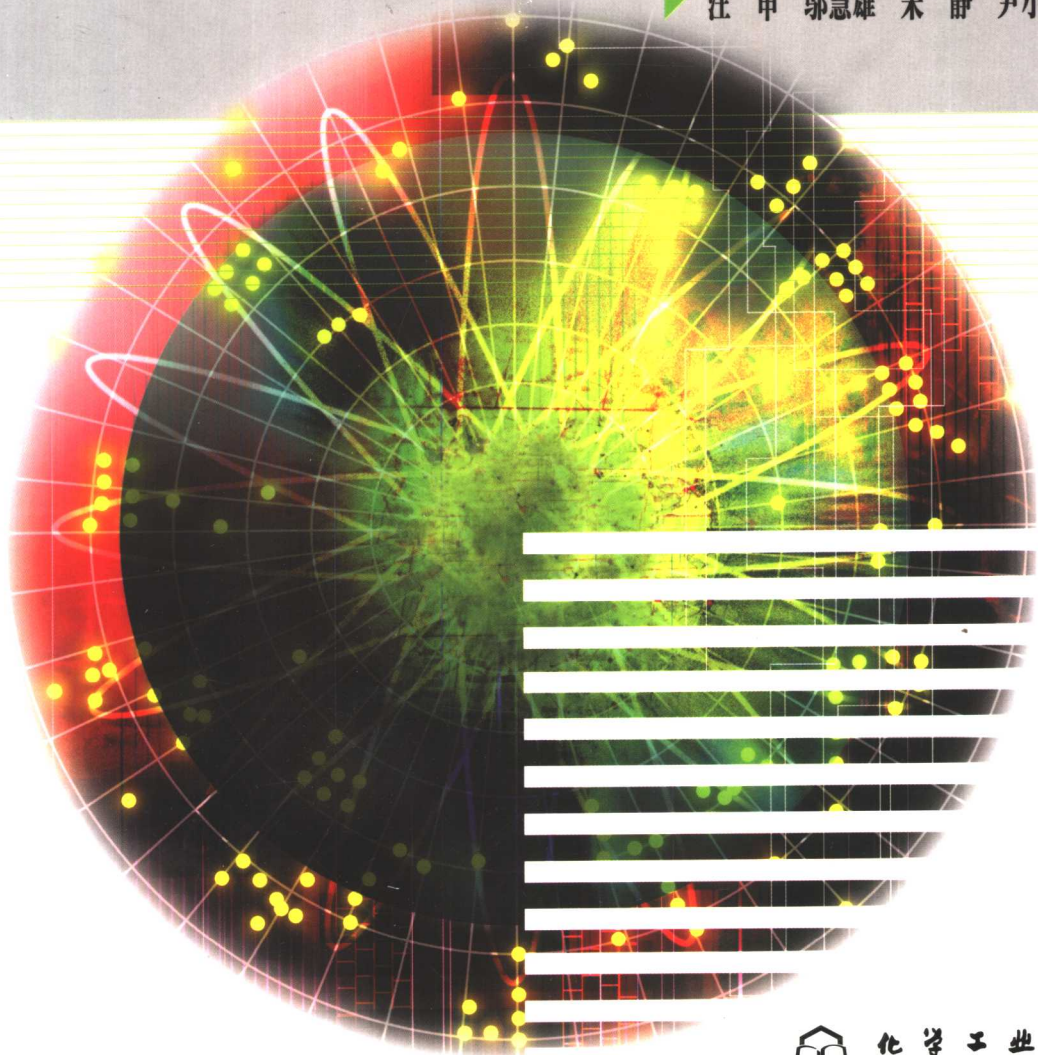


ChemCAD

典型应用实例(上) ——基础应用与动态控制

汪申 郭慧雄 宋静 尹小勇 编



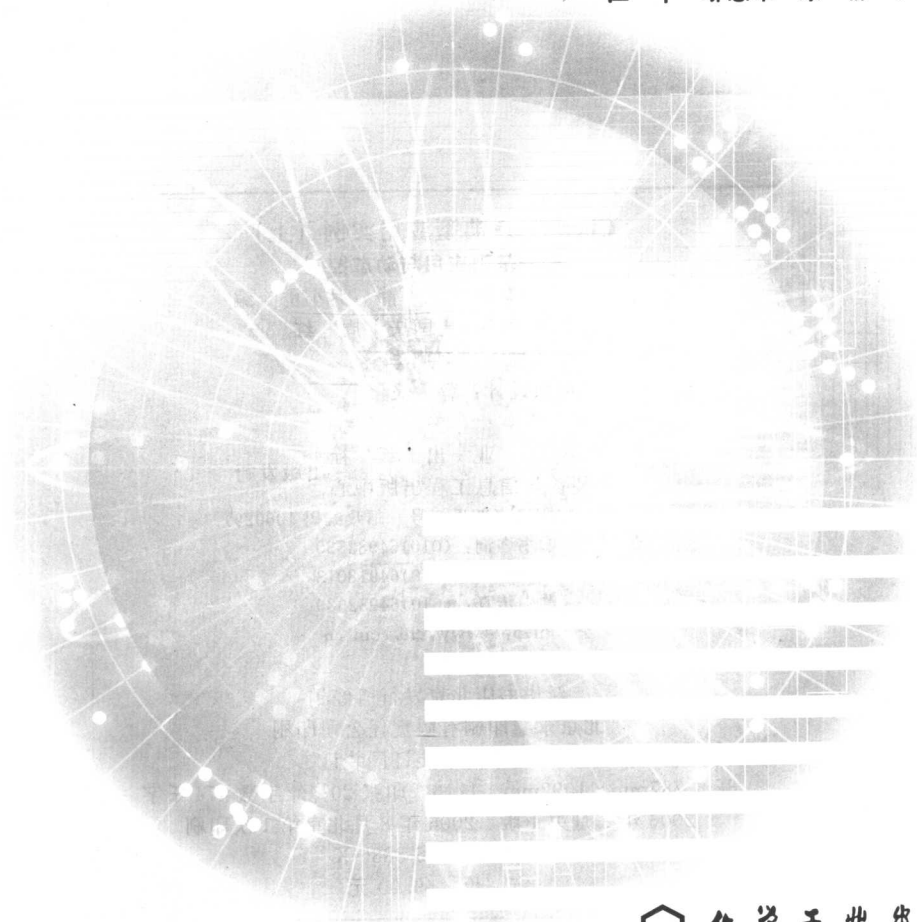
化学工业出版社
工业装备与信息工程出版中心

ChemCAD

典型应用实例(上)

——基础应用与动态控制

汪申 鄂慧雄 宋静 尹小勇 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 (上)——基础应用与动态控制/汪申等编. —北京: 化学工业出版社, 2006.5
ISBN 7-5025-8885-X

I. C… II. 汪… III. 化工过程-工艺学-计算机
辅助设计-应用软件, ChemCAD IV. TQ02-39

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2006) 第 058757 号

ChemCAD 典型应用实例 (上)

——基础应用与动态控制

汪 申 邬慧雄 宋 静 尹小勇 编

责任编辑: 周国庆 周 红

责任校对: 陶燕华

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

北京永鑫印刷有限责任公司印刷

三河市前程装订厂装订

开本 787mm×1092mm 1/16 印张 20½ 字数 474 千字

2006 年 8 月第 1 版 2006 年 8 月北京第 1 次印刷

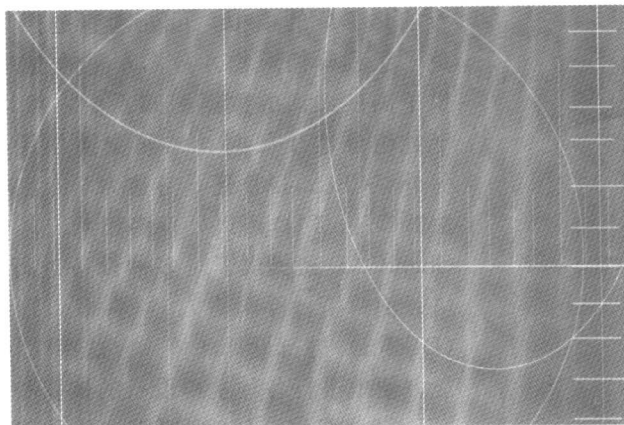
ISBN 7-5025-8885-X

定 价: 49.00 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



