

化工流程模拟软件的应用进展

陈虹, 李敏, 王涛, 张婷

(四川理工学院材料与化学工程学院, 四川 自贡 643000)

摘要: 化工流程模拟软件在当今的化工领域倍受关注, 文章介绍了化工流程模拟软件的类型, 综述了近几年来化工流程模拟软件在工艺流程中的应用成果及发展情况。

关键词: 化工流程模拟软件; 工艺流程; 应用

中图分类号: TP18

文献标识码: A

引言

化工模拟系统又称工艺流程模拟系统, 指的是一种计算机辅助工艺设计软件, 这种软件接受有关化工流程的输入信息, 进行对过程开发、设计或操作有用的系统分析计算^[1]。它是化学工程、化工热力学、系统工程、计算方法以及计算机应用技术的结合产物, 是近几十年发展起来的一门新技术, 这一技术已成为化学工程设计、原有工程改造优化的强有力工具, 得到世界各国重视, 特别是在当今能源紧张、自然资源短缺和市场竞争激烈的背景下, 人们对化工流程模拟软件的进展、应用和发展趋势的关注更是与日俱增。应用化工流程模拟软件可以节省过去由试验(小试与中试)探索最佳工艺工况条件所消耗的大量资金、时间和人力, 该技术能够使我们从整个系统的角度来认识、分析和预测生产中深层次的问题, 进行装置调优、流程剖析和过程综合, 达到优化生产、节约资源、环境友好和提高经济效益的目的^[2]。

1 化工流程模拟软件的应用进展

化工流程模拟软件是 20 世纪 50 年代末期随着计算机在化工中的应用而逐步发展起来的^[1, 3]。目前, 国外主要的化工流程模拟软件有美国 SimSci-Esscor 公司的 PRO/II 美国 AspenTech 公司的 Aspen Plus 和 Hysys 英国 PSE 公司的 gPROMS 美国 Chemstations 公司 ChemCAD 和美国 WinSim Inc 公司的 Design II 加拿大 Virtual Materials Group 的 VMGSim。国内主要的化工流程模拟

软件主要有兰州石化设计院和大连理工大学合作开发的合成氨模拟程序、青岛化工学院开发的 ECSS 系统(国内唯一一套完整的通用流程模拟软件)及北京设计院的催化裂化反应—再生模拟软件 CCSO^[2, 4]。

1.1 ChemCAD 软件

ChemCAD 系列软件是美国 Chemstations 公司开发的化工流程模拟软件。它是用于对化学、石油工业、炼油和油气加工等领域中的工艺过程进行计算机模拟的应用软件, 是工程技术人员用来对连续操作单元进行物料平衡和能量平衡核算的有力工具^[5]。使用它可以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, 并通过运算模拟装置的稳态或动态运行, 为工艺开发、工程设计和优化操作提供理论指导^[6]。

齐向娟^[7]等利用 ChemCAD 软件模拟反应精馏制备乙酸丁酯过程。模拟过程中选用 NRTL 模型计算物系热力学性质, 选用化学平衡反应器模型 (EREA) 模拟化学反应过程, 同时选用校正法精馏塔模型 (SCDS) 模拟反应精馏过程。

梁艳青^[8]等应用 ChemCAD 软件中的 shortcut 精馏模型, 对年生产能力 0.55 万吨的甲醇—水物系精馏过程的模拟以及对精馏的一些参数进行调整, 确定合适的操作条件, 得出了模拟结果, 并讨论回流比, 进料含水量对塔板数、冷凝器和再沸器的影响。

E. Cséfalvay^[9]等利用 ChemCAD 软件对异丙醇渗透气化脱水过程进行模拟及建模, 得到最佳的工况参数并

用于工业化生产。

1.2 Aspen Plus 软件

Aspen Plus 化工模拟系统是美国麻省理工学院于 70 年代后期研制开发的大型化工模拟软件, 由美国 ASPEN 技术公司 80 年代初推向市场, 它用严格和最新的计算方法, 进行单元和全过程的计算, 为企业提供准确的单元操作模型; 还可以评价已有装置的优化操作或新建、改建装置的优化设计。由于其功能强大, 模拟准确, 使用方便等特点, 而广泛用于化工、炼油、石油化工、气体加工、煤炭、医药、冶金、环境保护、动力、节能和食品等工业领域^[10-11]。

