3
Cv	800
Controller ID	2
Fix flowrate, adjust valve position	+
Linearvalve	+
Valveposition %	100.0
Downstreampressure, атм	0.9

9. Перевірити роботу створеної моделі в стаціонарному режимі. У разі відсутності помилок перейти в динамічний режим: **Run/Convergence/dynamics**.

10. Встановити параметри динамічного режиму **Run / Dynamics /SetRunTime**.

Вкладка	Number of operation states	Time	Run time	Step size, min
General/ головна	1			
Step 1/Крок 1*		+	100	1

\*початкові значення

11. Встановити параметри графічного виведення результатів.

Error = Xset – X	+
Stream	4
Variable	Comp mass rate
Component	<b>Acetylene</b>
Variableunit	Mol/Mass

## Вкладка Record streams

ID run timeplot	General		
3	min	5.Massp	Acetylene

12. Запустити програму(**Run**) і міняючи параметри ПД-регулятора (PB, Ti, Td), досягти мінімального значення часу регулювання.

13. Побудувати технологічну схему відповідно до рис. 4. Ввести параметри по п. 4, 5, 6, 9, 10.

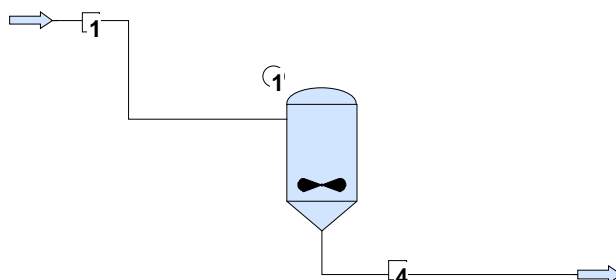


Рис. 4 – Схема аналізу процесу синтезу ацетилену на базі кінетичного реактора в режимах **Sensitivity**и**Optimization**

14. Провести аналіз процесу синтезу ацетилену в режимі sensitivity: **Run/Sensitivitystudy/newanalysis**. Створити варіант розрахунку "**Sensitivity\_ФИО**". Відкрити вкладку edit та ввести параметри:

Independing variable 1			
streame	1		
variable	temperature		
component	-		
Variable Unit	temperature		
Variable name	T		
Vary this variable from	300	1200	50

Equipment	1		
variable	Length of Tubes		
component	-		
Variable Unit	Length		
Variable name	L		
Vary this variable from	50	100	

Depending variable 1	
streame	4
variable	Comp mass rate
component	Acetylene
Variable Unit	16 Mass rate
Variable name	Acetylene

**Запустити процес: Run/ Sensitivity/Runall** визначити температуру максимального виходу ацетилену при різних довжинах реактора.

15. Провести аналіз процесу синтезу ацетилену в режимі optimization: **Run/ Optimization /new**. Створити варіант розрахунку "**Optimization\_ФНО**". Відкрити вкладку DefineObjectiveFunction та ввести параметри:

Title	<b>Opt_1</b>
stream	<b>2</b>
variable	<b>Comp mass rate</b>
component	<b>Acetylene</b>
Variable Unit	<b>1 mol/Mass</b>
Object name	<b>Acetylene</b>
Maximize	<b>+</b>

Відкрити вкладку Independent **variable** і ввести параметри:

Title	<b>Opt_1</b>		
stream	<b>1</b>		
variable	<b>temperature</b>		
component	<b>-</b>		
Variable Unit	<b>temperature</b>		
Variable name	<b>T</b>		
Min/Max/Initial value	<b>300</b>	<b>1200</b>	<b>300</b>

Натиснути вкладку **PerformOptimization** і провести розрахунок оптимальної температури.

### Зміст звіту

**Звіт повинен містити: номер, назву і ціль роботи; технологічні схеми і короткий опис; таблиці з даними вимірювань і результатами розрахунку; графіки виходу ацетилену при T=900°C та різних параметрах ПД-регулятора; графіки зміни витрати етилену та ацетилену по довжині реактора; графіки виходу ацетилену в режимі Sensitivityи Optimization; порівняння і висновки про наслідки досліджень.**

## ПРАКТИЧНЕ ЗАНЯТТЯ № 4

**Тема:** визначення коефіцієнтів ПІД-контролера при моделюванні автоматизованих систем управління із застосуванням пакета ChemCAD.