计算机过程模拟技术在中国发展很快，特别是在石油化工行业广泛得到采用。但是，由于各种原因，一些单位应用效果并不理想。为了推动过程模拟应用技术水平的提高，我们集中了一些有经验的技术人员和他们多年积累的丰富经验，特编写了本书。书中提供了比以往更多的反应、分离、传热等典型化工过程的稳态、动态模拟知识和算例，并且也结合主要用户的业务方向提供了一些重要化工、炼油生产过程的模拟计算应用。目的就是希望能给“直接受益用户”一个“案头使用手册”做查询参考，让大家能以此实现更大、更多的应用效益。

本书所提供的 ChemCAD 过程模拟系统是一个可广泛应用于化学和石油工业、炼油、油气加工、冶金、电力和制药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，近期还发展了工艺参数在线测量、装置开停工和安全分析评价及其预案研究等技术。ChemCAD 现在有 50 多个通用单元操作模型，用户还可以根据需求建立自己的模型。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”值和焓值算法。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（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，使用户完成工艺计算后能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。

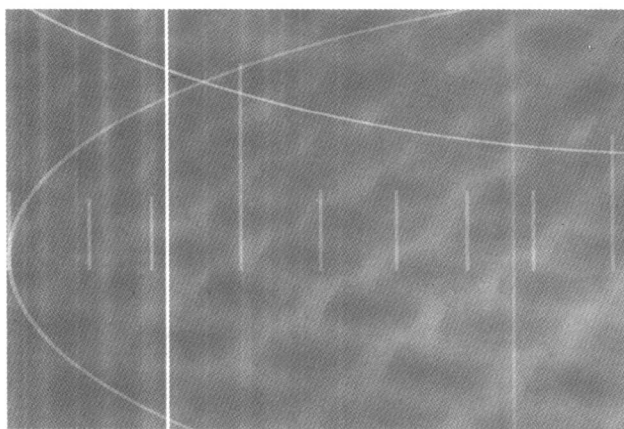
《ChemCAD 典型应用实例（下）——化学工业与炼油工业》主要介绍了 ChemCAD 对一些复杂化工过程单元的模拟计算，以及在操作参数敏感性分析、设备结构和操作参数的优化中的应用。同时，本书也介绍了 ChemCAD 在精细化工、空气分离、生物化工、环境保护和石油化工等方面的应用案例。通过这些案例的介绍，能帮助读者了解 ChemCAD 在工程设计、过程分析、过程优化等方面的强大功能，并加深对以上所述各类化学工业知识的理解。

