

ChemCAD

典型应用实例(下) ——化学工业与炼油工业

▀ 邬慧雄 汪 申 刘劲松 全 灿 编

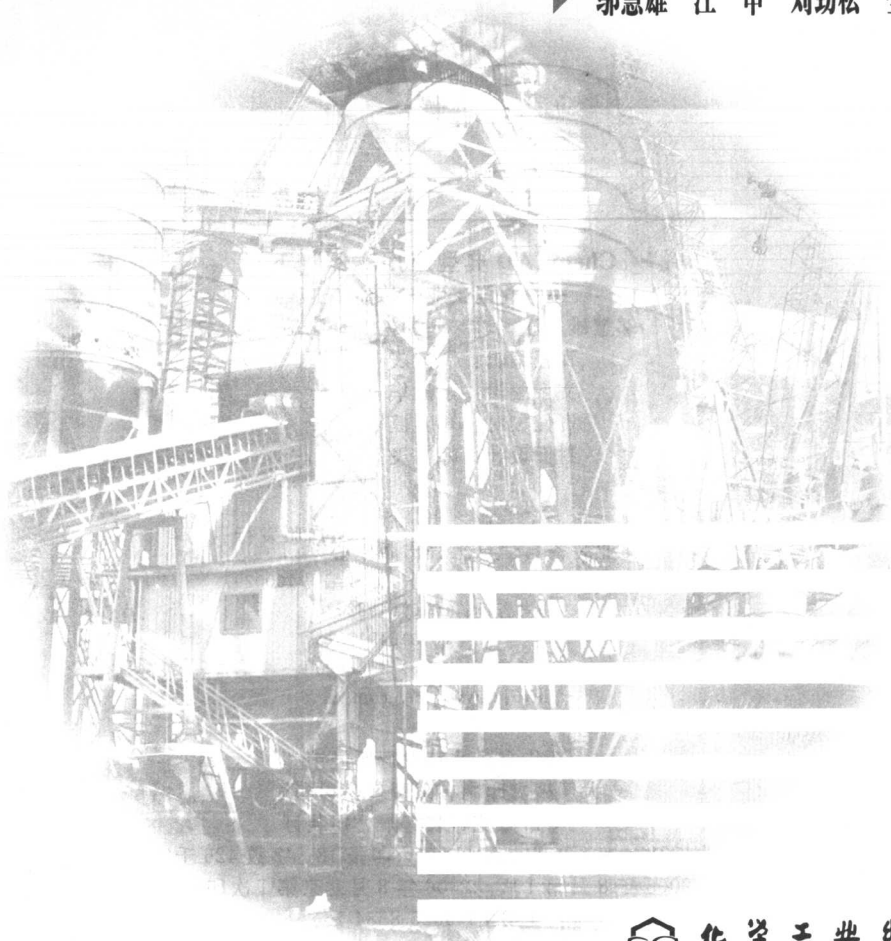


化学工业出版社
工业装备与信息工程出版中心

ChemCAD

典型应用实例(下) ——化学工业与炼油工业

■ 邬慧雄 汪 申 刘劲松 全 灿 编



化学工业出版社
工业装备与信息工程出版中心

· 北 京 ·

图书在版编目 (CIP) 数据

ChemCAD 典型应用实例 (下)——化学工业与炼油
工业/邬慧雄等编. —北京: 化学工业出版社, 2006.5
ISBN 7-5025-8884-1

I. C… II. 邬… III. ①化工过程-工艺学-计算机
辅助设计-应用软件, ChemCAD②炼油-计算机辅助设计
IV. TQ02-39

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2006) 第 058758 号

ChemCAD 典型应用实例 (下)

——化学工业与炼油工业

邬慧雄 汪 申 刘劲松 全 灿 编

责任编辑: 周国庆 周 红

文字编辑: 丁建华

责任校对: 郑 捷

封面设计: 韩 飞

*

化 学 工 业 出 版 社 出版发行

工业装备与信息工程出版中心

(北京市朝阳区惠新里 3 号 邮政编码 100029)

