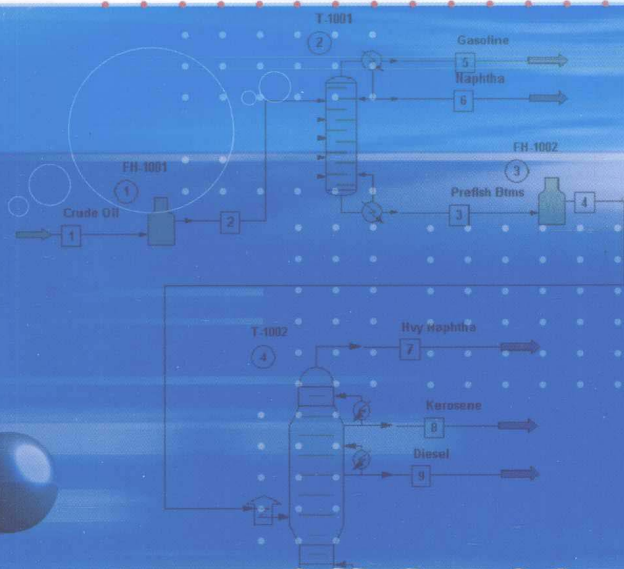




普通高等教育“十二五”规划教材



流程模拟软件ChemCAD 在化工中的应用

傅承碧 徐铁军 沈国良 阎金城 编著

中国石化出版社

[HTTP://WWW.SINOPEC-PRESS.COM](http://www.sinopec-press.com)

普通高等教育“十二五”规划教材

流程模拟软件 ChemCAD 在化工中的应用

傅承碧 徐铁军 沈国良 阎金城 编著

中国石化出版社

内 容 提 要

ChemCAD 是美国 Chemstations 公司开发, 在世界上得到了较广泛应用的化工流程模拟软件。本书从高等学校工程设计与计算课程的教学出发, 结合工业生产和设计的实际, 系统介绍了 ChemCAD 软件的功能、使用方法和操作过程。本书第 1 章介绍了流程模拟的基本知识; 第 2 章介绍了 ChemCAD 软件的基本操作方法和步骤; 第 3 章至第 5 章结合大量典型的分离、反应和换热过程的实例, 详细说明了利用 ChemCAD 进行单元过程模拟的具体方法与步骤; 第 6 章介绍了利用 ChemCAD 进行流程模拟; 第 7 章介绍了 ChemCAD 在实验数据处理等方面的应用。

本书可作为高等学校化学及化工类专业本科生和专科生的教学参考书, 也可供石油与化工等领域从事化工过程的开发与设计的工程技术人员参考。

图书在版编目 (CIP) 数据

流程模拟软件 ChemCAD 在化工中的应用 / 傅承碧等编著.

—北京: 中国石化出版社, 2011. 3
普通高等教育“十二五”规划教材
ISBN 978-7-5114-0827-3

I. ①流… II. ①傅… III. ①化工过程-流程模拟-应用软件, ChemCAD-高等学校-教材 IV. ①TQ02-39

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2011) 第 030843 号

未经本社书面授权, 本书任何部分不得被复制、抄袭, 或者以任何形式或任何方式传播。版权所有, 侵权必究。

中国石化出版社出版发行

地址: 北京市东城区安定门外大街 58 号

邮编: 100011 电话: (010) 84271850

读者服务部电话: (010) 84289974

<http://www.sinopec-press.com>

E-mail: press@sinopec.com.cn

北京科信印刷有限公司印刷

全国各地新华书店经销

*

787 × 1092 毫米 16 开本 12.5 印张 312 千字
2011 年 3 月第 1 版 2011 年 3 月第 1 次印刷
定价: 28.00 元

前 言

随着计算机计算能力快速提高和软件技术开发的迅猛发展，模拟计算的准确性和可靠性大大加强，应用范围不断拓宽，功能也日益丰富，模拟计算软件的应用越来越受到人们的重视。ChemCAD 化工流程模拟软件是美国 Chemstation 公司开发的，由于多年来它在化工领域中为工艺开发、工程设计、优化操作和技术改造做出巨大的贡献，一直受到广大化学和化工技术人员的青睐。为了让更多的初学者了解和应用这一化工流程模拟软件，使 ChemCAD 化工流程模拟软件发挥更大的作用，笔者根据多年化工方面的教学经验和对软件的应用实践，编写了这本 ChemCAD 化工流程模拟软件应用指导性参考书。主要内容包括流程模拟的基础知识；ChemCAD 软件的基本操作方法和步骤；分离、反应和换热等化工单元过程的模拟；化工流程模拟以及 ChemCAD 在实验数据处理等方面的应用。本书的特点是按照化工工艺计算、设计需要精选内容，详细介绍了化工过程的计算及具体应用，注重实用性，便于掌握。由于 ChemCAD 软件还没有汉化版，为了便于读者学习和使用，主要操作的选项笔者采用了英汉对照的形式。

本书由傅承碧主编，全书共分 7 章，其中第 1、3、5 共三章由傅承碧执笔，第 2、6 章由徐铁军执笔，第 4 章由沈国良执笔，第 7 章由阎金城执笔。全书由阎金城、沈国良审定。

