



**UNIVERSITÀ DEGLI STUDI  
DI MILANO**

**Guida base all'uso del programma di  
simulazione di processo PRO II**

**Laboratorio di Impianti Chimici**

**Dr. Carlo Pirola**

**Dr.ssa Ilenia Rossetti**

**Dr. Gianluca Chiarello**

**Dr. Federico Galli**

**AA 2013-2014**

## 1. Generalità sul programma

PRO II (PROCESS II) è un programma di simulazione di impianto, in grado di supportare le più comuni operazioni unitarie, come le colonne di distillazione e i reattori CSTR o tubulari. Il programma è capace di calcolare gli equilibri liquido-vapore (VLE) e liquido-liquido (LLE) ed inoltre possiede un grande database di composti con i relativi dati sulle proprietà dei componenti puri (come ad esempio le tensioni di vapore!)

Una volta aperto il programma ci si trova di fronte una schermata rappresentata in Figura 1:

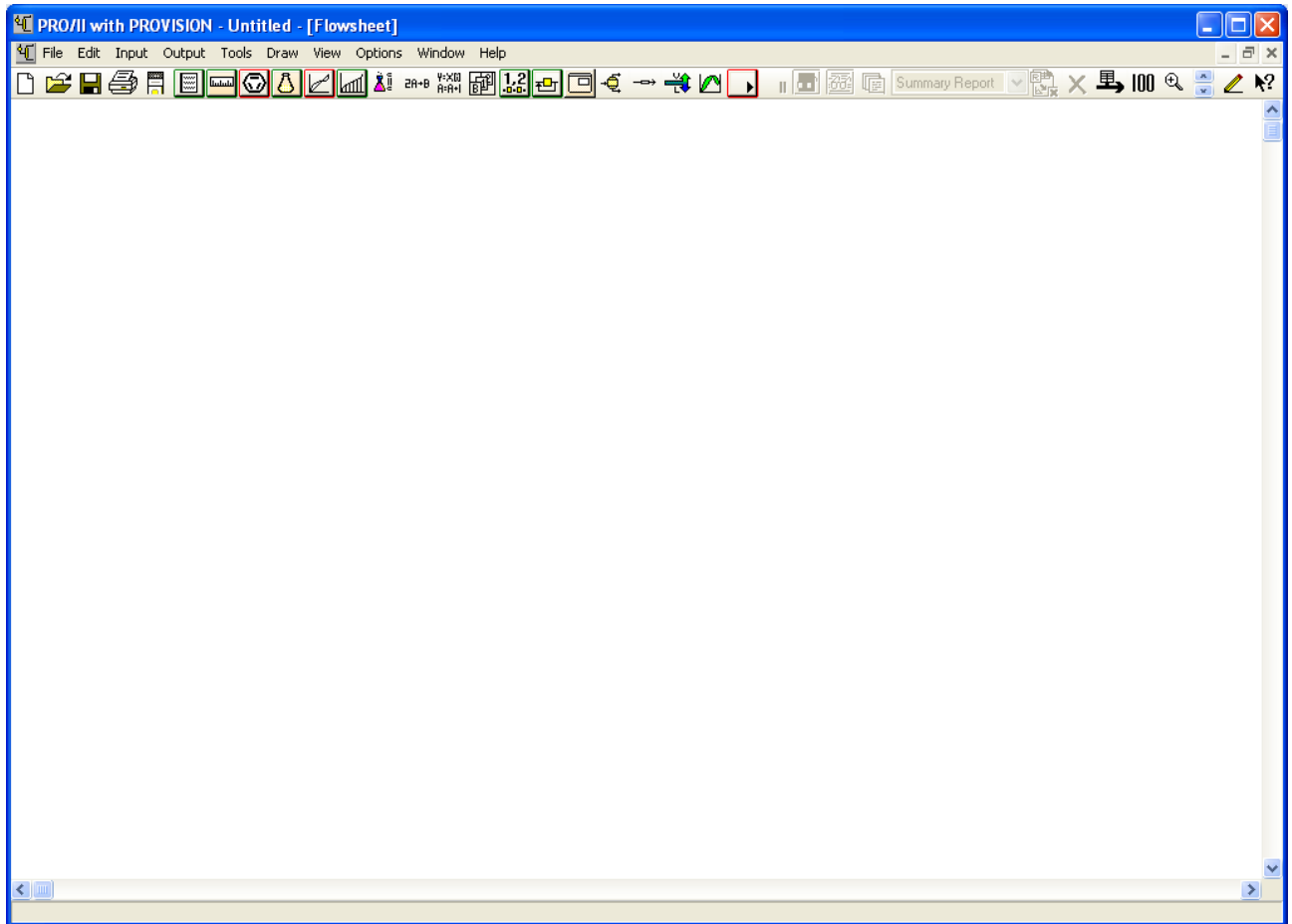


Figure 1








L'interfaccia grafica facilita l'utente soprattutto per quanto riguarda l'input dei dati. In particolar modo il software utilizza un sistema basato sui colori: in generale si possono presentare 6 casi diversi, elencati in Tabella 1:

Color	Significance
Red	Required data. Actions or data required.
Green	Optional or default data.
Blue	Data you have supplied
Yellow	Questionable data. A warning that a data value you supplied is outside the normal range.
Gray	Data field is not available to you
Black	Data entry is not required

Table 1

È quindi fondamentale prestare attenzione a riempire tutti i campi necessari altrimenti il programma non farà partire alcuna simulazione!

Analizzando la Figura 1 si nota sopra il foglio di lavoro una barra con delle icone, tralasciando le prime 4 (nuovo file, apri file, salva file, stampa file) si hanno in ordine:

- 
 : questa icona apre la PFD PALETTE, dalla quale si possono scegliere le varie operazioni unitarie (reattori, colonne, etc.)
- 
 : questa icona serve per aggiungere la descrizione del lavoro, come si nota l'icona è verde, e cioè l'inserimento di dati è facoltativo
- 
 : questa icona serve per impostare le unità di misura (UOM). È di colore verde perché all'apertura il programma imposta le unità anglosassoni. Cliccare su questa icona permette di modificare le unità di misura (scelta consigliata, e illustrata nel paragrafo 2.1)
- 
 : questa icona serve per aggiungere i componenti (molecole). La procedura sarà spiegata in dettaglio nel paragrafo 2.2.
- 
 : questa icona se cliccata permette di accedere a tutte le proprietà dei componenti selezionati (se presenti in database). Nel paragrafo 3 sarà riportato come risalire ad alcune proprietà fondamentali dei componenti
- 
 : questa icona serve per scegliere il sistema termodinamico (modello per il calcolo del coefficiente di attività). La procedura sarà illustrata in dettaglio nel paragrafo 4
- 
 : questo tasto permette di accedere al tool di calcolo dell'equilibrio liquido vapore binario (cioè per un sistema a 2 componenti, BVLE). La procedura per ottenere curve di equilibrio sarà mostrata in dettaglio nel paragrafo 5

- Le altre icone permettono tra le altre cose l'inserimento di dati cinetici o i flash degli stream, ma sono operazioni che non saranno illustrate in questa breve guida di base.
- **Tutte queste operazioni si possono effettuare anche cliccando sulla barra di comando INPUT e scegliendo poi il comando desiderato**

- 

## 2. Unità di misura e selezione dei componenti.

### 2.1. Impostazione UOM

Per impostare le unità di misura in un sistema differente da quello anglosassone è necessario osservare la seguente procedura:

1. Cliccare il tasto per accedere alla facciata della selezione delle unità di misura
2. Si presenterà all'utente una schermata come quella in Figura 2:

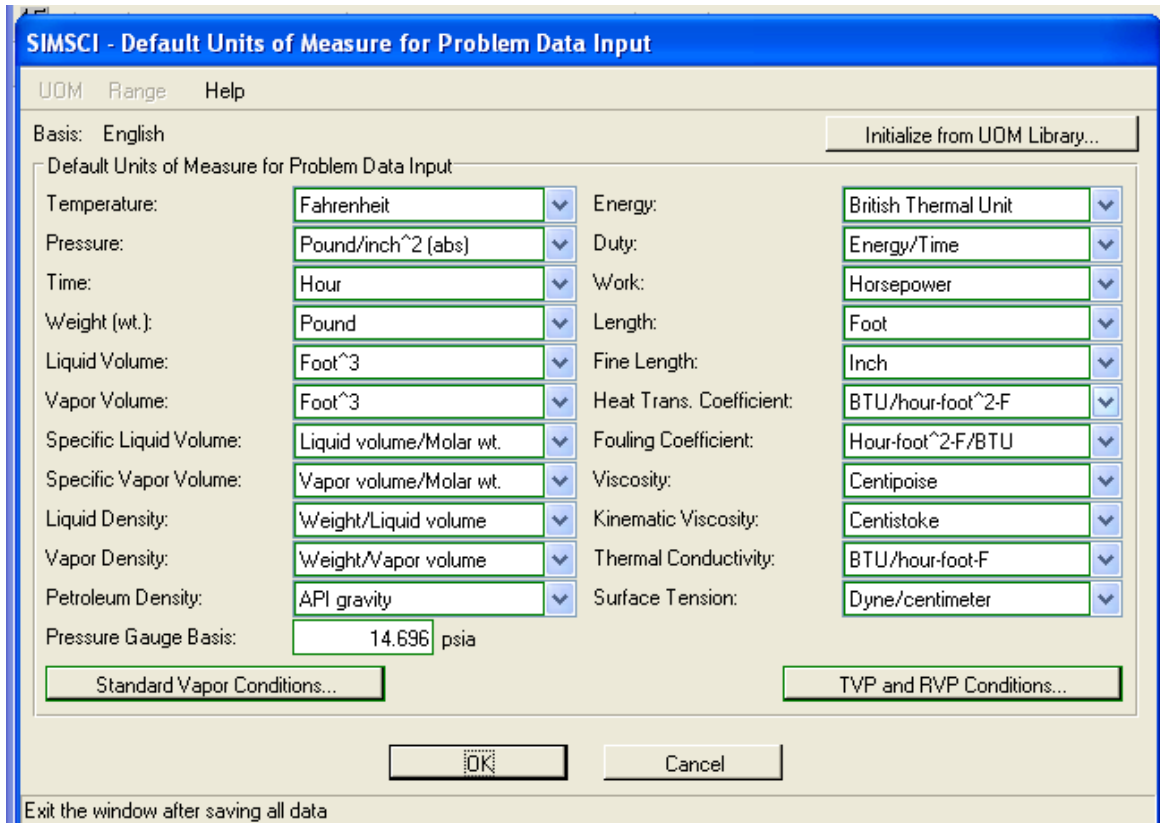



Figure 2

3. Come si vede le unità di misura servono per l'input dei dati e all'avvio sono impostate come unità anglosassoni. Cliccando sul tasto in alto a destra *INITIALIZE FROM UOM LIBRARY* è possibile cambiare il sistema di riferimento (si può scegliere tra sistema metrico, internazionale o anglosassone selezionandolo e cliccando OK). Inoltre è possibile modificare una ad una le UOM cliccando sulla barra scorrevole. [UOM consigliate P=atm, T=°C, peso=kg]. **L'unità di misura del peso si rilette sull'unità di misura delle moli: selezionare grammi significa poi mettere in input dati in moli (o meglio i grammi-mole), mentre se si sceglie come UOM della massa il Kg gli input per le moli saranno in Kmoli.**
4. Una volta sistemate le impostazioni cliccare su OK. **CLICCARE SEMPRE SU OK PERCHE' IL TASTO CANCEL RESETTA LE IMPOSTAZIONI A PRIMA DELL'APERTURA DELLA FINESTRA.**

### 2.2 Selezione dei componenti (COMPONENT SELECTION)

In questo paragrafo è mostrato come selezionare i componenti che si dovranno utilizzare. Il software possiede due grandi banche date: PROCESS bank e SIMSCI bank. Esse possiedono molti composti in comune ma può capitare che un composto non presente in un database sia presente nell'altro.

Per selezionare i componenti è opportuno seguire la procedura illustrata in questo paragrafo:

1. Cliccare sull'icona per accedere alla selezione dei componenti (  ), si aprirà una finestra come quella riportata in Figura 3:

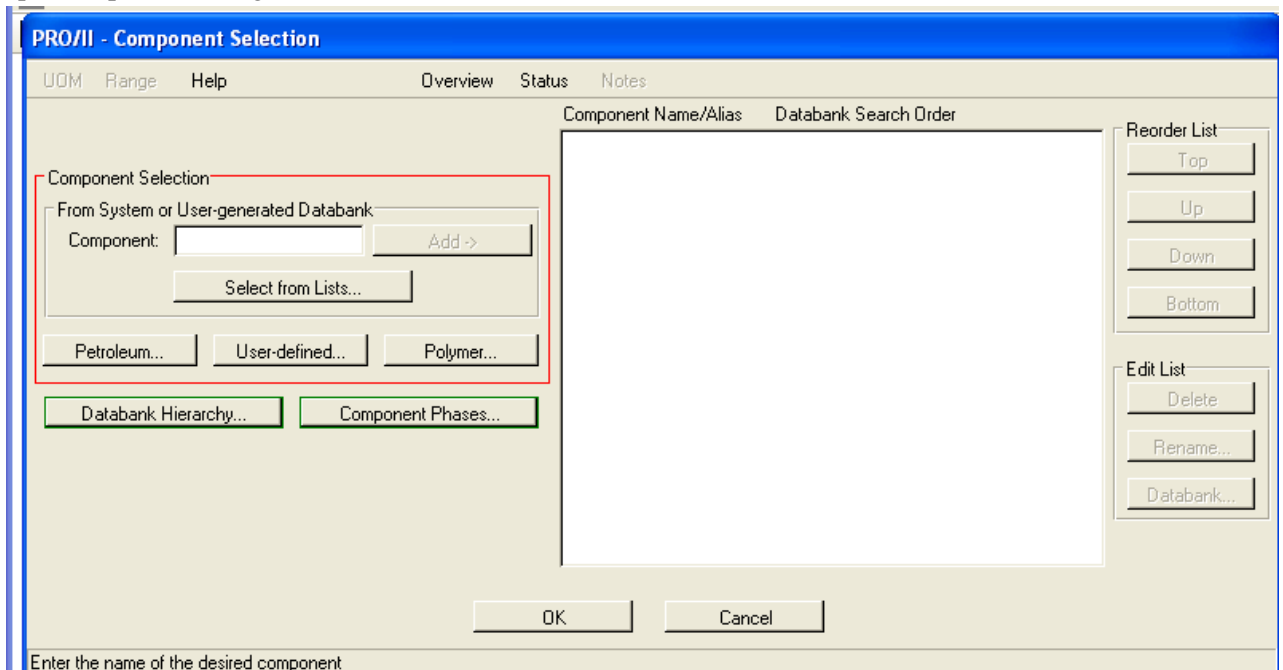


Figure 3

2. Come si nota il riquadro è di colore rosso, in quanto il programma ha necessariamente bisogno di almeno un componente per simulare qualcosa! Per accedere alle banche dati cliccare su *SELECT FROM LIST...* Si aprirà una finestra come quella in figura 4

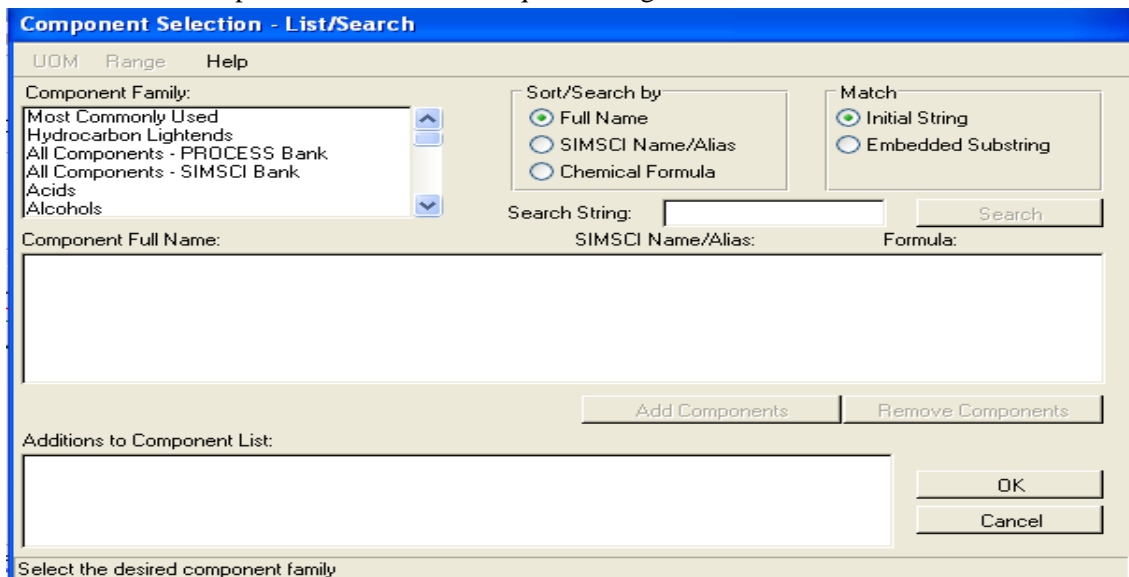


Figure 4

3. Selezionando con un clic la banca dati desiderata (ad esempio la PROCESS) comparirà una lista nel riquadro bianco in basso. Quello è l'elenco di tutti i componenti presenti nella banca dati selezionata.

- Per aggiungere un componente desiderato nello spazio vicino a *SEARCH STRING*: iniziare a scrivere il nome del componente e poi cercarlo nello spazio in basso. **Una volta trovato selezionarlo e cliccare sul tasto ADD COMPONENT** . ripetere l'operazione per tutti i componenti.
- UNA VOLTA AGGIUNTI TUTTI I COMPONENTI FARE CLIC SU OK**
- Se l'operazione è stata eseguita correttamente vi si dovrebbe presentare la seguente schermata (supponendo che voi vogliate aggiungere eptano e toluene come componenti):