购书咨询: (010)64982530

(010)64918013

购书传真: (010)64982630

<http://www.cip.com.cn>

*

新华书店北京发行所经销

大厂聚鑫印刷有限责任公司印刷

三河市万龙印装有限公司装订

开本 787mm×1092mm 1/16 印张 18 字数 426 千字

2006 年 8 月第 1 版 2006 年 8 月北京第 1 次印刷

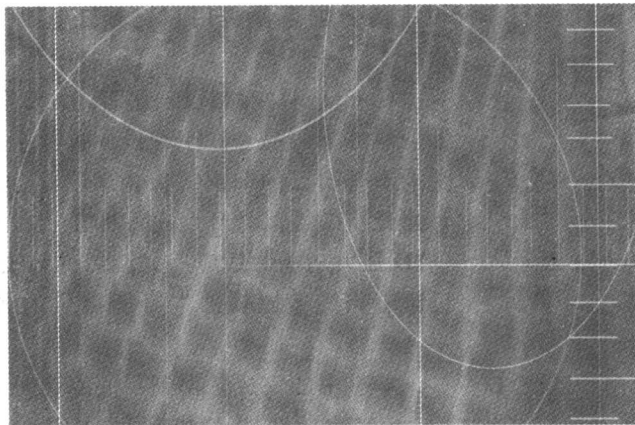
ISBN 7-5025-8884-1

定 价: 48.00 元

版权所有 违者必究

该书如有缺页、倒页、脱页者, 本社发行部负责退换

前言



ChemCAD 是一个可广泛应用于化学和石油工业、炼油、油气加工等领域中的工艺过程的计算机模拟应用软件，是工程技术人员用来对连续、半连续或间歇操作单元进行物料平衡和能量平衡核算的有力工具。通过 ChemCAD 可以在计算机上建立与现场装置吻合的数据模型，并通过运算模拟装置的稳态或动态运行，为工艺开发、工程设计以及优化操作提供理论指导。ChemCAD 现在有 50 多个通用单元操作模型，用户还可以根据需要建立自己的模型。ChemCAD 可以将各个单元操作组织起来，形成整个车间或全厂的流程图，进而完成整个流程的模拟计算。

ChemCAD 是 Chemstations 公司开发的产品，不仅倡导轻松友好的设计环境和智能化的人机交互方式，还提供了更加完善和强大的计算与分析功能，可运行于 Windows 95/NT、Windows 2000 及更高的版本环境。根据 Microsoft Windows 设计标准采用了 Microsoft 工具包，以及 Windows Help 系统，使得 ChemCAD 对用户来说，外观及感觉和用户熟悉的其他 Windows 程序十分相似。总之，新版本 ChemCAD 的主要特点是安装简单，使用灵活，且有较为详尽的帮助系统，可即时生成工艺流程图（PFD），支持动态模拟，并具有强大的计算分析功能。此外，ChemCAD 中的自动流程分析功能也可以确定循环切断流股及其计算顺序。

ChemCAD 提供了大量的最新的热平衡和相平衡的计算方法，包含近 50 种“K”值计算方法和 12 种焓值计算方法。这些计算方法可以应用于天然气加工厂、炼油厂以及石油化工厂的模拟，可处理直链烃以及电解质、盐、胺、酸水等特殊系统，从而避免了工程师们对物性数据繁重的查询工作。对于不在数据库中的组分，ChemCAD 提供了高度灵活的数据回归系统，可以从实验数据中拟合出相关的物性参数，可以用于纯组分性质回归、二元交换作用参数回归、电解质回归、反应速率常数回归等。另外，ChemCAD 还具有热力学专家系统，能够帮助用户选择合适的“K”值和焓值计算方法。ChemCAD 可以处理多相系统，也可以考虑汽相缔合的影响，且有处理固体功能。ChemCAD 还提供了对多种设备进行设计和核算的功能模块。可以对板式塔（包含筛板塔、泡罩塔、浮阀塔）、填料塔、管线、换热器、压力容器、孔板、调节阀和安全阀（DIERS）进行设计和核算。这些模块共享流程模

拟中的数据,使得用户完成工艺计算后,可以方便地进行各种主要设备的核算和设计。

ChemCAD 对初级使用者是易于使用的,但熟练掌握 ChemCAD 的各项功能并能灵活应用并不容易,在工程设计过程中,设计者不仅要学会利用软件所提供的各项功能,更要发挥自己的知识特长,运用自己的创作灵感,突破模拟系统在一些方面的限制,设计出经济效益高、环境友好的工程设计。《ChemCAD 典型应用实例》正是鉴于 ChemCAD 强大功能为适应广大读者的需要而编写的,具有专业水准和系统性,不仅可以帮助读者熟练掌握软件本身所提供的各种功能,同时也是激发工程师设计灵感的重要平台。

本套书的完成,得到了北京方通正信科技有限公司的大力支持,并参照和引用了 ChemCAD 软件的在线帮助和部分案例。本套书分为《ChemCAD 典型应用实例(上)——基础应用与动态控制》和《ChemCAD 典型应用实例(下)——化学工业与炼油工业》两册,内容丰富、详尽,涉及领域广泛,涵盖了 ChemCAD 的主要应用领域,每册书都精选了一些经典的应用实例,生动地剖析了用 ChemCAD 实现工程设计的方法。本套书是美国 Chemstations 公司正式授权的 ChemCAD 软件之使用和推广的相关技术书籍。本套书的最大特色是使 ChemCAD 结合创造思考与设计实例,采用了由浅入深、循序渐进的方式,介绍 ChemCAD 模拟中经常用到的各种技巧,从中突出了工艺模拟中创造性思维的重要性。每一个工业实例都有不同的应用主题与重点,从建立工艺流程到进行过程模拟,读者可通过这些工业实例,感悟各种工程设计思路,汲取作者在工程设计方面的经验,最终将这些经验应用于自己的工程设计和学习当中。