本书第 1 章～第 3 章由宋静、汪申编写；第 4 章由尹小勇、汪申编写；第 5 章、第 6 章由全灿、邬慧雄编写；第 7 章由邬慧雄编写；第 8 章～第 10 章由邬慧雄、汪申编写。全书由汪申统稿。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！

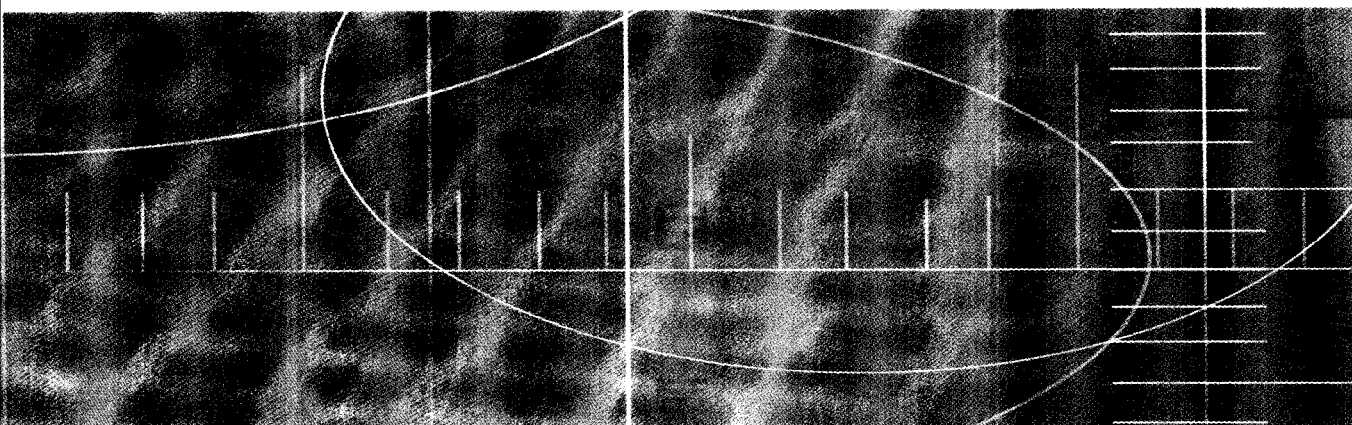
此外，由于时间仓促，加上编者水平有限，书中难免有不妥之处，恳请广大读者批评指正！