**Мета:** набуття навиків роботи з пакетом прикладних програм моделювання об'єктів хімічної технології ChemCAD.

**Завдання:** Побудувати схему автоматичної підтримки рівня рідини в резервуарі та провести розрахунок настройок ПІД-контролера в програмі.

**Виконання:** задати параметри вхідного потоку; задати параметри реактора; запустити програму моделювання в статичному і динамічному режимах; знайти оптимальні параметри настройок ПІД-контролера в програмі CHEMCAD на прикладі локального контуру управління рівнем рідини в резервуарі.

**Оцінка:** Формування необхідних уявлень про пакет прикладних програм CHEMCAD.

Час виконання завдань: 4 години.

### Робоче завдання

1. Завантажити пакет прикладних програм **ChemCAD**.
2. Створити новий файл технологічної схеми: **ПІД\_ПІБ**.
3. Побудувати технологічну схему відповідно до рис. 5. Ввести роботу моделі в статичний режим: **Run/Convergence/SteadyState**.

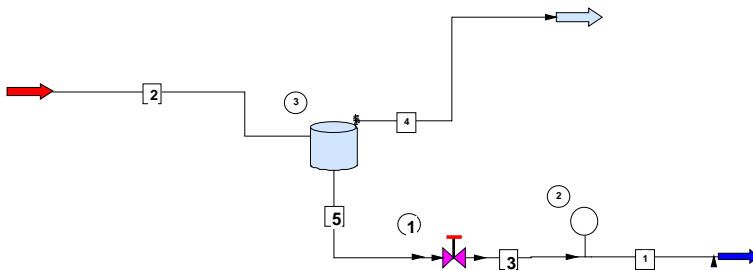


Рис. 5 – Стабілізація рівня рідини в резервуарі за допомогою ПІД-регулятора

4. Обрати компонент: **thermophysical/selectcomponents. Water (H<sub>2</sub>O)**
5. Ввести початкові параметри технологічних потоків.

<b>ID stream</b>		2
T	C	20
P	atm	3
<b>Water</b>	kg/h	20000

6. Ввести параметри резервуара (**DynamicVessel**).

Відкрити вкладку **General** та ввести параметри:

Verticalvessels	+	
Diameter, м	<b>1.128</b>	
Cylinderheight, м	<b>2</b>	
Headtype	<b>flat</b>	
InitialChargeOption	<b>0 Fromoutlet StreamComposition</b>	
InitialLiquidlevel 1	<b>0</b>	
Vesselthermalmode	<b>AdiabaticatFixedPressure</b>	
FixPressure	+	<b>3 атм</b>
OptionalInput		
Inlet nozzle position from top, м	<b>1.5</b>	
IncludeStaticHead	+	
Includecompression/expansioneffect	+	
Recorderon	+	

Відкрити вкладку **OutletFlow** та ввести параметри.

Stream ID	5
Mode	3 Control valve or UnitOp
Specifications	1

7. Ввести параметри ПД-регулятора

Activatecontrolle r	+
Setpoint	1.4
PB*	1000
Ti*	
Td*	
Controlvalve ID	1
VariableMin	1
VariableMax	2
Ctrl input min, ма	4
Ctrl input max, ма	20
Error = X – Xset	+
Eequipment ID	3
Variable	43 Calc lev 1
Component	none
Variableunit	18 length

\*початкові значення

8. Ввести параметри клапана

<b>ID</b>	<b>1</b>
Cv	<b>200</b>
Controller ID	<b>2</b>
Fix flowrate, adjust valve position	+
Linearvalve	+
Valveposition %	<b>8.55</b>
Downstreampressure, атм	<b>0.9</b>

9. Перевірити роботу створеної моделі в стаціонарному режимі. У разі відсутності помилок перейти в динамічний режим: **Run/Convergence/dynamics**.

10. Встановити параметри динамічного режиму **Run / Dynamics /SetRunTime**.

<b>Вкладка</b>	<b>Number of operation states</b>	<b>time</b>	<b>Run time</b>	<b>Step size, min</b>
<b>General/ головна</b>	<b>1</b>			
<b>Step 1/Шаг 1*</b>		+	<b>200</b>	<b>0.5</b>

\*початкові значення

11. Встановити параметри графічного виведення результатів.