本套书通过详尽阐释,帮助读者深入了解 ChemCAD 的基础应用、动态控制及其在化学、炼油、环保、制药等工业中的应用。书中使用 step by step 的方式讲解过程模拟的步骤与实现技巧,每个实例都独具匠心,向读者展示了 ChemCAD 强大的流程模拟功能,并将丰富的设计理念融合在具体的工程设计项目中。书中的内容可操作性极强,能让读者在感受 ChemCAD 强大功能的同时,增强对 ChemCAD 软件本身的认识,从而提高对软件的实际应用能力。

本套书包含的主要内容简单概括如下。

《ChemCAD 典型应用实例(上)——基础应用与动态控制》主要介绍了 ChemCAD 的概论、界面说明、基本功能以及一些模拟应用实例,主要目的是通过一些常规的化工工艺流程模拟计算,来说明 ChemCAD 的使用环境和使用方法。同时,鉴于应用计算机技术和控制理论改造和拉动传统产业已成为化学工业生产过程的紧迫任务,本书将通过对不同性质的工业实际被控过程的研究和模拟,让读者深入了解 ChemCAD 动态控制方面的强大功能,体验动态控制的实现过程。

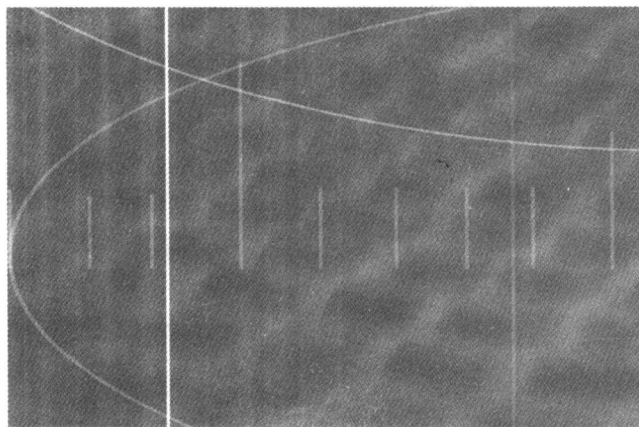
《ChemCAD 典型应用实例(下)——化学工业与炼油工业》主要介绍了 ChemCAD 对一些复杂化工过程单元的模拟计算,以及在操作参数敏感性分析、设备结构和操作参数的优化中的应用。同时,本书也介绍了 ChemCAD 在精细化工、空气分离、生物化工、环境保护和石油化工等方面的应用案例。通过这些案例的介绍,能帮助读者了解 ChemCAD 在工程设计、过程分析、过程优化等方面的强大功能,并加深对以上所述的各类化学工业知识的理解。

本书第1章由邬慧雄编写，第2章由胡珏编写，第3章由邬慧雄、汪申编写，第4章由全灿编写，第5章由邬慧雄编写，第6章由刘劲松、邬慧雄编写。全书由邬慧雄统稿。在本套书的编写过程中，天津大学石油技术开发中心马海洪教授、张绍军教授、研究生陶然参与了部分章节的案例计算和整理工作，在此向他们表示衷心的感谢！

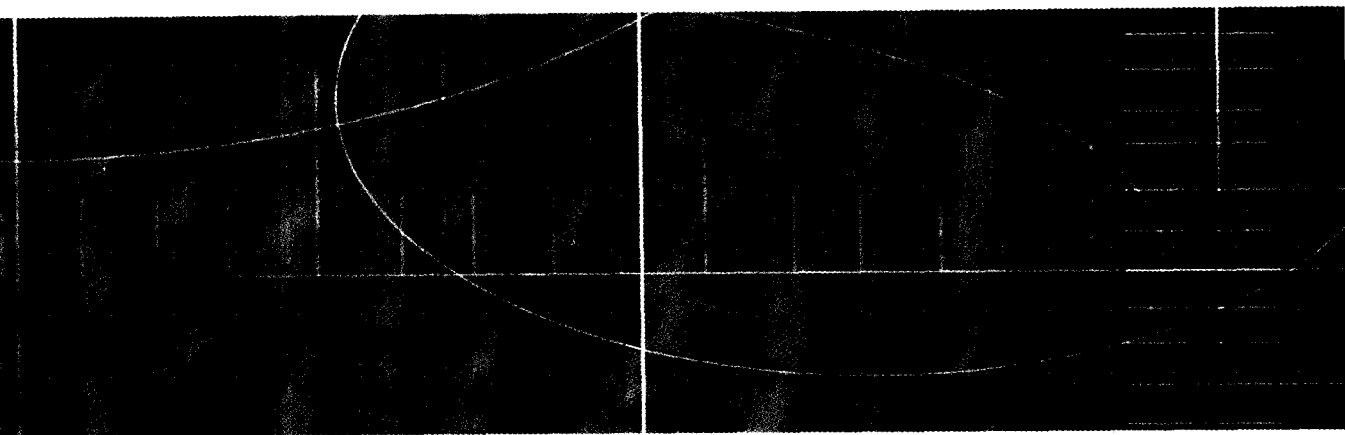
此外，由于时间仓促，加上编者水平有限，书中难免有不妥之处，恳请广大读者批评指正！