Ana-Maria Comos^[12] 等采用 Aspen Plus 模拟了通过氨工艺生产纯碱的工艺过程, 找出最佳的工况参数。数学模型和模拟计算结果表明, Aspen Plus 对于分析和优化生产纯碱的工艺过程是可靠的工具。

刘继泉^[13] 等研究了以丁酸丁酯作萃取剂萃取醋酸丁酸纤维素生产中的淡酸, 得到含丁酸的萃取相, 借助反应精馏技术将萃取相与丁醇酯化生产出的丁酸丁用于循环。通过利用 Aspen Plus 软件对萃取和反应精馏过程进行模拟, 得到萃取剂丁酸丁酯与淡酸的质量比, 丁醇与淡酸中丁酸的摩尔比, 精馏塔塔板数最佳工艺条件。

陈茂兵^[14] 等运用流程模拟软件 Aspen Plus 模拟了氨法湿式脱硫工艺脱除燃煤烟气中的 SO_2 , 介绍了建立模型过程中模块的选取、物性方法的选择、工艺的物料恒算和热量恒算、工艺参数的输入及灵敏度分析等, 考察了吸收剂浓度、原烟气流量和液气比等工艺参数对脱硫效果的影响。

1.3 HYSYS 软件

HYSYS 是加拿大 AspenTech 公司推出的一个化工流程模拟仿真软件, 是一款环境模拟设计软件, 模拟过程分稳态模拟与动态模拟两类, 用于过程与设备模拟、分析、设计、优化及开停车指导、动态仿真培训和设计先进控制系统等, 广泛应用于石油化工、电解质、制药和气体处理等相关领域^[15-16]。

J Markoš^[17] 等设计了一种在气相条件下生产氯丙酮的反应器, 并采用 HYSYS 软件模拟了这个过程。模拟结果表明, 在使用 HYSYS 流程模拟软件模拟生产氯丙酮过程必须采用标准动力学表达式。

李国^[18] 等对吸收稳定系统工艺流程进行了改进, 提出了膜分离与吸收稳定系统耦合的 3 种新工艺——吸收塔前串联膜分离器、吸收塔后串联膜分离器和再吸收塔后串联膜分离器。并用 HYSYS 流程模拟软件对新工艺进行了模拟计算, 通过模拟计算结果综合考虑各方案

的冷热负荷、塔负荷和经济效益, 吸收塔前串联膜分离器是脱除乙苯原料气中丙烯的最佳方案。

Dai Yuqiang^[19] 等利用 HYSYS 流程模拟软件对应用于多相流的板式换热器进行了评估和优化, 通过这种软件的使用很大程度上降低了每个过程对时间的需求。

1.4 gPROMS 软件

gPROMS V 3.0^[20] 是帝国理工学院 (Imperial College London) PSE (Process System Enterpris Ltd) 研究中心 2006 年推出的化工模拟软件, 它的特点是可以建造任何反应过程、分离过程和多个过程的组合, 特别适用于任何新的工艺过程的研究开发及动态过程的建模。已广泛用于化学工业、石油化工、石油和天然气加工、造纸、精细化工、食品工业和制药及生物制品技术等加工行业。

李士雨^[21] 等以 L-亮氨酸发酵过程中菌种、基质和产物关系的动力学模型为基础, 应用 gPROMS 软件, 采用增广 Lagrange 乘法对该发酵过程进行模拟优化, 提出了使用 TQ9806 菌株进行发酵的优化实验方案, 大幅提高了实验效率。

武秀丽^[22] 等建立了邻二甲苯氧化生产苯酐过程的二维拟均相动力学模型, 利用 gPROMS 软件, 轴向采用中心差分法、径向采用有限元正交法进行模型求解, 通过对比验证了模型的准确性。并以邻二甲苯转化率最大为目标函数, 以进料温度、熔盐温度为控制变量, 利用 gPROMS 优化反应过程, 得到优化的控制条件。

吴媛媛^[23] 等对乙烯生产过程的脱丁烷和脱丙烷塔组成的联塔系统进行了分析和研究, 通过调用大规模 DAE 求解算法, 在模拟软件 gPROMS 平台下完成整个乙烯流程系统动态模型的搭建和动态模拟的计算。

1.5 PRO/II 软件

PRO/II 软件是美国模拟科学公司 (SimSci) 开发的大型工艺流程模拟通用软件, 主要用于新建装置设计、老装置的调优操作和技术改造等。该软件具有数据库较齐全、适用能力强和界面友好等优点, 它可以用于流程的稳态模拟、物性计算、设备设计、费用估算、经济评价和环保评测以及其它计算。现已可以模拟整个生产厂从包括管道、阀门到复杂的反应与分离过程在内的几乎所有装置和流程, 广泛用于油气加工、炼油、化学、化工、聚合物和精细化工、制药等行业。