编 者
2006 年 3 月

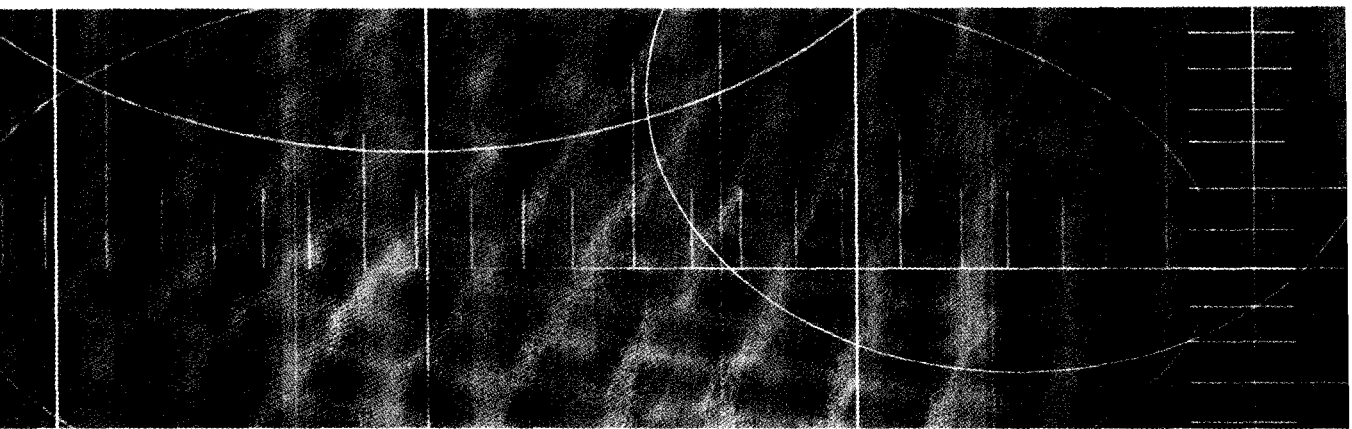
目 录



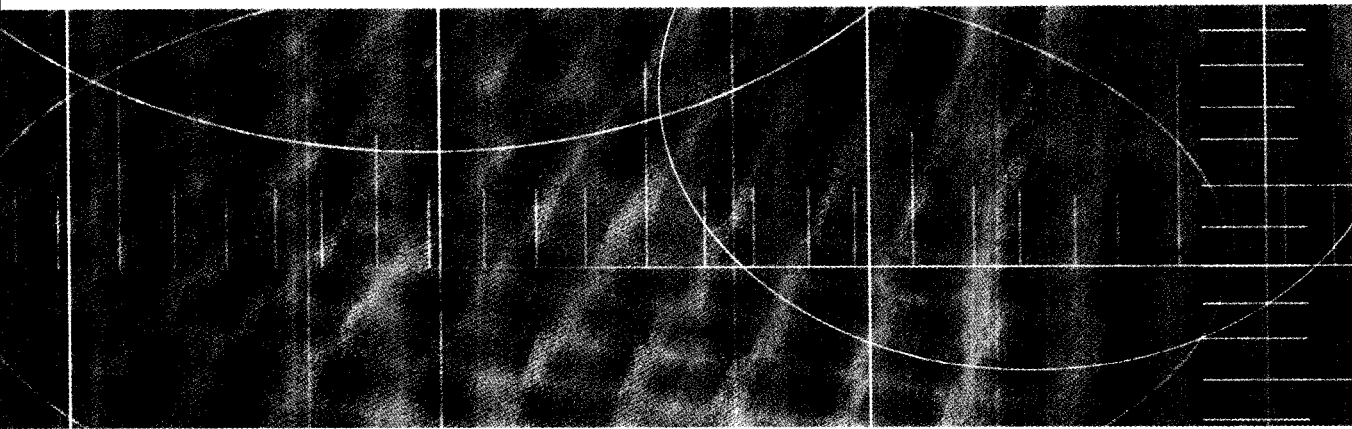
第 1 章 ChemCAD 入门	1
1.1 ChemCAD 的安装与配置	1
1.1.1 什么是 ChemCAD	1
1.1.2 系统要求	2
1.1.3 ChemCAD 的安装	2
1.2 ChemCAD 简介	4
1.2.1 ChemCAD 的模块	4
1.2.2 ChemCAD 提供的单元操作	5
1.2.3 ChemCAD 提供的热力学方法	5
1.3 ChemCAD 的用途及特点	5
1.3.1 ChemCAD 的用途	5
1.3.2 ChemCAD 的应用领域	6
1.3.3 ChemCAD 的特点	6
1.4 用 ChemCAD 进行流程模拟	9
1.4.1 ChemCAD 的运行界面	9
1.4.2 用 ChemCAD 进行流程模拟的基本步骤	32
第 2 章 ChemCAD 模拟反应过程	47
2.1 化学反应器的类型	47
2.2 反应器的操作方式	48
2.3 反应器设计的基本方程式	49
2.3.1 反应器中流体流动模型	49
2.3.2 反应器设计的基本方程式	50
2.4 反应动力学基础	50
2.4.1 反应速率方程	51
2.4.2 复合反应	51
2.4.3 化学反应的转化率及收率	52



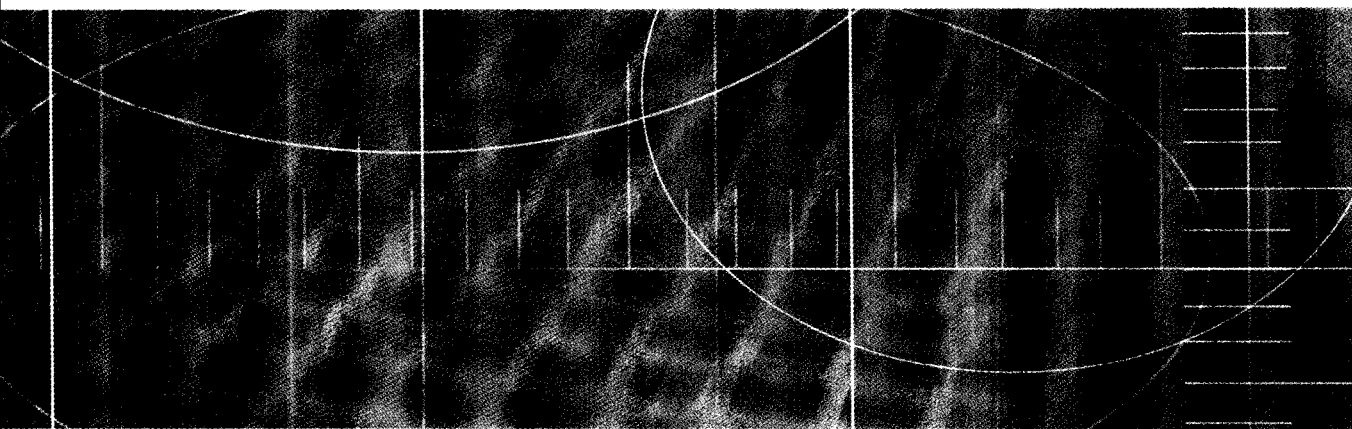
2.4.4	多相催化反应动力学	52
2.5	理想流动反应器	53
2.5.1	平推流反应器	53
2.5.2	全混流反应器	53
2.6	ChemCAD 模拟反应实例	54
2.6.1	化学计量系数反应器	54
2.6.2	化学平衡反应器	59
2.6.3	吉布斯反应	66
2.6.4	动力学反应器	70
第 3 章	ChemCAD 模拟分离过程	77
3.1	分离过程单元操作	77
3.2	单级分离过程	79
3.2.1	相平衡关系	79
3.2.2	相平衡关系的计算方法	79
3.2.3	多组分物系泡点和露点的计算	80
3.2.4	闪蒸过程	80
3.3	多组分多级分离过程	80
3.3.1	多组分精馏过程	80
3.3.2	萃取精馏和共沸精馏	82
3.3.3	吸收和蒸出	83
3.3.4	萃取	83
3.4	ChemCAD 模拟分离实例	83
3.4.1	混合物热力学性质的计算	83
3.4.2	闪蒸过程	88
3.4.3	三组分精馏	93
3.4.4	萃取过程	100
3.4.5	间歇精馏	103