编 者
2006 年 3 月

目 录



第 1 章 ChemCAD 模拟基础	1
1.1 ChemCAD 模拟简单物料衡算	1
1.1.1 混合	1
1.1.2 简单蒸馏分离	3
1.1.3 增湿过程	4
1.1.4 部分冷凝	6
1.2 ChemCAD 模拟简单能量衡算	7
1.2.1 汽化潜热	7
1.2.2 化学反应热	9
1.2.3 溶解热量	11
1.2.4 基本化工过程的热量	13
第 2 章 ChemCAD 模拟复杂分离单元	19
2.1 ChemCAD 模拟萃取精馏	19
2.1.1 连续萃取精馏	20
2.1.2 加盐萃取精馏	24
2.1.3 分批萃取精馏	29
2.2 ChemCAD 模拟共沸精馏	35
2.2.1 共沸精馏	35
2.2.2 变压共沸精馏	47
2.3 ChemCAD 模拟吸收及吸收蒸出塔	52
2.3.1 多组分吸收	52
2.3.2 吸收蒸出塔	56
2.4 ChemCAD 模拟液-液萃取塔	60
2.5 ChemCAD 的非平衡级模型	65
2.5.1 脱丙烷塔	66
2.5.2 填料吸收塔	71



2.5.3 反应精馏动态响应	77
第3章 ChemCAD 在化工节能领域中的应用	85
3.1 ChemCAD 模拟多效精馏	85
3.2 ChemCAD 模拟热泵精馏	93
第4章 ChemCAD 在化工设备设计中的应用	103
4.1 ChemCAD 设计填料吸收塔	103
4.2 ChemCAD 设计板式精馏塔	112
第5章 ChemCAD 在环保和化工领域中的应用	125
5.1 钠碱法脱除烟气中二氧化硫	125
5.2 制药废液中回收四氢呋喃	130
5.3 液化空气的分离	135
5.4 液化天然气分离	145
5.5 二甲醚生产工艺	154
5.6 乙酸甲酯水解工艺	167
5.7 乙二醇生产工艺	177
第6章 ChemCAD 在石油化工领域中的应用	189
6.1 油品调和	189
6.2 原油的常减压蒸馏	195
6.2.1 原油的馏分组成及其蒸馏曲线的换算	195
6.2.2 原油常减压蒸馏过程	203
6.3 催化裂化的吸收-稳定系统	225
6.4 碳四分馏塔和脱丙烷塔	238
6.5 催化加氢精制工艺	251
6.6 甲基叔丁基醚生产工艺	265
参考文献	280

第 1 章

ChemCAD 模拟基础

物料和能量的衡算是进行化工工艺设计计算的基础，尤其是在开发新的工艺流程时。这其中，物料衡算又是能量衡算的基础。而物料和能量的衡算又将是设备计算的基础。本章将主要参考黄璐、王保国编的《化工设计》（化学工业出版社，2001 年）一书，介绍 ChemCAD 模拟的基础应用，即简单物料和能量的衡算。

1.1 ChemCAD 模拟简单物料衡算

1.1.1 混合

“混合”是指将若干股物料在同一容器内混合为一股而流出来。例如：将流量为 150kg/h，含有硫酸质量分数为 40% 的流股，与 98% 的浓硫酸相混合成为 90% 的硫酸，求所需要 98% 的浓硫酸量为多少？

ChemCAD 绘制的混合工艺流程，如图 1-1 所示。其选择的工程单位为“SI”制，将“Pressure”设置为“MPa”，将“温度”设置为“C”。选择组分为 H_2SO_4 和 H_2O ，选择热力学方程为“电解质”。流股“1”、“2”的初始定义如图 1-2 所示。流程图 1-1

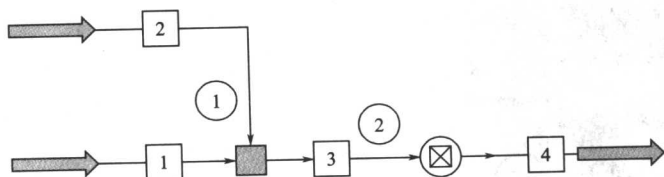


图 1-1 ChemCAD 绘制的混合工艺流程

Edit Streams		Edit Streams	
Flash		Flash	
Stream No.	1	Stream No.	2
Stream Name		Stream Name	
Temp C	25	Temp C	25
Pres atm	1	Pres atm	1
Vapor Fraction	0	Vapor Fraction	0
Enthalpy MJ/h	-4257.931	Enthalpy MJ/h	-1966.961
Total flow	500	Total flow	150
Total flow unit	kg/h	Total flow unit	kg/h
Comp unit	weight frac	Comp unit	weight frac
Sulfuric Acid	0.98	Sulfuric Acid	0.3999999
Water	0.02000002	Water	0.6