由于化工应用技术发展迅速，ChemCAD 系列软件不断推陈出新，又限于作者的水平，书中必定有许多不当之处，恳请读者指正，提出宝贵意见。

目 录

第 1 章 流程模拟系统概述	(1)
1.1 化工流程模拟基本概念及发展简介	(1)
1.2 化工流程模拟系统	(2)
1.3 化工流程模拟系统的构成	(3)
1.4 ChemCAD 介绍	(4)
1.5 ChemCAD 的安装与配置	(8)
第 2 章 ChemCAD 的基本操作	(10)
2.1 启动 ChemCAD	(10)
2.2 ChemCAD 的主窗口	(10)
2.3 建立和打开文件	(12)
2.4 选择工程单位	(13)
2.5 绘制流程图	(14)
2.6 选择组分	(15)
2.7 选择热力学性质的计算方法	(16)
2.8 规定进料物流	(22)
2.9 输入设备参数	(24)
2.10 模拟运算	(25)
2.11 查看计算结果	(25)
2.12 输出	(33)
第 3 章 分离单元模拟	(40)
3.1 概述	(40)
3.2 简捷法计算板式精馏塔	(42)
3.3 严格法计算板式精馏塔	(50)
3.4 填料吸收塔	(71)
3.5 闪蒸器	(78)
3.6 共沸精馏	(81)
3.7 萃取	(96)
3.8 萃取精馏	(99)
3.9 反应精馏	(110)
第 4 章 换热单元模拟	(122)
4.1 热交换器计算	(122)
4.2 冷凝器设计	(123)
4.3 再沸器设计	(135)
第 5 章 反应单元模拟	(141)
5.1 化学计量系数反应器	(141)

5.2	动力学反应器	(148)
5.3	化学平衡反应器	(154)
5.4	Gibbs 反应器	(160)
5.5	间歇反应器	(162)
第 6 章	化工流程模拟	(170)
6.1	辛烯生产工艺流程	(170)
6.2	液化石油气生产工艺流程	(173)
6.3	乙酸酐生产工艺流程	(179)
第 7 章	ChemCAD 的其他应用	(185)
7.1	拟合实验数据	(185)
7.2	气液平衡计算	(188)
7.3	计算物性数据	(190)
参考文献		(193)

第 1 章 流程模拟系统概述

1.1 化工流程模拟基本概念及发展简介

化工流程模拟就是用数学模型表达一个由许多单元过程组成的化工流程，然后用计算机求解描述整个化工生产过程的数学模型，得到有关化工过程性能的信息。

现代化的化工生产日益朝着综合化方向发展，对一个装置或一个单元设备孤立地进行研究、设计操作管理的传统做法已不能适应要求，必须将其作为一个整体系统来研究。随着石油化工装置日趋大型化，要求实现最优设计、最优控制和最优管理，以达到节省装置投资、降低生产操作费用和成本费用以及符合环保要求的目的。

化工流程模拟技术利用计算机高超的计算能力解算化工过程的数学模型，以模拟化工过程的性能，经过 40 多年的发展已经广泛应用于化工过程的研究开发、设计、生产操作的控制与优化、操作工的培训和老厂技术改造。随着计算机硬件的性能/价格比的迅速提高、软件环境的改善与丰富，过程模拟技术发展更加迅速，应用更加广泛。

1958 年美国 Kellogg 公司推出了世界上第一个化工模拟程序——Flexible Flowsheeting。

20 世纪 60 年代是化工过程模拟的初始发展期。60 年代初 FORTRAN、ALGOL、COBOL 等高级语言相继问世，计算机价格性能比逐渐下降，为化工过程模拟的普遍应用提供了物质条件。各有关大学、研究机构和炼油、石化公司纷纷开始研制自己的模拟系统，到 60 年代末，化工流程模拟的概念被普遍接受。但这一时期开发的各种模拟系统大多是为满足开发单位的自身需要。即使是商业性的流程模拟系统，由于缺乏开发经验，还没有接受过大量计算实例的考验，而开发单位以外的用户大都没有接受过化工过程数学模拟的专业训练。对于这些新用户面临着培训操作人员的问题，特别是模拟系统在运算过程中出现不能收敛，或计算结果无法从物理意义上解释等情况时，用户往往没有能力处理，仍需求助于程序开发者。以上因素都影响了流程模拟的普遍应用。

从 20 世纪 70 年代起，流程模拟逐渐进入了它的成长壮大期，流程模拟的可靠性不断提高，应用范围不断扩大，开始成为化学工程师的常规工具。商用模拟系统的规模日益扩大，功能不断增强。美国 Monsanto 公司的 FLOWTRAN、Simulation Sciences 公司的 PROCESS 和麻省理工学院的 ASPEN 都是这一时期比较优秀的软件。到 20 世纪 70 年代末，流程模拟已得到普遍信任，化工过程模拟得到了工业界的普遍承认。与此同时，这一领域的第一批专著，如 A. W. Westerberg 等所著《工艺流程模拟》和倍涅荻克等所著《化工装置稳态流程模拟》先后于 1979 年和 1980 年问世。

进入 20 世纪 80 年代，化工流程模拟走向了它的成熟期。模拟软件的开发、研制走向专业化和商品化。从过去的分散在大学和各个炼油、石化公司转向主要由专门的化工软件公司进行。模拟计算的准确性和可靠性大大加强，应用范围不断拓宽，功能愈益丰富，使用越来越方便，并且涌现出一批著名的、影响广泛的商业化软件，如美国 Aspen Tech 公司的 ASPEN PLUS，Simulation Sciences 公司的 PRO/II，加拿大 Hyprotech 公司的 HYSIM 等。

从 20 世纪 90 年代开始，是化工模拟的深入发展期。最主要的特点是从“离线”走向“在

线”，从稳态模拟发展到动态模拟和实时优化，从单纯的稳态计算发展到和工业装置紧密相联。这一时期，化工过程模拟获得了大范围的推广应用，不仅在设计、研究部门是必备的工具，在各炼油、石油化工企业中也广为应用。国外不少企业已将著名的软件如 ASPEN PLUS 或 PRO/II 等定为企业标准。