孙浩^[24] 等采用 PRO/II 模拟软件, 对聚氯乙烯生产中的二氯乙烷精制过程中脱水塔的相平衡数据进行了模拟比较, 确定采用 SRKM 方程较优。对脱水精馏塔进行模拟计算, 模拟结果与工厂数据吻合较好, 从而为脱水塔乃至整个二氯乙烷工段的操作优化和工艺改进提

供依据。

龙敢飞^[25]等通过一些工程实例介绍了化工流程模拟软件 PRO/II在蒸馏与反应流程中的应用。建立了流程模型,用不同的热力学方法进行运算分析,并对流程作了工艺优化分析,为工艺控制提供理论依据。

韩雪^[26]利用 PRO/II流程模拟软件中换热器和管道压降模块组合,将传热计算与压力平衡计算有机结合在一起,开发出天然气处理装置重沸器压力平衡计算的实用方法,大大简化了重沸器在以往设计中复杂繁琐的计算过程,提高了设计的准确性,对于设备的正常运转、优化工艺流程起到了至关重要的作用。

1.6 其他软件

美国 WinSim Inc 公司的 Design II 加拿大 Virtual Materials Group 公司的 VMGSim 及国内开发的合成氨模拟程序、ECSS和 CCSO 相对还不是很完善,目前没有被广泛应用。

2 结束语

近年来,化工流程模拟软件因其性能上独特的优越性而得到了迅速发展,模拟技术已经成为石油化学工业节能降耗、内涵发展的最为重要的技术。但是,我国还应加大其开发力度,完善其商品化程度,打破国外产品在流程模拟技术和市场应用上的垄断局面,以便维持我国化工信息技术的健康发展。

参考文献:

- [1] 胥家瑞. 化工模拟系统 [J]. 天津化工, 2002, 17(4): 42-43
- [2] 杨光辉. 化工流程模拟技术及应用 [J]. 山东化工, 2008, 37(8): 35-38
- [3] Rodrigues A E, Mineeva M. Modeling and simulation in chemical engineering Tools for process innovation [J]. Computers and Chemical Engineering, 2005, 29(6): 1167-1183
- [4] 李文波, 毛鹏生, 王长英, 等. 化工流程模拟技术的现状与发展 [J]. 化工时刊, 1998, 12(6): 3-6
- [5] 罗辉. 化工流程模拟软件 Chemcad 的应用 [J]. 浙江化工, 2005, 36(10): 40-41
- [6] 梁屹珉. ChemCAD 软件中的模拟反应模块的使用 [J]. 广东化工, 2008, 35(6): 66-68
- [7] 齐向娟, 李士雨. 采用 ChemCAD 模拟乙酸酯催化反应精馏过程 [J]. 化工设计, 2005, 15(6): 8-10
- [8] 梁艳青, 战君, 葛颖新, 等. 应用 CHEMCAD 软件模拟甲醇-水物系精馏过程 [J]. 辽宁化工, 2007, 36(5): 347-352
- [9] Cséfalvay E, Szitkai Z, Mizsey P, et al Experimental data

based modelling and simulation of isopropanol dehydration by pervaporation [J]. Desalination, 2008(229): 94-108