**Вкладка Record streams**

<b>ID</b>	<b>Plot frequency</b>	<b>Plot stream Properties</b>
<b>2</b>	<b>1 min</b>	<b>Mass flowrate</b>

**Вкладка Record UnitOps**

<b>ID</b>	<b>Plot frequency</b>	<b>Variable</b>
<b>3</b>	<b>1 min</b>	<b>43 Calc lev 1</b>

12. Запустити програму (**Run**) і методом незатухаючих коливань визначити параметри ПІД-регулятора (PВ, T<sub>i</sub>, T<sub>d</sub>), досягти мінімального значення часу регулювання.

## Метод незгасаючих коливань

Метод незгасаючих коливань припускає розрахунок робочих налаштувань будь-якого регулятора за двома етапами.

На першому етапі підбирається така настройка пропорційного регулятора (тобто вимикається інтегральна і диференціальна складові), при якій у замкнутій системі встановлюються незгасаючі коливання (рис. 6), тобто система знаходиться на межі стійкості. Це значення настройки  $C_1^{кр}$  називається критичним.

На другому етапі розраховуються робочі налаштування вибраного регулятора за наближеними формулами залежно від величини  $C_1^{кр}$  і періоду незгасаючих коливань  $T^*$ . При цьому робочі налаштування забезпечують ступінь загасання більше 0,75. Далі наводяться формули для розрахунку налаштувань різних регуляторів за методом Циглера-Нікольса.

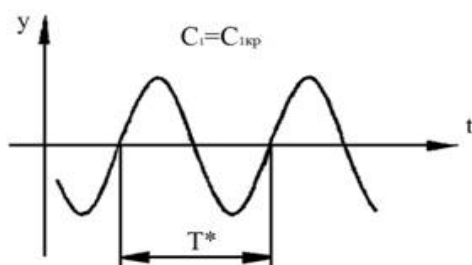


Рис. 6 – Ілюстрація до методу Циглера-Нікольса

П-регулятор	$C_1 = 0,5 \cdot C_1^{кр}$	(1)
ПІ-регулятор	$C_1 = 0,45 \cdot C_1^{кр}; C_1 / C_0 = T^* / 1,12$	(2)
ПІД-регулятор	$C_1 = 0,6 \cdot C_1^{кр}; C_1 / C_0 = T^* / 2; C_2 / C_1 = T^* / 8$	(3)

Викладений метод розрахунку налаштувань на першому етапі припускає проведення експерименту в замкнутій системі регулювання, в якому система виводиться на межу стійкості. Величини  $PВ$ ,  $T_i$  і  $T_{дв}$  СЕМСАД і  $C_1$ ,  $C_0$  і  $C_2$  з формул (1-3) пов'язані між собою внутрішніми алгоритмами програми. Так формули їх зв'язку в СЕМСАД матимуть вигляд:

$$\text{Пропорційна } P(C_1) = \frac{100}{PВ} \times \text{ошибка}; \quad (4)$$

$$\text{Інтегральна } I(C_0) = \frac{100}{PВ} \times \left(\frac{1}{T_i}\right) \times \int (\text{ошибка}) dt; \quad (5)$$

Диференціальна  $D(C_2) = \frac{100}{PB} \times T_d \times d(\text{ошибка})/dt$  . (6)

Таким чином, для початку необхідним методом підбору визначити  $PB^{кр}$  і за формулою (4) обчислити відповідне [2]  $C_1^{кр}$ . Далі, використовуючи формули (1-6), обчислювати значення коефіцієнтів ПІД-контролера для використовуваних типових регуляторів, характерних для регулювання необхідної величини. Приклад застосування методу незгасаючих коливань зображений на рис. 3-4.