1.2 化工流程模拟系统

对一化工生产过程进行流程模拟，需要建立流程的物理模型和数学模型、开发数学模型的求解方法、编制和调试计算机程序、利用计算机进行计算以及对计算结果进行分析等一系列步骤。如果每处理一个具体的流程模拟问题都要经历上述各步，必将造成大量的重复劳动。因此，在流程模拟技术发展之初，就提出了开发能使用于多种化工过程的流程模拟程序的设想。

流程模拟系统是一种计算机程序系统，它能接受由用户提供的有关化工生产流程的信息，进行对化工过程开发、装置设计和操作有用的分析计算。从应用范围来看，化工流程模拟系统可分为两大类，即通用流程模拟系统和专用流程模拟系统。根据模拟对象所要求的特性与时间的关系，化工流程模拟可分为稳态流程模拟和动态流程模拟。

(1) 通用化工流程模拟系统

通用化工流程模拟系统是指并非针对特定流程开发的、对不同流程均可适用的、带有通用性的化工流程模拟系统。它备有通用的、可供用户选择的各种单元操作的计算方法，各种物理性质和热力学性质的计算方法，系统分解和收敛方法，工程费用和操作费用的资料以及数值方法程序库等。常用的通用流程模拟系统有美国 Monsanto 公司的 FLOWTRAN 系统、美国 Aspen 公司的 ASPEN PLUS 系统、美国 Simulation Sciences 公司的 PROCESS 系统、Chemstations 公司的 ChemCAD 系统等。

(2) 专用化工流程模拟系统

由于通用流程模拟系统所能达到的精确程度往往不能满足工业生产装置的模拟要求，因此，需要能提供更精确可靠的计算结果的专用流程模拟系统。专用化工流程模拟系统是针对某特定流程专门开发的，只用于对该流程进行模拟的流程模拟系统，不具有通用性。与通用流程模拟系统相比，其具有如下特点：

① 具有更准确可靠的物性数据。利用通用流程模拟系统对流程进行初步评价时，一般不要求将物性估算系统提供的物性数据和实测数据进行比较。专用流程模拟系统要求有一定数量的实测数据，以便对估算物性的精度做出评价，并根据实测数据回归比较可靠的模型参数，或对物性估算方法作某些修正，以保证估算物性的精度和可靠性。

② 要提供尽可能准确的反应器模型。反应器模块可能是流程模拟中最难通用化的部分，反应器模型往往十分简单。专用流程模拟系统要求提供尽可能准确的反应器模型，希望利用反应动力学方程，并将它和反应器的流动模型、传热、传质模型相结合，以准确地模拟不同操作条件下的反应结果。

③ 采用更详尽的单元操作模型。通用流程模拟系统的单元操作模型，是按实现该类设备的最通用的结构建立的，不能充分反映实际设备的特性。专用流程模拟系统则要求每个单元设备的模型都能以足够的深度考虑其中进行的物理化学过程。

④ 采用根据装置操作数据确定的校正因子。由于化工过程中组分和流动状况的复杂

性，依然存在各种难以用数学关系式精确描述的因素。专用流程模拟系统的数学模型中，往往包含一些纯经验性质的参数，即校正因子来反映以上因素的影响，其数值根据某一个特定装置的操作数据采用适当的回归程序来确定。由于专用流程模拟系统只具有专用性，故该类系统主要由化工软件公司和化工生产公司或工程公司合作开发的专用流程模拟系统，如 Aspen 技术公司和 Kellogg 公司合作开发的合成氨专用流程模拟系统。

(3) 稳态流程模拟

稳态流程模拟是化工流程模拟研究中开发最早、应用最普遍和发展比较成熟的一种重要技术。稳态模拟的目的就是用适宜的系统数学模型来预测过程的稳态性能。它包括物料衡算和能量衡算、设备尺寸和费用计算以及过程的技术经济评价。

(4) 动态流程模拟

由于实际生产过程中总是存在各种各样的波动、干扰以及条件的变化，因而化工过程的动态变化是必然的、经常发生的。如意外事故、设备故障、人为的误操作以及装置的误停车等种种波动和干扰，都会引起原有的稳态过程和平衡发生破坏，而使系统向着新的平衡发展。这些问题不是稳态模拟所能解决的，必须由化工动态模拟来回答。

动态模拟广泛地应用于各种过程动态特性的研究，研究过程参数随时间变化的规律，从而得到有关过程正确设计方案或操作步骤。动态模拟主要应用于：

- ① 了解单元操作设备经受动态负荷变化的能力及可操作性；
- ② 分析开停车及外部干扰作用下的动态性能，为装置及其控制系统的设计提供依据，加速开停车过程，节省能量，使系统对外界干扰的灵敏度减至最小；
- ③ 在多种控制方案中，通过仿真计算进行优选，进而设计出先进的控制系统；
- ④ 用动态模拟手段代替实际装置对操作做出动态响应，开发训练操作人员的培训器，高效率培训操作工人；
- ⑤ 以动态模拟手段代替教学实验设备，培养学生实验能力。

前三种用途需要设计型动态模拟系统，后两种用途需要操作型动态模拟系统。

1.3 化工流程模拟系统的构成

稳态模拟系统的构成如图 1-1 所示。

现代的流程模拟系统既可以用流程图，也可采用数据文件的方式输入，且这两种方式之间可以相互转换。输入之后便进行流程拓扑分析和数据检查。调度系统相当于指挥中心，程序根据输入信息，进行物流、热力学方法、单元过程及其他模块的匹配和调度，动态地组织流程，进行计算，直至收敛。