- [10] 谢扬, 沈庆扬. ASPEN PLUS 化工模拟系统在精馏过程中的应用 [J]. 化工生产与技术, 1996, 6(3): 17-22
- [11] 孙巍, 李琳, 陈晓春. ASPEN Plus 在工业精馏塔故障诊断与参数寻优中的应用 [J]. 化工进展, 2005, 24(8): 935-937.
- [12] Ana Maria Comos, Calin-Cristian Comos, Pauls Agachi. Making soda ash manufacture more sustainable. A modeling study using ASPEN Plus [J]. 17th European Symposium on Computer Aided Process Engineering, 2007, 551-556
- [13] 刘继泉, 宋磊. 醋酸-醋酸纤维素生产中淡酸的处理 [J]. 青岛科技大学学报: 自然科学版, 2009, 30(3): 238-240
- [14] 陈茂兵, 孙克勤. ASPEN PLUS 软件在氨法烟气脱硫模拟中的应用 [J]. 电力环境保护, 2009, 25(4): 30-32
- [15] 郭峰. HYSYS 软件在酸性天然气净化中的应用 [J]. 石油规划设计, 2006, 17(6): 45-46
- [16] 贺雷. HYSYS 过程模拟软件在空分设备操作中的应用 [J]. 深冷技术, 2005, 6(6): 42-44
- [17] J Marko M. Jekemsky. Design and simulation of a reactor for the chlorination of acetone in gaseous phase [J]. Chemical Engineering Science, 2001, 5(6): 627-632
- [18] 李国, 贺高红, 李祥村, 等. 膜分离与吸收稳定系统耦合脱除乙苯原料气中的丙烯 [J]. 石油化工, 2007, 36(12): 1255-1260
- [19] Dai Yuqiang, Liu Wenwei, Wang Shaomin, et al. HYSYS Automation and Its Application on Evaluation of Plate Heat Exchanger [J]. Scientific Research, 2008, 12(3): 55-59
- [20] 李士雨, 武秀丽, 齐向娟. gPROMS 实验设计功能的应用研究 [J]. 实验技术与管理, 2007, 24(12): 78-81
- [21] 李士雨, 徐猛. L-亮氨酸发酵过程的模拟优化 [J]. 化学与生物工程, 2006, 23(8): 37-39
- [22] 武秀丽, 徐猛. 邻二甲苯氧化生产苯酐过程的模拟与优化 [J]. 科学技术与工程, 2007, 7(B): 3176-3179
- [23] 吴媛媛, 陈曦, 邵之江. 乙烯分离流程联塔系统的大规模联立动态模拟 [J]. 过程控制, 2007, 34(4): 22-25
- [24] 孙浩, 齐鸣斋, 房鼎业. 二氯乙烷生产流程中脱水塔的模拟 [J]. 上海化工, 2006, 31(1): 23-25
- [25] 龙敢飞, 刘吉普, 李欣荣. 化工流程模拟在蒸馏与反应流程中的应用 [J]. 化工装备技术, 2007, 8(4): 27-29
- [26] 韩雪. 利用 PRO/II 流程模拟软件进行重沸器压力平衡计算 [J]. 油气田地面工程, 2008, 27(8): 35-43

(下转第 585 页)

3 结束语

通过验证, 减量法、锌盐返滴定法和铜盐返滴定法三种方法测定结果一致, 可以互换。铜盐返滴定法 ED-TA 标准滴定溶液的加入量对未知样而言较繁琐, 而锌盐返滴定法操作较方便, 对设备不能满足用减量法测定氧化铝含量的实验室, 我们推荐用锌盐返滴定法测定, 同时建议下次标准修订时, 把锌盐返滴定法作为备选试验方法。

参考文献:

- [1] GB/T 4294-1997, 氢氧化铝 [S].
- [2] GB/T 15892-2009, 生活饮用水用聚氯化铝 [S].
- [3] HG 3746-2004, 水处理剂用铝酸钙 [S].
- [4] 张家驹. 工业分析 [M]. 北京: 化学工业出版社, 1985.
- [5] 张绍周, 辛志军, 倪竹君, 等. 水泥分析化学 [M]. 北京: 化学工业出版社, 2007.

Comparison Between the Three Methods of Determining for the Amount of Aluminum Oxide in Aluminum Hydroxide

ZENG Li, HUANG Dingfang, GUXing, TONG Ling

(Sichuan Center for Quality Supervision and Test of Salt Chemical Industry Products, Zigong 643000, China)

Abstract This paper is about the comparative experiment between the methods of zinc salt back titration and copper salt back titration adopted to determine the amount of aluminum oxide in aluminum hydroxide and that of the national standard about the "aluminum hydroxide". At the same time, the paper introduces respectively the basic principles, the test steps, the test process and the points for attention in this experiment of the back titration methods of zinc salt and copper salt. Finally, a recovery test has been carried out and the experiment result shows that these three methods can be exchanged for one another.

Key words aluminum oxide; method; comparison

(上接第 582 页)

Application Progress of Chemical Process Simulation Software

CHEN Hong, LIM in, WANG Tao, ZHANG Ting

(School of Material and Chemical Engineering, Sichuan University of Science & Engineering, Zigong 643000, China)

Abstract Now chemical process simulation software is given much attention in chemical industry. In this paper, kinds of chemical process simulation softwares were introduced. The application results and the development situation of chemical process simulation software on process in these years are summarized.

Key words chemical process simulation software; process flow; application