第 4 章 ChemCAD 模拟换热过程	111
4.1 换热器的分类和选择	111
4.1.1 换热器的分类	111
4.1.2 换热器的选择	113
4.2 几种常用的换热器	113
4.2.1 管壳式换热器	113
4.2.2 板式换热器	114
4.2.3 套管式换热器	114
4.2.4 空冷器	115
4.3 传热计算的基本方法	116
4.3.1 沸腾	116
4.3.2 冷凝	118
4.3.3 区域分析	120
4.4 CC-THERM 的命令介绍	120
4.4.1 基本步骤	120
4.4.2 绘制热曲线	122
4.4.3 编辑热曲线	123
4.4.4 参数介绍	124
4.4.5 热虹吸再沸器	128
4.4.6 换热器几何结构	130
4.4.7 结果查看	136
4.4.8 绘图	138
4.4.9 结果报告	138
4.5 CC-THERM 的结果分析	140
4.5.1 综合报告	140
4.5.2 TEMA 页	140
4.5.3 热曲线	140



4.5.4	壳程数据	140
4.5.5	管程数据	141
4.5.6	表格化数据	141
4.5.7	逐区分析	143
4.5.8	公差数据	144
4.5.9	波动分析	145
4.5.10	优化.....	146
4.6	换热器计算实例	147
4.6.1	板壳式换热器计算	147
4.6.2	板式换热器计算	161
4.6.3	空冷换热器计算	166
第 5 章	CC-DYNAMIC 入门	173
5.1	CC-DYNAMIC 的简介	173
5.1.1	什么是 CC-DYNAMIC	173
5.1.2	CC-DYNAMIC 的用途	175
5.1.3	CC-DYNAMIC 的特点	175
5.2	CC-DYNAMIC 的安装	176
5.3	CC-DYNAMIC 模拟的基本步骤	177
第 6 章	CC-DYNAMIC 的命令	179
6.1	CC-DYNAMIC 的开关	179
6.2	CC-DYNAMIC 的命令	181
6.3	CC-DYNAMIC 的计算结果	183
6.4	CC-DYNAMIC 的结果绘图	184
第 7 章	CC-DCOLUMN 动态模拟	187
7.1	CC-DCOLUMN 动态蒸馏塔模型	187
7.2	CC-DCOLUMN 的命令菜单	187



7.2.1	初始条件对话框 (Initial condition)	188
7.2.2	开工条件对话框 (Startup parameters)	189
7.2.3	开工装料对话框 (Startup Charge)	190
7.2.4	塔持液量对话框 (Column Holdups)	191
7.2.5	动态塔规定对话框 (Specs)	192
7.2.6	回流控制对话框 (Reflux control)	195
7.2.7	塔板记录对话框 (Record stages)	196
7.2.8	绘图选项对话框 (Plot options)	196
7.3	CC-DCOLUMN 模拟开环响应蒸馏塔	197
7.3.1	选择工程单位	198
7.3.2	绘制流程图	198
7.3.3	选择组分	198
7.3.4	选择热力学模型	199
7.3.5	定义进料流股	199
7.3.6	定义操作单元	199
7.3.7	运行模拟计算并显示计算结果	199
7.3.8	安装用于改变进料的斜坡控件	201
7.3.9	设置用于改变进料的斜坡控件	202
7.3.10	“C2”蒸馏塔的动态设置	203
7.3.11	进料发生改变的“C2”蒸馏塔运行与结果查看	205
7.3.12	安装用于改变热负荷的斜坡控件	207
7.3.13	设置用于改变热负荷的斜坡控件	207
7.3.14	进料与热负荷同时发生改变的“C2”蒸馏塔运行与结果查看	208
7.4	CC-DCOLUMN 模拟精馏塔开车过程	210
7.4.1	绘制工艺流程图	211
7.4.2	选择工程单位与组分	211
7.4.3	选择热力学模型	212