图 1-2 初始流股的定义

中, 控件“2”的设置, 如图 1-3 所示。在 ChemCAD 中, 用控件“CONT”来实现设计型计算。其功能类似于 ASPEN PLUSE 等工艺软件中的“设计”选项。

在本案例中, 控件“CONT”的控制模式为“反馈控制”; 自变量为流股“1”的质量流量, 该值的变化范围为 50~1500kg/h; 目标函数则为流股“3”的硫酸的质量比浓

- Controller (CONT) -

General Settings Optional Parameters

Controller Mode: ID: 2

Adjust this variable

Stream ID number Variable

Minimum value Unit of adjusted variable:

Maximum value

Until this

☒ Stream ID number Variable

☐ Equipment Scale Component

Arithmetic Operator

☒ Stream ID number Variable

☐ Equipment Scale Component

Is equal to this target

Constant Units

☒ Stream ID number Variable

☐ Equipment Scale Component

图 1-3 控件“2”的设置

度，其值为 0.9。“CONT” 的计算结果如下。

控制器 “CONT” 的摘要

模态	2
使流出没有 . adj.	1
没有的变数 . adj.	6
Minimum Value	50.0000
Maximum Value	1500.0000
Unit of Min/Max	1
Rel Step Size	0.0050
Sign Flag	0
Tolerance	0.0010
Iterations	20
Measured variables:	
Number 1	3
Variable 1	-801
Constant	0.9000

“混合” 工艺的物料平衡计算结果如下。

Stream No.	1	2	3	4
Temp C	25.0000	25.0000	78.4950	78.495
Pres atm	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
Enth MJ/h	-7950.5	-1966.4	-9916.9	-9916.9
Vapor mole fraction	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
Total kmol/h	10.3651	5.6076	15.9727	15.9727
Total kg/h	<u>933.6141</u>	150.0000	1083.6142	1083.61
Total std L m3/h	0.5204	0.1229	0.6433	0.6433
Total std V m3/h	232.32	125.69	358.01	358.01
Component mass %				
Sulfuric Acid	98.00	40.00	90.00	90.00
Water	2.00	90.0000	10.00	10.00

至此，将流量为 150 kg/h，含有硫酸质量分数 40% 的流股，与 98% 的浓硫酸混合成 90% 的硫酸，所需要的 98% 浓硫酸流量便可以获得，其值为 933.6141 kg/h。

1.1.2 简单蒸馏分离

简单蒸馏分离物料衡算的目的是找出塔顶产品、塔底产品的流量和组成与原料液的流量、组成之间的关系，若分离任务已定，则可以通过已知进料组成和流量求出塔顶和塔底产品的量和组成，蒸馏分离流程见图 1-4。

例如：蒸馏分离塔进料为含苯质量分数为 38% 和甲苯质量分数为 62% 的混合溶液，要求馏出液中能回收原料中 97% 的苯，釜残液中含苯不高于 2%，进料流量为 24000kg/h，求馏出液和釜残液的流量和组成？

在 ChemCAD 中，用 “CSEP” 来实现简单蒸馏分离的物料衡算。在本案例中，顶部物流设置为露点温度、底部物料设置为泡点温度，出口物流压力为 1atm (1atm=

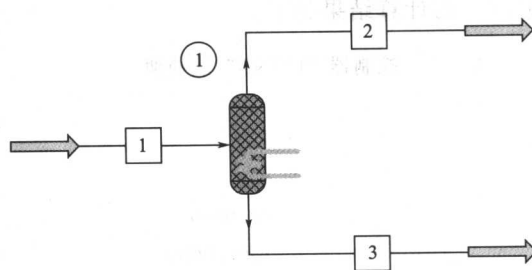


图 1-4 蒸馏分离流程

Component Separator (CSEP)

Top stream: 2 Mode: ID: 1
 Specification: 2 Dew point temperature C

Bottom stream: 3 Mode: ID: 1
 Specification: 1 Bubble point temperature C

Pressure out: 1 atm Pressure drop: atm

Split basis: 0 Split fractions
 Split destination: 0 Specifications (below) refer to top product

Split Fractions

Benzene	0.97
Toluene	0.02

图 1-5 蒸馏分离塔的设置

101325Pa, 下同)。分离目的是：顶部产品中，苯和甲苯的回收率分别为 0.97、0.02，蒸馏分离塔的设置如图 1-5 所示。“CSEP”物料平衡计算结果如下。