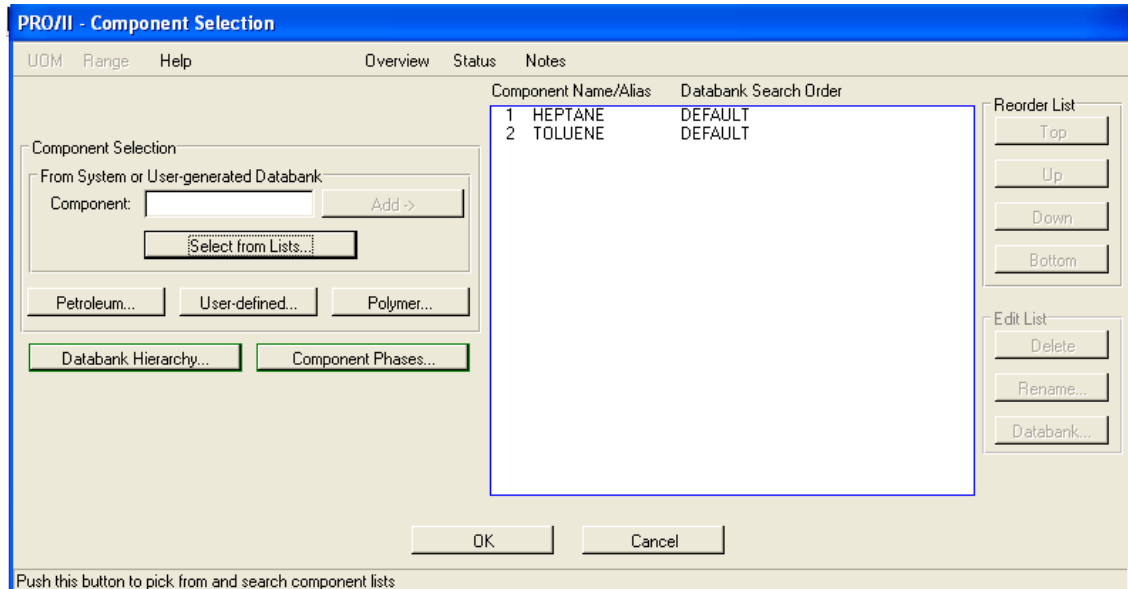


Figure 5

- Cliccare quindi su OK per confermare.

### 3. Proprietà dei componenti (COMPONENT PROPERTIES): massa molecolare, temperatura di ebollizione normale e tensione di vapore

Una volta inseriti correttamente i componenti è possibile attraverso il tasto *COMPONENT PROPERTIES*



accedere ad una vasta gamma di informazioni riguardo ai componenti. In particolare cliccando sull'icona vi si aprirà una pagina come quella riportata in figura 6:

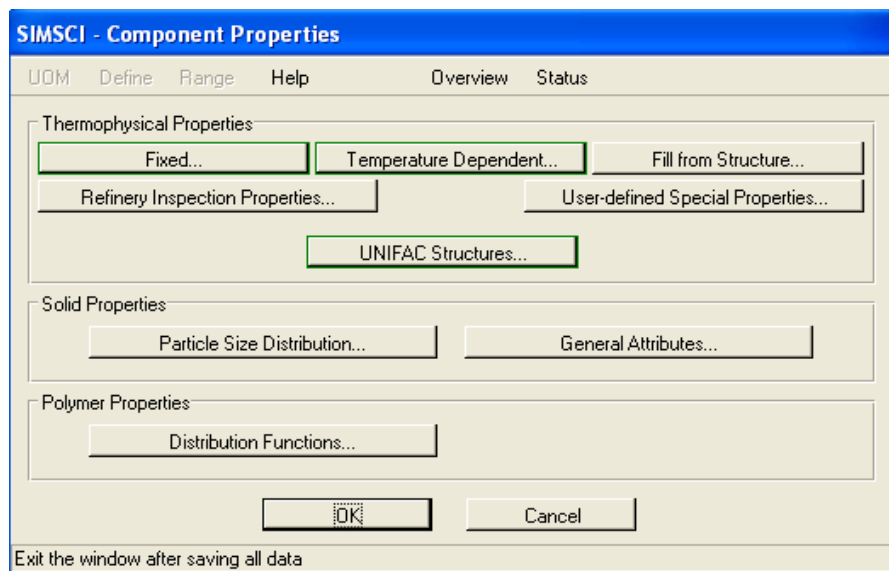


Figure 6

attraverso il tasto *FIXED* potete conoscere le proprietà della vostra sostanza che non dipendono da T e P, come peso molecolare, temperatura di ebollizione normale etc, mentre cliccando su *TEMPERATURE DEPENDENT* si accede alle proprietà dipendenti dalla temperatura del componente desiderato. La finestra che contiene tali proprietà è mostrata in Figura 7.