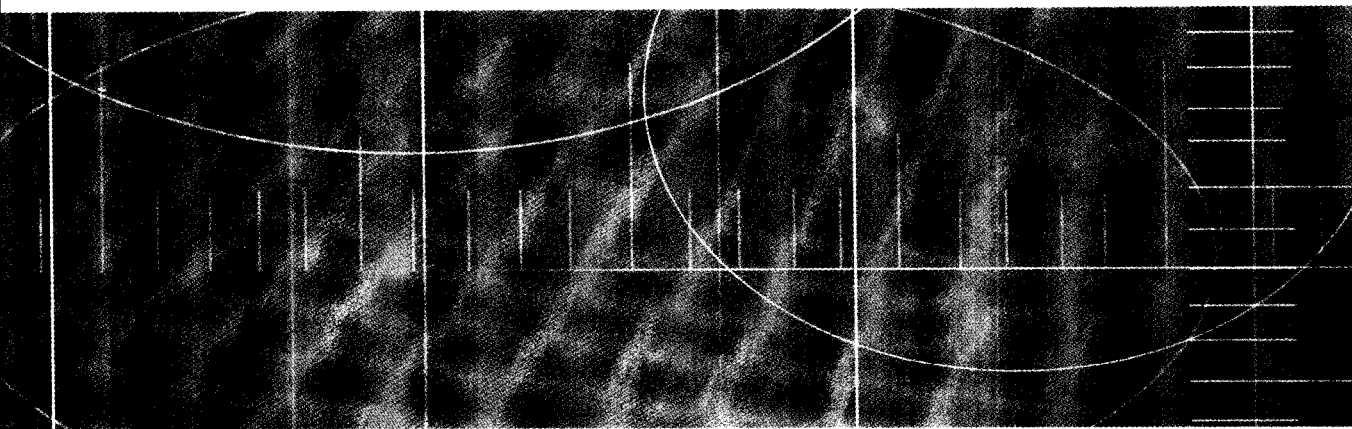
7.4.4	定义进料流股与蒸馏塔	212
7.4.5	关于化学反应的设置	213
7.4.6	运行稳态模拟并查看结果	213
7.4.7	反应蒸馏塔“空冷开车”策略的设置	216
7.4.8	反应蒸馏开车模拟的动态命令菜单	217
7.4.9	“空冷开车”策略的运行与结果查看	217
7.4.10	反应蒸馏塔“充液开车”策略的设置	220
7.4.11	“充液开车”策略的运行与结果查看	220

第 8 章 CC-DYNAMIC 的控制元件

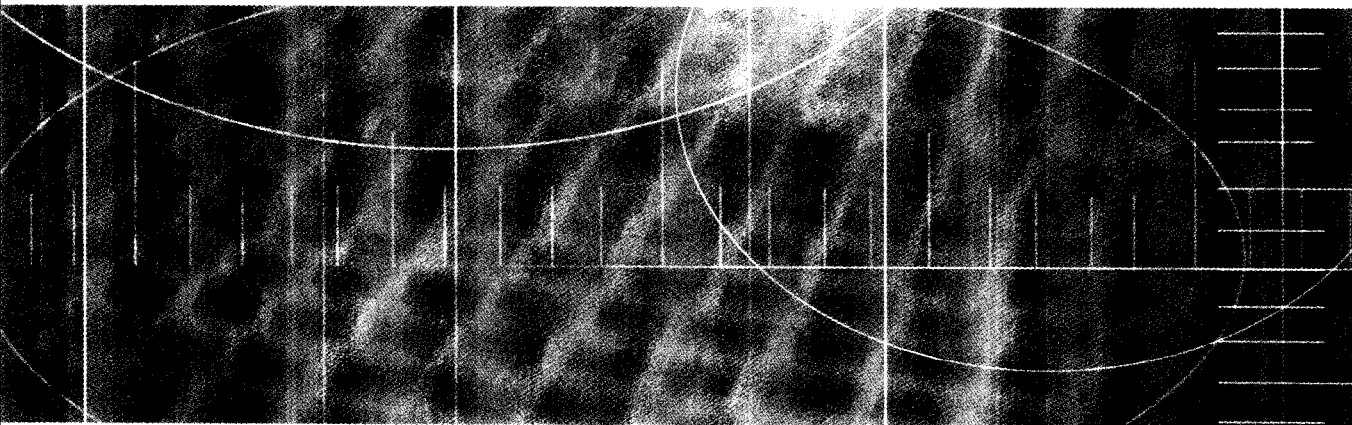
8.1	PID/CVAL 控制系统	225
8.1.1	给定点变量的测量值	226
8.1.2	传感器输出信号的计算	226
8.1.3	PID 控制元件的功能	227
8.1.4	控制阀阀门位置计算	227
8.1.5	控制阀流量计算	228
8.2	CC-DYNAMIC 的控制阀命令	229
8.3	CVAL 控制阀的设计与应用	231
8.3.1	设计 CVAL 控制阀	231
8.3.2	CVAL 控制阀流量定义	234
8.3.3	CVAL 控制阀位置定义	236
8.4	CC-DYNAMIC 的 PID 控件命令	237
8.4.1	PID 控件命令——第一页	238
8.4.2	PID 控件命令——第二页	239
8.5	CC-DYNAMIC 模拟精馏塔的控制过程	240