流程模拟系统的组成部分中，最为重要的是热力学方法库和化工单元过程库。有无适当的化工单元模块，决定了该化工过程是否能够进行计算。而有无适当的热力学方法，又决定了计算结果是否准确可靠。当前通过长期深入研究，大多数单元过程都有了

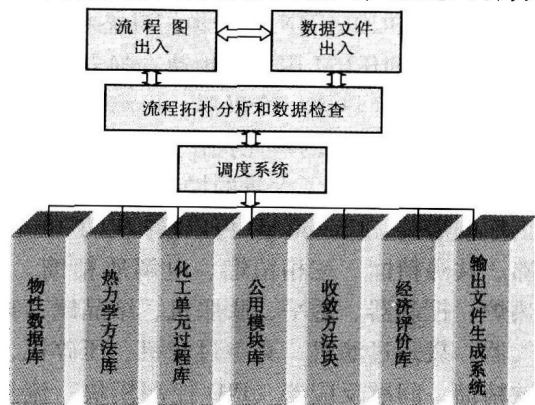


图 1-1 流程模拟系统的结构

准确、严格的算法。而热力学方法的研究，相对来说还不能完全满足实际工作的需要。尤其在处理极性物质方面，在相当大的程度上还取决于是否有足够的、准确的实验数据。因而在进行化工过程模拟时，首先必须考虑的是应选择适合所计算物系的准确的热力学方法。往往热力学方法已成为模拟是否成功的决定性因素。

1.4 ChemCAD 介绍

(1) ChemCAD 的用途

ChemCAD 是一个通用流程模拟软件，其中包括稳态模拟和动态模拟，可对化学和石油化学等过程工业中的单元设备和工艺流程进行计算机模拟，在工艺开发、工程设计、优化操作和技术改造中都能发挥很大的作用。

① 工程设计 在工程设计中，无论是建立一个新厂或是对老厂进行改造，ChemCAD 都可以用来选择方案、确定设备尺寸和操作条件以及研究处理原料范围的灵活性。工艺设计模拟研究不仅可以避免工厂设备交付前的费用估算错误，还可用模拟模型来优化工艺设计，同时通过进行一系列的工况研究，来确保工厂能在较大范围的操作条件下良好运行。即使是在工程设计的最初阶段，也可用来估计工艺条件变化对整个装置性能的影响。

② 优化操作 对于老厂，由 ChemCAD 建立的模型可作为工程技术人员用来改进工厂操作、提高产品的产率以及减少能量消耗的有力工具。可用模拟的方法来确定操作条件的变化以适应原料、产品要求和环境条件的变化。

③ 工艺开发 一旦有了工艺过程的概念流程，就可以利用 ChemCAD 开发相应的模型，不断获得有关工艺过程的信息，逐步完善这一模型，直至形成完整的工艺包。

④ 技术改造 ChemCAD 也可用模拟研究工厂合理化方案以消除瓶颈问题，或采用先进技术改善工厂状况的可行性，如采用改进的催化剂、新溶剂或新的工艺过程操作单元。

(2) ChemCAD 的模块

ChemCAD 是由多个模块组成的，ChemCAD5 包含的模块及其功能如下：

① ChemCAD 用于稳态流程模拟、物性数据计算、设备尺寸计算、成本计算以及其他化学工程计算。

② CC - BATCH 用于模拟间歇精馏塔。

③ CC - ReACS 用于模拟间歇反应器。

④ CC - DCOLUMN 用于模拟动态精馏塔。

⑤ CC - THERM 用于模拟热交换器。主要用于管壳式热交换器的设计和核算，应用范围包括一般的换热器、冷凝器、再沸器、蒸发器等。

(3) ChemCAD 的单元操作

ChemCAD 提供了大量的操作单元供用户选择，使用这些操作单元，基本能够满足一般化工厂的需要。ChemCAD 可以模拟以下单元操作：精馏、汽提、吸收、萃取、共沸、三相共沸、共沸精馏、三相精馏、电解质精馏、反应精馏、反应器、热交换器、压缩机、泵、加热炉、控制器、透平、膨胀机、结晶罐、离心机、旋风分离器、湿式旋风分离器、文氏洗气器、袋式过滤机、真空过滤机、压碎机、研磨机、静电收集器、洗涤机、沉淀分离器、间歇精馏、间歇反应器、PID 控制模块、流量控制阀、记录器模块等共 50 多个单元操作，为反应器和分离塔提供了多种计算方法。作为流程模拟软件，用户可将有关单元操作组织

起来,形成整个装置、车间或全厂的流程,进而完成整个系统的模拟计算。

(4) ChemCAD 的物性数据

ChemCAD 提供了标准、共享和用户三种组分数据库。

标准数据库以美国化学工程师学会(AIChE, American Institute of Chemical Engineers)物性数据设计院(DIPPR, Design Institute for Physical Properties)的数据为基础。标准数据库中组分的编号 1~5000, ChemCAD 5.3 中含 2000 种纯物质。

共享数据库中的物性数据为一机构各用户可共享的数据,共享数据库中的组分编号为 6001~8000。用户数据库留给用户添加组分,用户数据库的组分编号为 8001~9999。通过原油蒸馏曲线得到的虚拟组分的编号为 5001~6000。

用户不能修改标准数据库中的数据,可以修改用户数据库中的数据。如果用户需要修改标准数据库中某一组分的数据,可以将此组分的数据拷贝到用户数据库中,将其转化成用户数据后进行修改和使用。