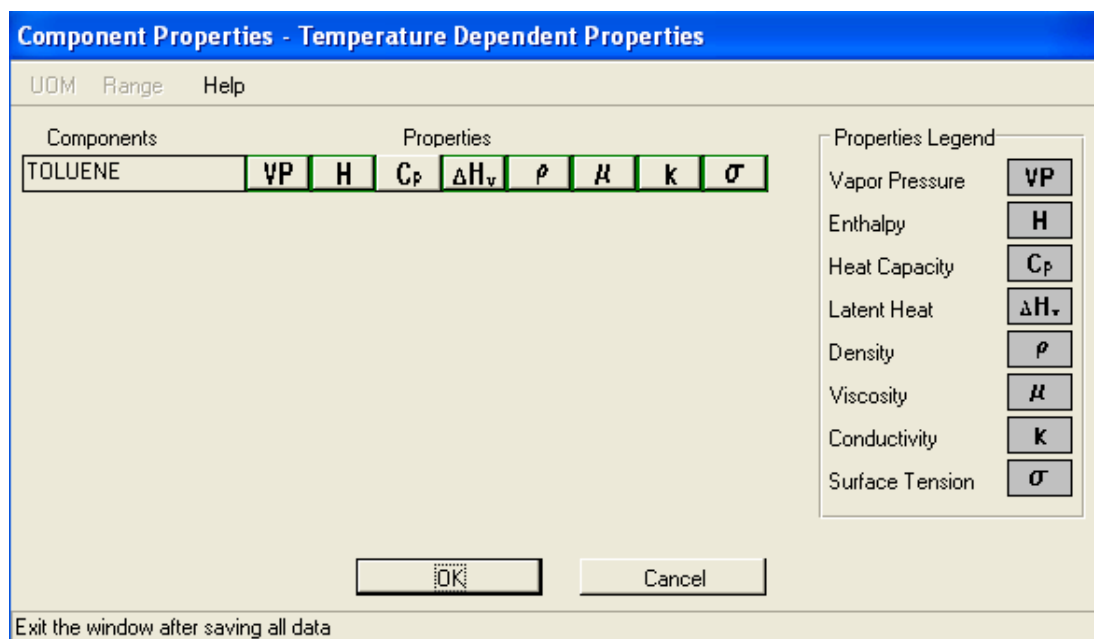


Figure 7

### 3.1. Tensione di vapore di un componente

Per ottenere il grafico che riporta l'andamento del logaritmo della tensione di vapore contro  $1/T$  è necessario cliccare sul tasto VP di un componente e successivamente cliccare su LIQUID. Si apre una finestra dove deve essere già segnato sia *SUPPLY LIQUID VAPOUR PRESSURE FOR XXX* (dove XXX è il componente) sia *CORRELATION COEFFICIENTS*. Cliccando su *ENTER DATA* si arriva a questa schermata (l'esempio riportato usa TOLUENE come componente di riferimento)

**Component Properties - Correlation Selection**

UOM Range Help

Liquid Vapor Pressure for TOLUENE Correlation Number: 20

Equation Form: Standard

$$\ln(\text{Prop}) = C_1 + \frac{C_2}{T} + C_3 \ln T + C_4 T^{C_5} + C_6 T^3 + C_7 T^6 + \frac{C_8}{T^2} + \frac{C_9}{T^4} + C_{10} T^2$$

The Equation supports Kelvin (K) and Rankine (R) Temperature units Only.

Units of Correlation  
Temperature: K  
Vapor Pressure: Pa

Logarithm Type for Property  
 Natural Logarithm [LN]  
 Base 10

Reference Pressure  
14.70 psia

Correlation Coefficients

Minimum Temperature: 178.18 K Maximum Temperature: 591.80 K

C1:	80.877	C2:	-6902.4	C3:	-8.7761	C4:	5.8034e-006
C5:	2.0000	C6:	0.00000	C7:	0.00000	C8:	0.00000
C9:	0.00000	C10:	0.00000	Exponential Factor, F:	0.00000		

Clear Data Restore Default View Curve... OK Cancel

Exit the window after saving all data

Figure 8

La figura mostra l'equazione di Clausius-Clapeyron in forma espansa e il valore dei coefficienti. Attraverso il tasto *VIEW CURVE* è possibile vedere il grafico che desideriamo, dalla schermata che ci si presenta (riportata in Figura 9).