Stream No.	1	2	3
Temp C	25.0000	81.4923	109.5089
Pres atm	1.0000	1.0000	1.0000
Enth MJ/h	7700.3	10143.	4404.8
Vapor mole fraction	0.00000	1.0000	0.00000
Total kmol/h	278.2440	116.4796	161.7644
Total kg/h	24000.0000	9144.0000	14856.0006
Total std L m3/h	27.3846	10.3457	17.0389
Total std V m3/h	6236.46	2610.73	3625.73
Component mass %			
Benzene	37.999985	96.745402	1.841679
Toluene	62.000018	3.254595	98.158324

1.1.3 增湿过程

在化工生产中，有时需要在原料气中配入蒸汽。该过程一般都是使原料气先通过一

个饱和塔（板式塔或填料塔），气体与热水在塔内逆向接触，进行传质和传热，经过热交换和质交换后，从塔顶排出的原料气几乎被蒸汽所饱和。塔出口的原料气中含有的蒸汽量取决于塔出口气体的温度以及塔的操作压力，增湿过程流程如图 1-6 所示。

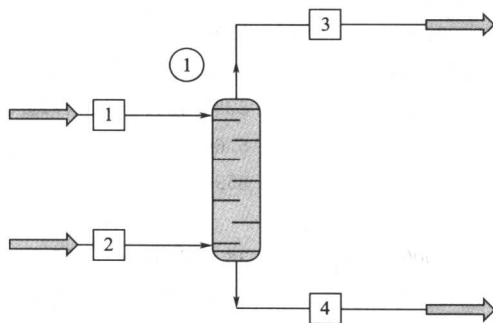


图 1-6 增湿过程流程

例如：合成氨厂 CO 变换工段中，35℃ 的半水煤气从塔底进入饱和塔中（总共有 10 块理论板），在塔内与从饱和塔塔顶喷淋而下的 135℃ 的热水逆流相互接触，从而在塔的填料层内与半水煤气进行热量、质量交换，最后塔顶得到的湿半水煤气送往后面的设备。

在 ChemCAD 中，用“SCDS”模块来实现增加湿度过程的物料衡算。在本案例中，“SCDS”吸收塔的顶部无冷凝器、底部无再沸器。进入饱和塔的热热水为 22000kg，塔的操作压力为 740.4kPa，增湿过程的设置见图 1-7。其中，半水煤气的组成如下。

组分	H ₂	CO	CO ₂	O ₂	N ₂	CH ₄	H ₂ O	合计
物质的量 kmol	62.01	40.66	22.69	0.618	32.53	1.865	1.227	161.6

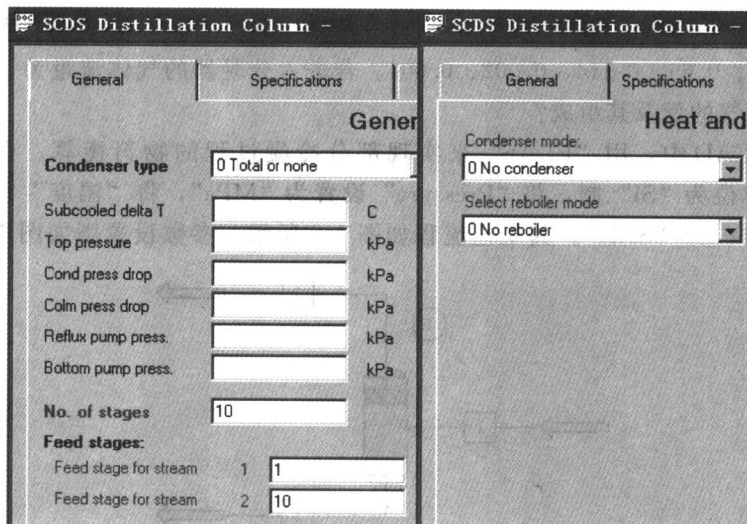


图 1-7 增湿过程的设置

最后,“增湿”工艺物料平衡的计算结果如下。

Stream No.	1	2	3	4
Temp C	135.0000	35.0000	128.7114	91.0381
Pres kPa	740.0000	740.0000	740.0000	740.0000
Enth MJ/h	-3.3909e+005	-13520.	-33717.	-3.1889e+005
Vapor mole fraction	0.00000	1.0000	1.0000	0.00000
Total kmol/h	1221.2045	160.3730	246.8389	1134.7388
Total kg/h	22000.0000	3223.4641	4779.5666	20443.8954
Total std L m3/h	22.0035	5.6613	7.2160	20.4488
Total std V m3/h	27371.65	3594.54	5532.56	25433.64
Component mole %				
Hydrogen	0.000000	38.666108	25.110656	0.002392
Carbon Monoxide	0.000000	25.353393	16.465801	0.001410
Carbon Dioxide	0.000000	14.148267	9.164756	0.005977
Oxygen	0.000000	0.385352	0.250250	0.000025
Nitrogen	0.000000	20.283961	13.174991	0.000793
Methane	0.000000	1.162914	0.755037	0.000112
Water	100.000000	0.000000	35.078505	99.989277