ChemCAD 提供了多种计算 K 值、焓、熵、密度、黏度、导热系数和表面张力的方法供用户选择使用。这些计算方法可以应用于烷烃以及电解质、盐、胺、酸水等特殊系统。ChemCAD 还提供了热力学专家系统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。ChemCAD 有处理固体的功能。对含氢系统,ChemCAD 采用一种特殊方法进行处理,可以可靠预测含氢混合物的反常泡点现象。

ChemCAD 热力学数据库收录有 8000 多对二元交互作用参数供 NRTL、UNIQUAC、MARGULES、WILSON 和 VAN LAAR 活度系数方法来使用。也可以采用 ChemCAD 提供的回归功能,通过实验数据回归二元交互作用参数。ChemCAD 对于不同单元或不同塔板可以应用不同的热力学方法或不同的二元交互作用参数。

(5) ChemCAD 的特点

1) 安装简单

ChemCAD 可以在 Windows95 及其以上版本下运行,安装时不需要进行特别的配置,只要正确安置了加密锁,一般都能正常运行。一个计算机的初学者也可独立完成整个系统的安装。

2) 支持各种输出设备

ChemCAD 支持各种输出设备,用以生成流程、单元操作图表、符号和工艺流程图。用户可以将有关结果输出到点阵打印机、激光打印机、支持 Adobe Postscript 语言的任何设备以及绘图机等,也可以直接输出到文件,还可以将输出转换为 AutoCAD 的 DXF 格式。如果 AutoCAD 和 ChemCAD 都安装在同一个计算机上,用户可以规定包含 AutoCAD 的位置,所有由 ChemCAD 产生的 DXF 文件都会自动存到 AutoCAD 目录中。

3) 界面体贴用户

ChemCAD 一直以操作简单、界面体贴用户而著称,目前版本的 ChemCAD 运行于 Windows 环境。根据 Microsoft Window 设计标准采用了 Microsoft 工具包及 Window Help 系统,使得 ChemCAD 对用户来说,外观及感觉和用户熟悉的其他 Window 程序十分相似。

ChemCAD 把屏幕分成标题栏、菜单栏、工具栏、工作区和提示栏 5 个区。第一行是标题栏,显示 ChemCAD 的版本号,任务名称等。第二行是菜单栏,显示顶层菜单,这些菜单经过精心安排,从左至右是使用 ChemCAD 进行模拟计算的逐个主要步骤。每个顶层菜单下是一套弹出式菜单,这些菜单包括了 ChemCAD 内嵌的各个功能,使用这些菜单可以完成模拟计算中

所需进行的绝大部分工作。第三行是菜单栏，包含了一些常用的工具和操作按钮。主屏幕由流程窗口占据。屏幕最下面一行是提示栏，它为当前操作提供简单描述，因此被称作为“一行帮助”(One Line Help)。屏幕布置简洁，以菜单系统为基础的输入简明扼要，友好的图形人机对话界面使初学者很容易上手。ChemCAD 的主窗口如图 1-2 所示。

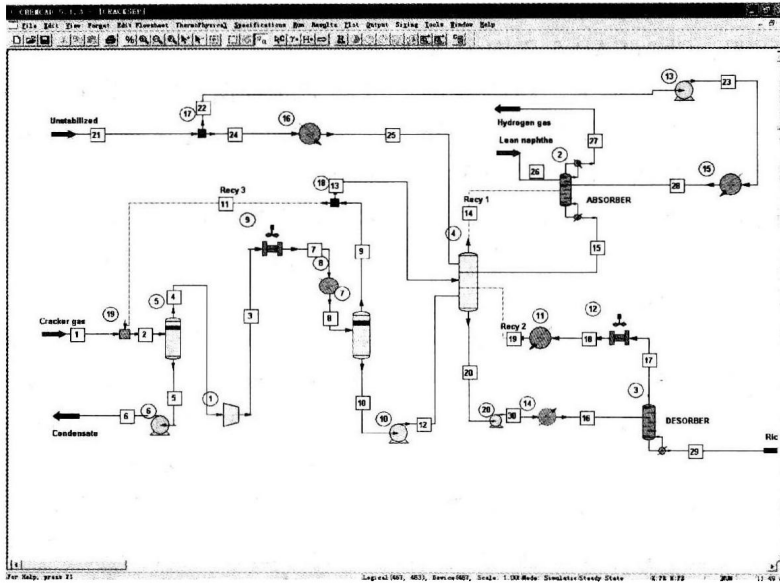


图 1-2 ChemCAD 的主窗口

通过 Window 交互操作功能，可使 ChemCAD 和其他应用程序交互作用：使用者可以迅速而容易地在 ChemCAD 和其他应用程序之间传送模拟数据。例如，可以将模拟结果输出到一个 Excel 报表中去，不仅方便，而且避免了手工抄写所产生的错误。

4) 详尽的帮助系统

用户可以利用 Help 菜单，解决在使用 ChemCAD 时所遇到的大部分疑问。在流程模拟过程中，还可以随时按下 F1 键，调出当前问题的帮助文件。前面提到的“一行帮助”也是 ChemCAD 的一个特点。输入系统采用了专家检测系统，专家系统会自动指引你下一步应当输入什么数据，并显示每一步骤是否已正确地完成。ChemCAD 提供了一套热力学专家系统，输入温度和压力范围，ChemCAD 根据组分及输入数据推荐一个合适的热力学方法，极大地方便了用户。

5) 作业和工况管理方便

作业和工况管理功能使用户可以方便地恢复、复制或删除流程。

6) 使用灵活

使用 ChemCAD 用户可以定义新增组分、图标和符号，用户也可以利用简单的计算机语言建立自己的设备模型和计算程序。ChemCAD 还考虑到多个用户使用同一台计算机时的情况，不同的用户可以在不同的目录中定义自己的组分、图标和符号，互不干扰。