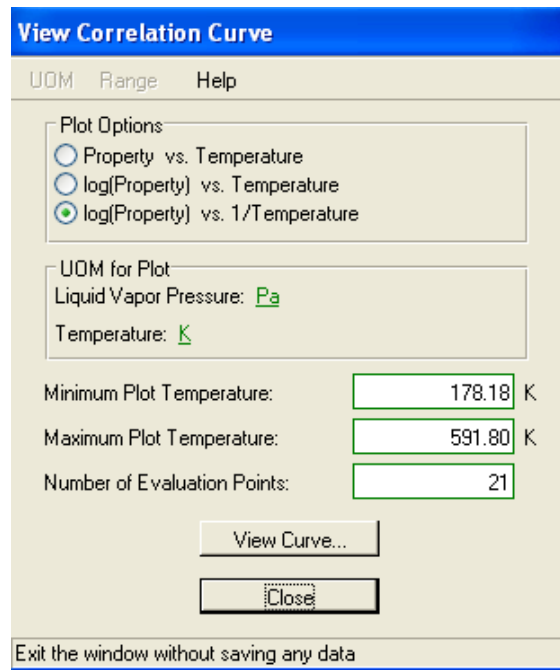



Figure 9

Selezionando le opportune *PLOT OPTIONS* (cioè cosa vogliamo avere sull'asse y vs ciò che vogliamo sull'asse x) e cliccando sulle *UOM* se le si vuole eventualmente cambiare, non resta che selezionare l'intervallo di temperatura desiderato e cliccare su *VIEW CURVE*.

Apparirà un grafico che sarà lineare se si plotta  $\ln(p^\circ)$  vs  $1/T$  che si può esportare in un file .txt attraverso la serie di comandi file→export.

## 4. Selezione del sistema termodinamico



Fin da quando si apre un nuovo file il tasto *THERMODYNAMIC DATA* (  ) rimane rosso: questo perché il programma ha bisogno che l'utente gli indichi un'equazione con la quale calcolare i coefficienti di attività o altri coefficienti come quello di fugacità.

Cliccando su questo tasto si giunge alla schermata seguente:

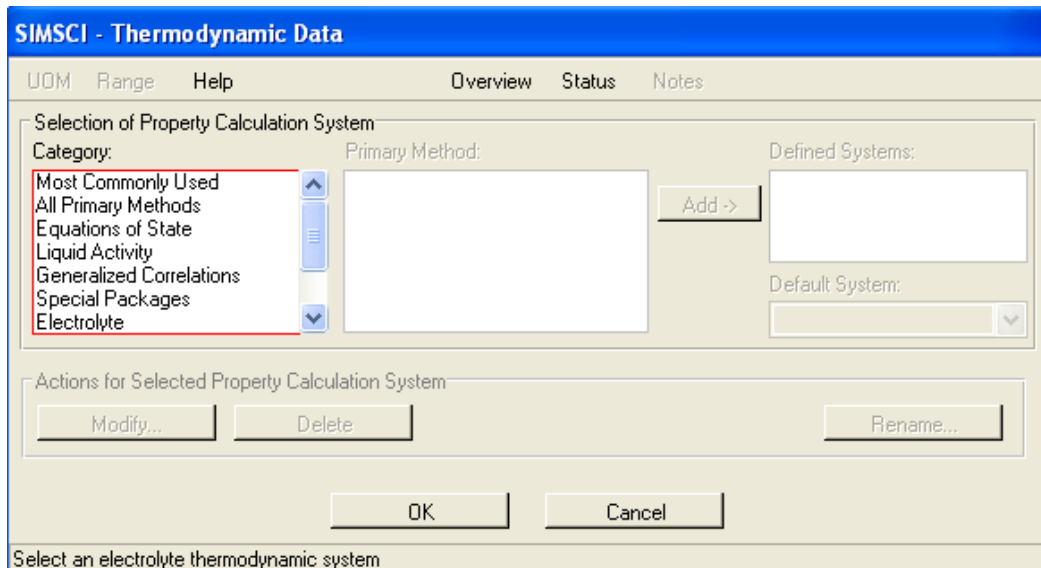


Figure 10

dal riquadro in rosso selezionare liquid activity. Appena selezionata l'opzione nel riquadro centrale appariranno varie equazioni per il calcolo delle attività in fase liquida. Selezionare il modello desiderato e cliccare su ADD. Alcuni modelli sono in grado di calcolare l'equilibrio liquido liquido (LLE), in questo caso apparirà una schermata (figura 11) dove il programma vi chiede se LLE si deve calcolare o meno. Selezionate *SINGLE LIQUID PHASE ONLY* e cliccate OK.