1.1.4 部分冷凝

在化工生产中,把气体混合物冷却到某一温度,使其中相对易冷凝的部分冷凝。在此过程中,冷凝是按相平衡规律进行的,因此不凝气中也会带有少量重组分,而凝液中也不可避免地含有少量轻组分,按照生产上对纯度的要求,选择适当的压力和温度即可达到分离的目的。

例如: N_2 、 H_2 、 NH_3 、Ar、 CH_4 的混合气体在 -33.3°C 和13.3MPa压力下进入分凝器中进行部分冷凝,使混合气中较易冷凝的 NH_3 ,冷凝为液态 NH_3 排出系统。而不凝气则循环回反应器中。

这里,进入分凝器的混合气体(N_2 、 H_2 、 NH_3 、Ar、 CH_4)的组成(摩尔分数)分别如下:0.22、0.66、0.114、0.002、0.004。若进入分凝器的气体流量为3500 kmol/h,求凝液和不凝气的量及其组成?

在ChemCAD中,用“FLAS”来实现部分冷凝过程的物料衡算。在本案例中,选择的工程单位为“SI”制,将“Pressure”设置为“MPa”,将“温度”设置为“C”。选择热力学方程为“SRK”。其工艺流程如图1-8所示,参数设置则如图1-9所示。

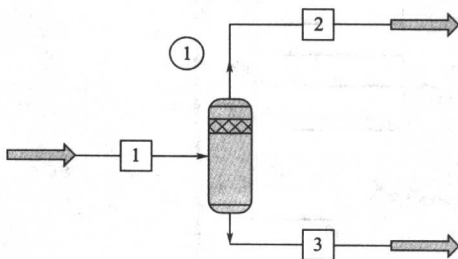


图 1-8 部分冷凝工艺流程

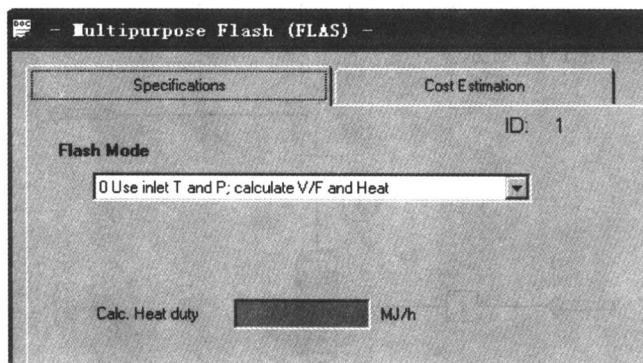


图 1-9 部分冷凝工艺设置

最后，在所给的压力和温度条件下，部分冷凝的计算结果如下。

Stream No.	1	2	3
Temp C	-33.3000	-33.3000	-33.3000
Pres MPa	13.3000	13.3000	13.3000
Enth MJ/h	-34347.	-9040.3	-25307.
Vapor mole fraction	0.89877	1.0000	0.00000
Total kmol/h	3500.0000	3145.6795	354.3209
Total kg/h	33526.8867	27491.4982	6035.3884
Total std L m3/h	105.1778	95.4143	9.7635
Total std V m3/h	78447.77	70506.15	7941.62
Component mole %			
Nitrogen	22.000000	24.447884	0.267537
Hydrogen	66.000009	73.406935	0.240821
Ammonia	11.400000	1.486445	99.413061
Argon	0.200000	0.217706	0.042809
Methane	0.400000	0.441026	0.035771

因此，在以上案例中，所求冷凝液的流量为 354.3209kmol/h，不凝气的流量为 3145.6795kmol/h。

1.2 ChemCAD 模拟简单能量衡算

1.2.1 汽化潜热

液体汽化所吸收的热量称为汽化潜热。汽化潜热是物质的基本物性数据。在手册能查到各种物质在正常沸点下的汽化潜热。但是，许多时候物质并不是在常压下汽化或冷凝，而是在各自的操作压力下汽化或冷凝。

由于，汽化潜热是焓差，因此一般情况下，可以根据状态函数增量不随途径而变的特性，假设一些便利的途径，而方便地求出物质不是在常压下汽化或冷凝的热量，或者可以从焓-温图、温-熵图或压-焓图上读到不同温度下的汽化潜热。

但是，在 ChemCAD 中，汽化潜热的计算则要简单得多。只需要利用“Flash”模块，进行等压完全汽化计算。便可以得到物质在对应压力下的汽化潜热。例如：求 50℃ 的纯甲醇在 1.5atm 时的汽化潜热？