7) 强大的计算和分析功能

ChemCAD 可以求解几乎所有的单元操作，对非常复杂的循环回路也可以轻松处理。在 ChemCAD 中，用户可以指定断裂流股，可以通过 Run 指令方便地控制计算顺序，这对全流程模拟的收敛非常有利，可以加速循环的收敛。ChemCAD 的自动计算功能具备先进的交互

特性，允许用户不定义物流的流量来确定物流的组成。ChemCAD 还具有先进的优化和分析功能。灵敏度分析模块可以定义 2 个自变量和多至 12 个因变量，优化模块可以求解有 10 个决策变量的函数的最大值或最小值。

8) 即时生成工艺流程图

ChemCAD 为用户形成工艺流程图(PFD)提供了集成工具。使用它可以迅速有效地建立 PFD。对指定流程，可以建立多个 PFD。如果以某种方式改变了流程，此改变情况会自动影响到所有相关的 PFD，如果重新进行了计算，新结果也会自动传送到所有相关的 PFD。在 PFD 中，可以方便地加入数据框(热量和物料平衡数据)、单元数据框(单元操作规定和结果)、标题、文字注释、公司代号等等。

9) 多种报告格式

ChemCAD 允许用户按照要求输出报告。在报告中，可以选择输出的物流、单元设备，规定物流中包含的数据。报告的总体格式可以选择 Word 文档、PRN 文件、Excel 工作表和 Excel 逗号分割值文件。对于数据，可以由用户规定小数点后的位数。

10) 集成了设备标定模块及工具模块

ChemCAD 集成了对精馏塔、管线、换热器、压力容器、孔板和调节阀进行设计和核算的功能模块，包括专门进行空气冷却器和管壳式换热器设计以及核算的 CC - Therm 模块。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 还提供了设备价格估算功能，用户可以对设备的价格进行初步估算。ChemCAD 在工具菜单中含有 CO₂ 固体预测、水合预测、减压阀和数据回归多个功能模块。

11) 支持动态模拟

Chemstations 公司开发了大量的动态操作单元，包括动态精馏模拟 CC - DCOLUMN、动态反应器模拟 CC - ReACS、间歇精馏模拟 CC - Batch 以及聚合反应器动态模拟 CC - Polymer。这些模块都完全集成到 ChemCAD 中，共享 ChemCAD 的数据库、热力学模型、公用工程和设备核算模块。

在动态模拟过程中，用户可以随时调整温度、压力等各种工艺变量，观察它们对产品的影响和变化规律。还可以随时停下来，转回静态。ChemCAD 提供了 PID 控制器、传递函数发生器、数控开关、变量计算表等进行动态模拟的控制单元，利用它们可以完成对流程中任何指定变量的控制。利用动态模拟，用户可以：

① 确定开停工方案 使装置安全、平稳地开车启动或停工是生产中的关键技术。用 ChemCAD 可以模拟开停工过程，看到开停工过程中的各种工艺参数的变化，从而研究各种开停工方案。

② 计算特殊的非稳态过程 当系统内部压力、温度不稳时，用稳态软件不能计算系统紧急放空，只能靠 ChemCAD Dynamical 的过程传递函数，利用微分逼近的原理来完成。利用这一新型工具，工程师可以解决许多前人无法解决的工程难题。

③ 生产指导和调优 由于 ChemCAD 的动态计算完全采用严格的热力学模型，所以能准确完全地模拟装置的动态操作过程，还可将装置的工艺参数调到各种极限状态，以确定装置的优化状态或分析装置出现生产问题的原因。

12) 经济评价功能

运用 ChemCAD 可以在做工艺计算的同时进行经济评价，用户能够估算基建费用和操作

费用，并进行过程的技术经济评价。ChemCAD 的技术经济评价方法与工业界应用的方法密切结合。经济评价可以使用于工作的任何阶段，从工艺过程的研究开发、设计到施工和生产操作等过程。

在使用全部经济评价系统功能时，ChemCAD 自模拟结果取出计算设备尺寸所需数据，然后进行全面的经济核算。用户还可将自身的价格指标和计算关系式存入系统，作为计算的依据。

13) 数据回归系统

ChemCAD 拥有高度灵活的数据回归系统，此系统可使用实验数据求取物性参数，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。数据回归系统能够通过输入易测性质(例如沸点)来估算缺少的物性参数，可估算活度系数模型中的二元参数。

1.5 ChemCAD 的安装与配置

ChemCAD 可运行于 Windows95/NT、WindowsXP、Windows2000 和 Windows Vista 等环境。

ChemCAD 的安装过程与 Windows 下的大多数应用软件的安装过程基本相同，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 1-3 所示的安装界面。