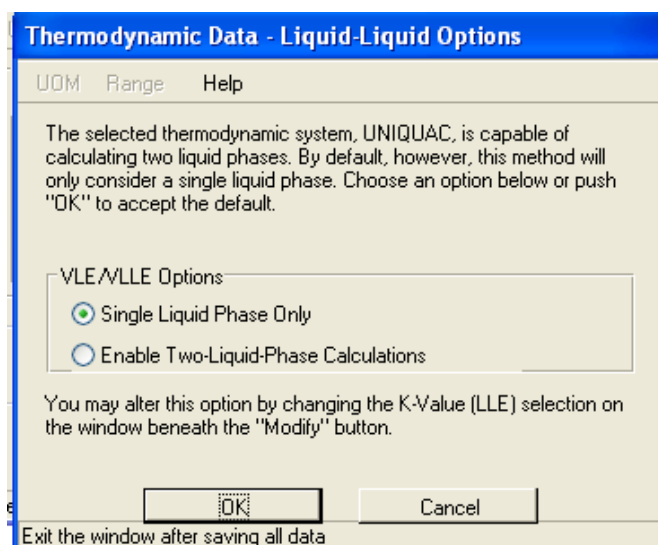


Figure 11

Ora il codice del modello apparirà nel riquadro più a destra e cliccando sul tasto OK avrete impostato il modello termodinamico.

È tuttavia possibile scegliere più di un modello termodinamico ma il programma coinciderà solo il modello di default per i suoi calcoli se non è specificato altrove che modello usare. Il modello di default si legge nella finestra sotto il riquadro più a destra della pagina THERMODYNAMIC DATA, e da lì si può anche selezionare il sistema di default che si preferisce.

## 5. Calcolo dell'equilibrio liquido vapore per una miscela binaria (BVLE)

Il programma possiede un tool in grado di calcolare l'equilibrio liquido vapore di una miscela binaria (BVLE). Una volta aggiunti i due componenti in esame e il modello termodinamico con il quale si vuole calcolare il VLE

è necessario cliccare sul tasto DISPLAY BVLE ()

Apparirà una schermata come quella in figura 12:

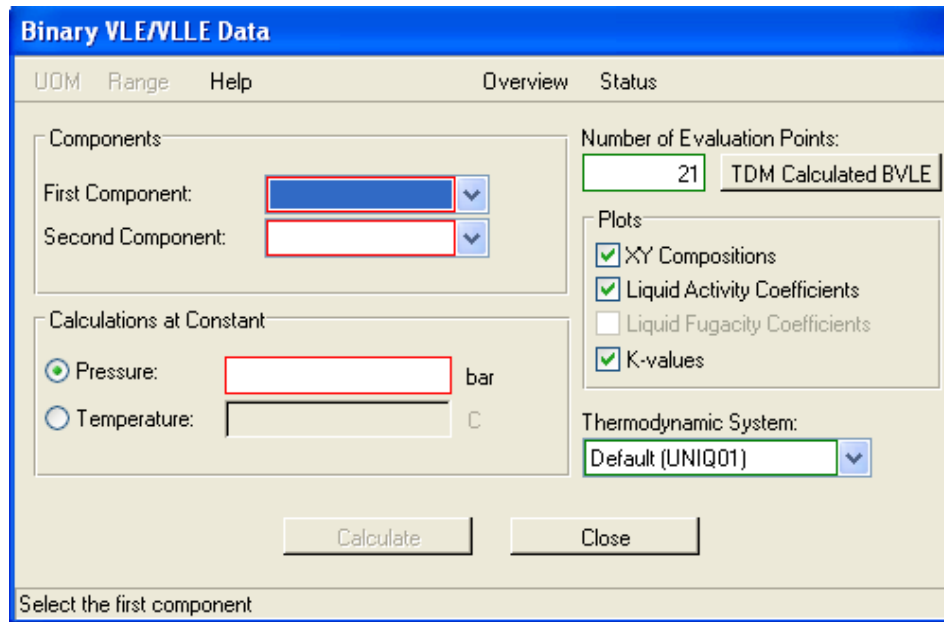


Figure 12

Nella parte dei componenti bisogna aggiungere i due componenti in esame. È consigliabile mettere il componente più leggero (cioè quello con temperatura di ebollizione normale inferiore) come primo componente.

Nella parte inferiore è necessario indicare se il calcolo dell'equilibrio si effettua a temperatura o a pressione costante e è necessario indicare il valore della costante. A destra della finestra vi sono in alto il numero di punti di equilibrio che il simulatore calcolerà (21 è più che sufficiente) e che grafici vi fornirà il simulatore:

- XY composition fornisce i grafici di equilibrio  $x$  vs  $y$  e composizione vs  $T$
- Liquid activity coefficients restituisce l'andamento dei coefficienti di attività in funzione della composizione e della temperatura
- K-values restituisce i valori delle costanti di equilibrio per i due componenti al variare delle composizioni e della temperatura.

Se si è scelto un solo sistema termodinamico il simulatore utilizza quello per il calcolo del VLE, altrimenti se sono stati selezionati più di uno viene utilizzato quello di default. Il sistema termodinamico scelto può essere modificato attraverso l'opportuna finestra di selezione.

I dati simulati possono essere esportati in un file .txt attraverso la serie di comandi file → export