第 9 章 CC-DYNAMIC 模拟动态累积罐

9.1	动态累积罐的模型	265
-----	----------------	-----



9.1.1	压力的计算	266
9.1.2	计算模式	267
9.1.3	液位的保持	267
9.1.4	气体流动模型	268
9.2	DIERS 紧急放空系统	268
9.3	动态累积罐的命令	270
9.3.1	“Dynamic Vessel” 命令——Configuration	270
9.3.2	“Dynamic Vessel” 命令——Calculated Results	272
9.3.3	“Dynamic Vessel” 命令——Relief Device	272
9.4	设计紧急放空系统	273
9.5	核算紧急放空系统	276
9.6	储罐的紧急放空过程	279
第 10 章	CC-DYNAMIC 模拟动态反应器	285
10.1	动态反应器的模型	285
10.1.1	质量平衡	286
10.1.2	反应动力学	286
10.1.3	热量平衡	287
10.1.4	压力计算	288
10.1.5	紧急排放	288
10.2	“CC-ReACS” 的命令	288
10.2.1	初始料液	288
10.2.2	通常的信息	288
10.2.3	反应速率计量单位	291
10.2.4	反应动力学	292
10.2.5	时间-温度	292
10.2.6	反应器的参数	293
10.2.7	进料进度表	296



10.2.8	产品进度表.....	296
10.2.9	紧急排放对话框.....	297
10.2.10	运行时作图对话框	297
10.3	CC-DYNAMIC 模拟动态反应器	298
10.3.1	反应过程的动态模拟.....	298
10.3.2	反应器控制过程的动态模拟.....	304
参考文献		312

第 1 章

ChemCAD 入门

本章有三方面主要内容：首先介绍了什么是 ChemCAD 及其运行环境与正确安装方法；第二部分介绍了 ChemCAD 的用途和特点；第三部分叙述了如何启动 ChemCAD 并以一个实例说明如何使用 ChemCAD 来进行化工模拟。通过本章的学习，读者可初步了解什么是 ChemCAD 及掌握 ChemCAD 的基本操作方法及规则。

1.1 ChemCAD 的安装与配置

1.1.1 什么是 ChemCAD

ChemCAD 是一个具有强大功能的化工计算机模拟软件，由美国 Chemstations 公司开发推出，是可广泛应用于化学和石油工业、炼油、油气加工等领域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。经过研究人员的不断开发，Chemstations 公司已推出了 ChemCAD 一系列的版本，ChemCAD5.4 是目前该公司推出的最新版本。

1.1.2 系统要求

ChemCAD 提供了强大的计算和分析功能,但只有在适当的外部环境中才能正常运行。因此,恰当的配置外部系统是保证 ChemCAD 运行良好的先决条件。ChemCAD 可运行于 Windows 95/NT、Windows XP 及 Windows 2000 环境。

1.1.3 ChemCAD 的安装

ChemCAD 的安装过程与 Windows 下的大多数应用程序的安装过程大致相同,用户只要按照屏幕提示操作,就能顺利地安装 ChemCAD。

➤ 首先点击安装文件中的 setup.exe 应用程序,启动“安装向导”,会出现如图 1-1 所示的安装界面。

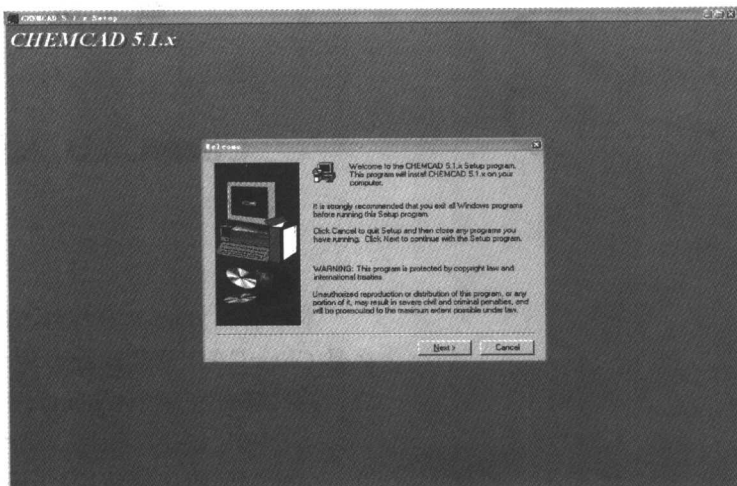


图 1-1 ChemCAD 的安装界面

➤ 单击 Next 继续下一步,安装程序要求用户选择安装路径,用户可使用其默认的路径,也可以根据自己的意愿单击 Browse 改选自己所希望的安装路径。如图 1-2 所示。