在本案例中, 选择的热力学方程为 “Ideal Vapor Pressure”。其工艺流程如图 1-10 所示, 参数设置则如图 1-11 所示。

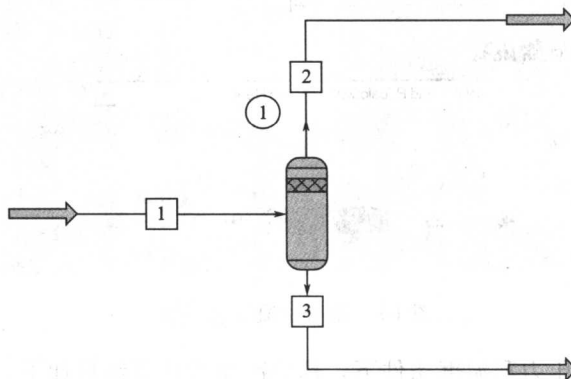


图 1-10 酒精汽化工艺流程

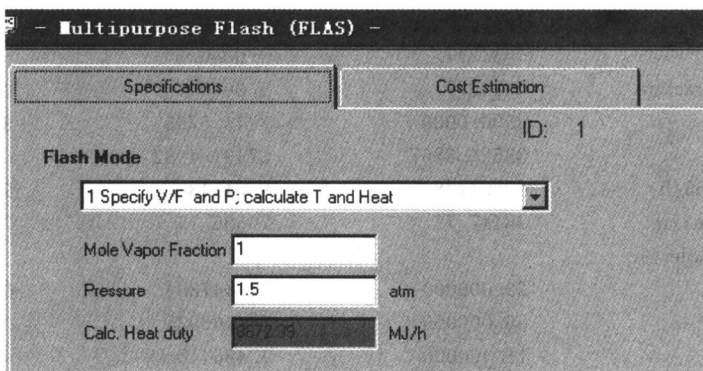


图 1-11 闪蒸罐的设置

最后, 在所给的压力条件下, 50℃的纯甲醇完全汽化(到达露点温度)后的计算结果如下, 汽化潜热为 3672.3931MJ/h。

Flash Summary

Equip. No.	1
Flash Mode	1
Param 1	1.0000
Param 2	1.5000
Heat duty MJ/h	3672.3931

K values:

Methanol	1.000
----------	-------

Mass Balance

Stream No.	1	2	3
--Overall--			
Molar flow kmol/h	100.0000	100.0000	0.0000
Mass flow kg/h	3204.2000	3204.2000	0.0000

Temp C	50.0000	75.1493	0.0000
Pres atm	1.5000	1.5000	0.0000
Vapor mole fraction	0.0000	1.000	0.0000
Enth MJ/h	-23686.	-20013.	0.00000
Tc C	239.4900	239.4900	0.0000
Pc atm	79.9112	79.9112	0.0000
Std. sp gr. wtr=1	0.801	0.801	0.000
Std. sp gr. air=1	1.106	1.106	0.000
Degree API	45.1116	45.1116	0.0000
Average mol wt	32.0420	32.0420	0.0000
Actual dens kg/m3	764.8698	1.7241	0.0000
Actual vol m3/h	4.1892	1858.5015	0.0000
Std liq m3/h	4.0029	4.0029	0.0000
Std vap 0 C m3/h	2241.3647	2241.3647	0.0000

1.2.2 化学反应热

有些化学反应，可以从有关资料中直接查到反应热数据。但在很多情况下是查不到反应热数据的，遇到这种情况，可通过物质的标准生成热数据和燃烧热数据来计算反应热，因为标准生成热和燃烧热数据可在一般手册上查到，特别是对有机反应，使用燃烧热求算反应热是一个普遍使用的方法。在 ChemCAD 的内部，也是通过这种方式来求反应热的。

例如：求甲醇脱氢生成甲醛的反应，在 50℃ 时的反应热，该化学反应的方程式如下



在 ChemCAD 中化学计量反应器被应用于反应热的计算，其工艺流程如图 1-12 所示。在本例中，指定关键组分的流量为一个计量单位，即可求出该反应的反应热。本流程选取的热力学模型为“UNIQUIC”模型方程。反应器进料流股的定义如图 1-13 所示。

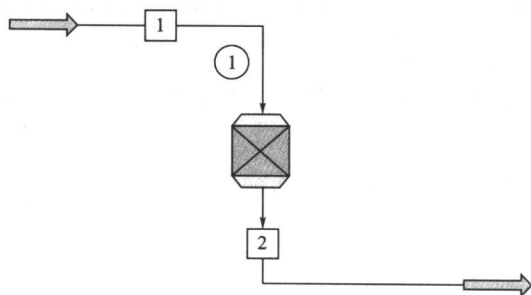


图 1-12 反应热计算工艺流程

在本文案例中，化学计量反应器为绝热过程，关键组分为甲醇，其转化率为“1”。甲醇是反应物，其化学计量系数为“-1”；反应产物为甲醛和氢气，化学计量系数均为“1”。该反应器的规定如图 1-14 所示。