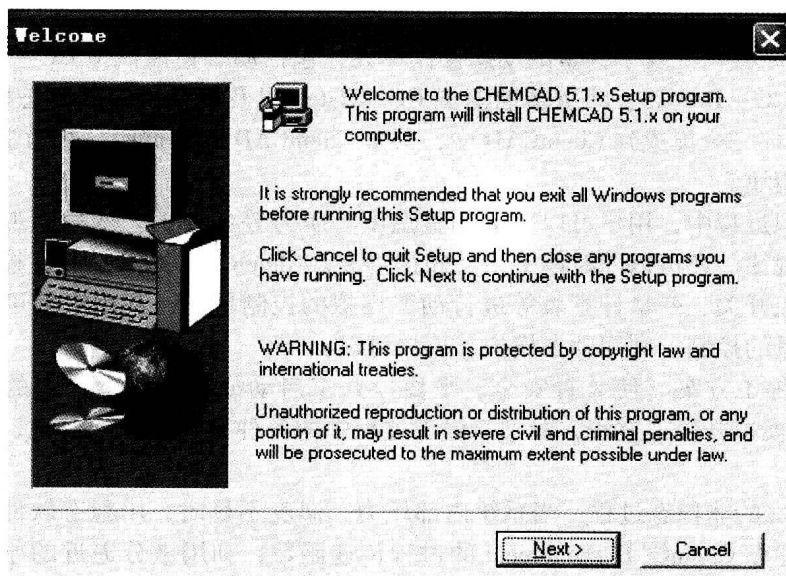


图 1-3 ChemCAD 的安装界面

单击 Next 进行下一步，屏幕上会出现 ChemCAD 的版权协定。如果同意此协定，单击 Next 进行下一步，屏幕上会出现选择安装类型的窗口。一般直接单击 Next，选择系统默认的“典型安装”。选择好安装类型后，单击 Next 进入下一步，屏幕上会出现选择 ChemCAD 程序文件安装路径的窗口，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

根据自己的意愿单击 Browse 改选自己所希望的安装路径。选择好程序文件的路径后，单击 Next 进入下一步，屏幕上会出现选择存放 ChemCAD 数据文件路径的窗口。用户同样可以使用其默认的路径，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。图 1-4 所示的为系统默认的存放数据文件的路径。

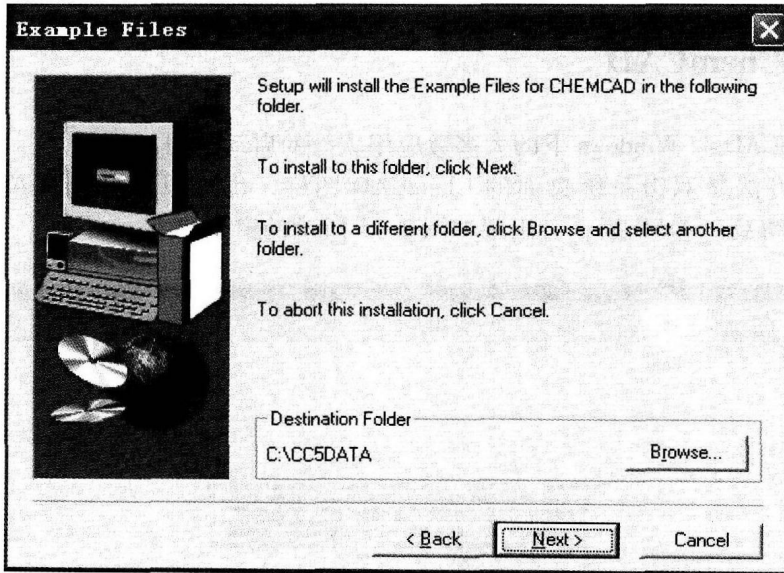


图 1-4 选择存放数据文件的路径

选择完路径后，单击 Next 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，直接单击 Next 进入下一步。