### Зміст звіту

**Звіт повинен містити: номер, назву і ціль роботи; технологічні схеми і короткий їх опис; таблиці з даними вимірювань і результатами розрахунку; графіки автоколивань рівня резервуара; графіки зміни рівня при оптимальних параметрах ПІД-регулятора; зрівняння і висновки про наслідки досліджень.**

### Питання для самостійної роботи

1. Наведіть визначення системи, елемента системи, підсистеми.
2. Наведіть визначення ХТС, елемента ХТС.
3. Дайте визначення і наведіть приклади замкнутих і розімкнутих ХТМ.
4. З якою метою створюються замкнуті ХТС?
5. Що характеризує критерій ефективності ХТС?
6. Наведіть приклади технологічних і економічних критеріїв ефективності ХТС.
7. Якими загальносистемними властивостями володіє ХТС?
8. Дайте визначення властивості цілісності і членимості системи.
9. Дайте визначення властивості зв'язності системи.
10. До якої математичної задачі зводиться розрахунок комплексу і чому?
11. Дайте визначення властивості чутливості ХТС.
12. Дайте визначення властивості керованості ХТС.
13. Дайте визначення властивості надійності ХТС.
14. Дайте визначення властивості перешкодозахищеності ХТС.
15. Дайте визначення властивості стійкості ХТС.
16. Наведіть класифікацію задач мінімізації.
17. Чим відрізняється модельована схема від технологічної схеми? Які графічні форми використовуються для подання модельованої схеми?
18. Дайте класифікацію і призначення змінних елемента модельованої ХТС.
19. Дайте класифікацію потоків ХТМ.
20. З яких частин складається математична модель ХТС?
21. Що являють собою з фізико-хімічної точки зору математичні моделі елементів (апаратів) ХТС?



22. Що являють собою з математичної точки зору математичні моделі елементів (апаратів) ХТС?
23. Що являє собою математична модель структури ХТС?
24. На які два класи діляться змінні математичної моделі ХТС?
25. Чим відрізняються незалежні змінні від залежних?
26. Як розраховується число незалежних змінних?
27. Які завдання можна вирішити, якщо математична модель ХТС має ступені свободи?
28. Сформулюйте задачу розрахунку ХТС.
29. До якої математичної задачі зводиться розрахунок замкнутої ХТС?
30. Сформулюйте задачу оптимізації ХТМ.
31. Що включає в себе формалізована постановка задачі оптимізації ХТМ?
32. До якої математичної задачі зводиться задача оптимізації ХТМ?
33. Сформулюйте задачу оптимального синтезу.
34. До якої математичної задачі зводиться задача оптимального синтезу ХТС?
35. У чому полягає послідовний модульний підхід до розрахунку ХТС?
36. Для яких цілей проводиться структурний аналіз ХТМ?
37. Дайте визначення комплексу в структурі ХТС.
38. За якими критеріями обираються умовно-розриваючі потоки в комплексі?
39. Дайте загальний опис ітераційного процесу вирішення системи нелінійних рівнянь.
40. Сформулюйте загальну задачу мінімізації.
41. До якої математичної задачі зводиться розрахунок комплексу і чому?
42. Наведіть класифікацію задач мінімізації.

## СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Руководство пользователя: ПМП ХЕМКАД СС-DYNAMICS. Моделирование динамики протекания технологических процессов: учебн. / под ред. Т.Н. Гартман. – М., 2009. – 104 с.

2. Софиева, Ю.Н., Теория управления[Текст]: Текст лекций / Ю.Н. Софиева, А.Э. Софиев. – М.: МГУИЭ, 2002. – 184 с.

Електронні ресурси:

1. Н.Н Математическое моделирование химико-технологических систем с использованием программы ChemCad: Учебно-методическое пособие Зиятдинов Н.Н., Т.В. Лаптева, Д.А. Рыжов / Казан. гос. технол. ун-т. – Казань, 2008. – 160 с.

[http://portal.tpu.ru/SHARED/w/WALERY-W-B/instr\\_work/Optimization](http://portal.tpu.ru/SHARED/w/WALERY-W-B/instr_work/Optimization).

2. Абрамов К.В. Методика определения коэффициентов ПИД-контроллера при моделировании автоматизированных систем управления ректификационной колонной с применением пакета ChemCAD. Инженерный Вестник Дона (электронный журнал) № 2, 2011.

3. <http://cyberleninka.ru/article/n/metodika-opredeleniya-koeffitsientov-pid-kontrollera-pri-modelirovanii-avtomatizirovannyh-sistem-upravleniya-rektifikatsionnoy>.

4. <http://www.chemstations.net>.

5. <http://www.studfiles.ru/preview/4245990/>.