➤ 选择好安装目录后,单击 Next 进入下一步,选择范例的安装路径,方法同上

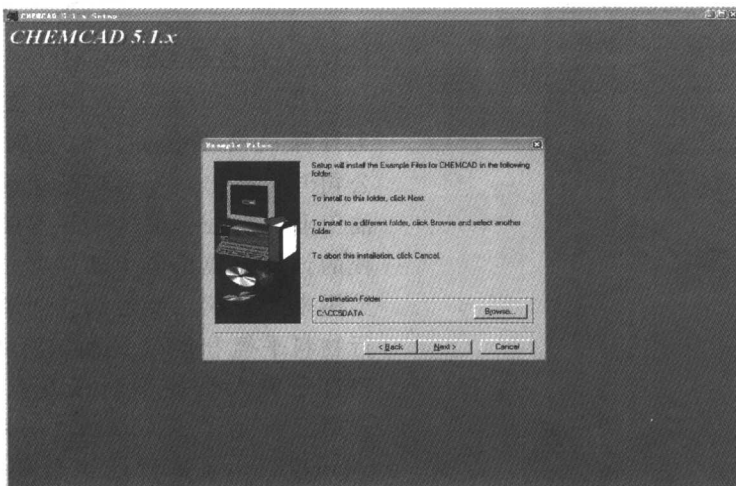


图 1-2 选择安装目录

一步。

➤ 单击 Next 进入下一步，选择数据文件的存放路径，用户可根据自己的需要使用 Browse 按钮选择路径，也可使用默认的路径。

➤ 选择完路径后，进入下一步，用户可在 Program Folder 下的框中键入名称创建应用程序组，一般情况下，使用默认名称 ChemCAD。如图 1-3 所示。

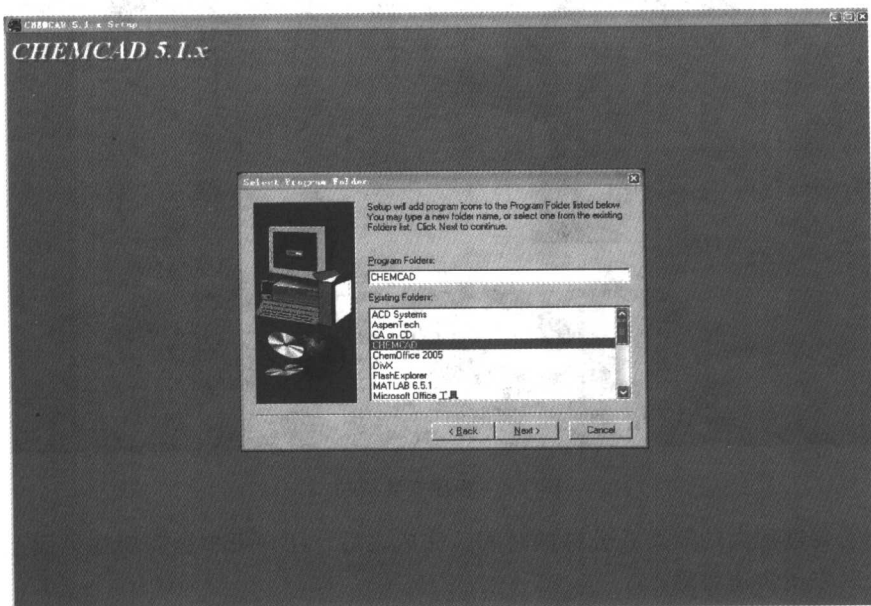


图 1-3 创建用户程序组

- 以上步骤完成之后，开始安装 ChemCAD，安装的界面如图 1-4 所示。
- 当安装过程结束之后，屏幕显示如图 1-5 所示的界面，此时用户已将 ChemCAD

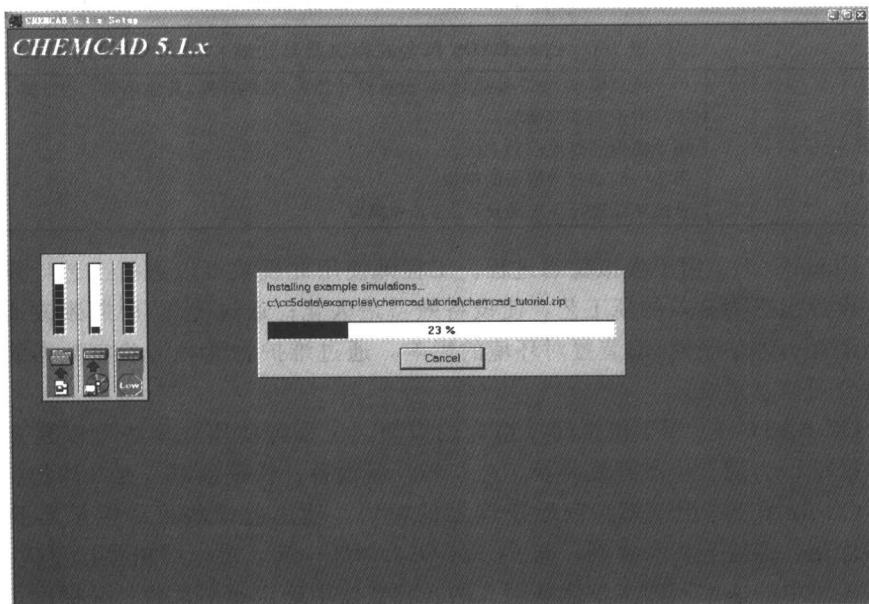


图 1-4 安装过程