以上步骤完成之后，开始安装 ChemCAD，安装的界面如图 1-5 所示。

当安装过程结束之后，屏幕会显示安装成功的界面，表示用户已将 ChemCAD 装到计算机上了，单击 Finish 按键即完成安装。

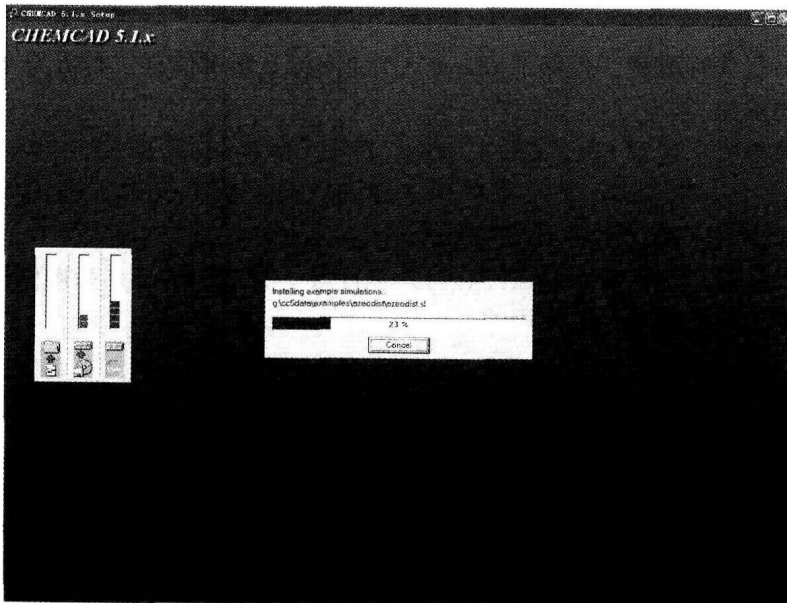


图 1-5 安装过程

第 2 章 ChemCAD 的基本操作

2.1 启动 ChemCAD

启动 ChemCAD 与 Windows 下的大多数应用程序的启动类似。

最常用的方法是双击系统桌面的 ChemCAD 图标，也可以在开始菜单的程序中选择 ChemCAD。启动 ChemCAD 后，会出现如图 2-1 所示的窗口。

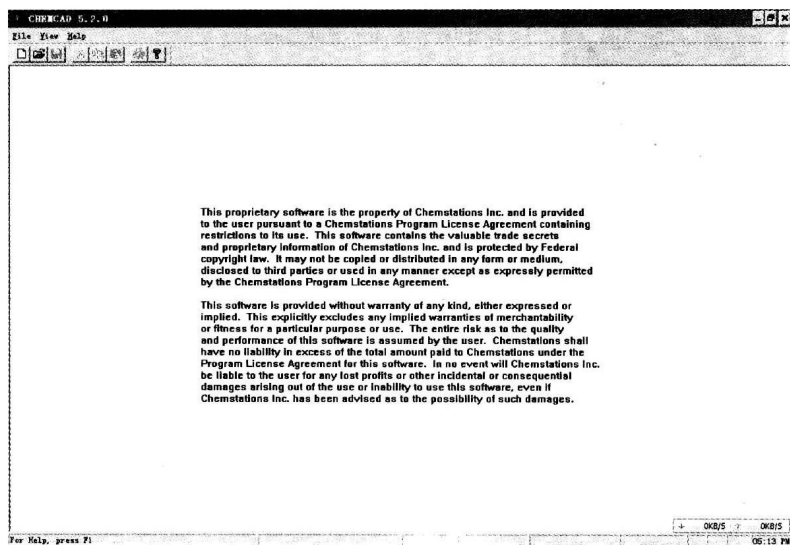


图 2-1 ChemCAD 的启动窗口。


最上面的一行为标题栏，包括了 ChemCAD 的图标及版本信息，右边为 Windows 的最小化、还原及关闭按钮。

第二行为菜单栏，包含 File(文件)、View(视图)和 Help(帮助)3 个顶层菜单，每一个菜单项都对应一个下拉菜单。File 菜单用于新建文件、打开文件、输出及打印等功能；View 菜单用于工具栏和状态栏的开启与关闭。

第三行为工具栏，包含建立新文件、打开文件等一些常用的工具和操作按钮。

启动窗口中的其他区域是不使用的。

2.2 ChemCAD 的主窗口

启动 ChemCAD 之后，单击菜单栏中的 File 菜单，选择 New Job，或者直接点击工具栏中的图标 ，就可以建立新的模拟文件，选择后会如图 2-2 所示的对话框提示用户为新的模拟输入文件名及保存路径，默认的路径为在安装时用户选择的数据文件的保存路径，用户也可以根据需要改变文件的保存路径。

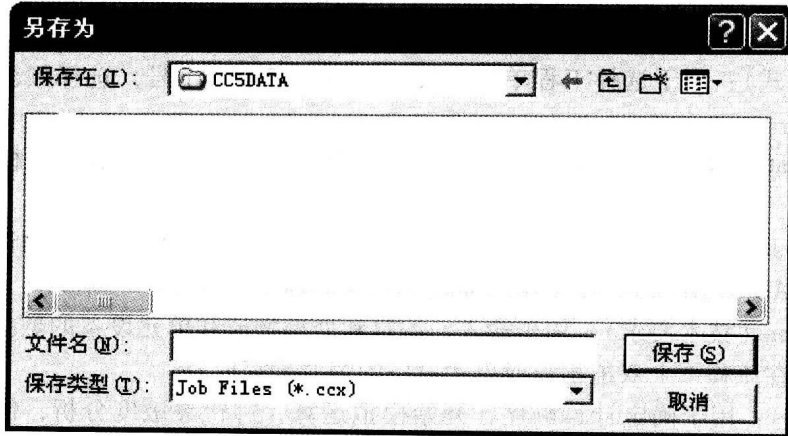


图 2-2 建立新的模拟文件

输入文件名之后，在图 2-2 上点击保存可进入模拟界面，即如图 2-3 所示的 ChemCAD 主窗口，使用该窗口可以建立、显示模拟的流程图，也可从主窗口打开其他窗口。主窗口和启动窗口一样，可以分为标题栏、菜单栏、工具栏、工作区和提示栏几个功能区。

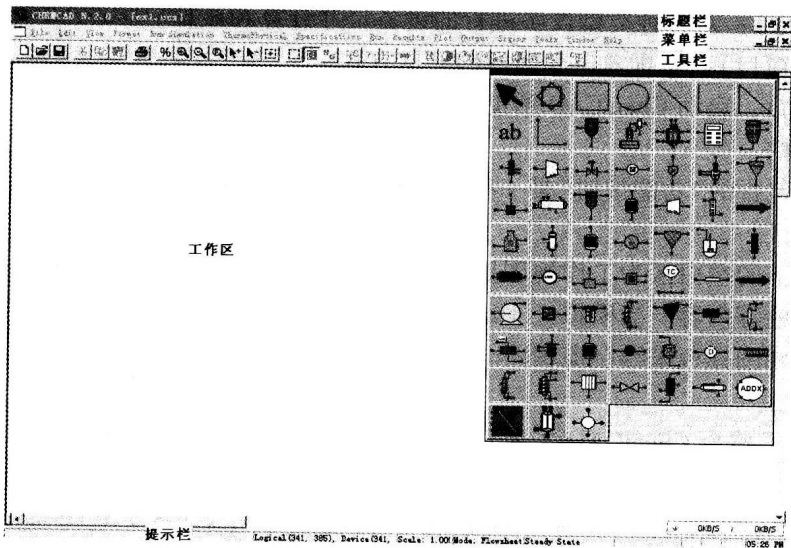


图 2-3 ChemCAD 工作的主窗口

以下将逐一介绍各个区的功能及用法。

(1) 标题栏

标题栏位于主窗口的最上面一行，包含了 ChemCAD 的标识、版本信息及当前工作的文件名，右侧为 Windows 的最小化、还原和关闭窗口按钮。

(2) 菜单栏

菜单栏包含 15 个顶层菜单，这些菜单的名称和基本功能如下。

File(文件)：用于打开、关闭文件、保存文件，以及文件输出控制。

Edit(编辑)：用于修改和处理流程图。编辑功能包括 Redraw(重画)、Undo(撤消)、