化学工学プロセスシミュレータ

# CHEMCAD SUITE

*Engineering advanced*

i-EMORI Chemstations™

# CHEMCADで何ができるのか？

CHEMCAD（ケムキャド）は、プロセスを化学工学に基づいてシミュレーションするソフトウェアであり、プロセス設計で利用される他、装置のサイジングやレーティング、運転制御の最適化による原料やユーティリティの効率化、製造コスト削減を支援します。

- **定常的な化学工学計算による生産性の向上**
- **新しいプロセスや装置の効果的な設計による収益性の改善**
- **ラボやパイロットプラント試験にかかる時間短縮と経費節減**
- **既存のプロセスや装置の最適化／脱ボトルネックによる経費と設備投資費の削減**
- **新規または既存プロセスの環境影響評価**
- **物性データベース確立による企業競争力の強化**

## 主な利用目的

- 研究開発
- 教育
- プロジェクト／プロセス 設計
- プロジェクト／プロセス 再設計及び最適化
- 運転／メンテナンス
- 安全および危険の解析
- 環境の研究および解析
- プロジェクトおよびプロダクト販売

## 業 界

- 製造、調査
- カスタムツール製作
- 精製
- エンジニアリング、建設
- ケミカル商品
- コンサルタント
- ファインケミカル、特殊ケミカル
- プロセス装置製作
- 製薬
- 大学

## 操作の流れ

- 単位操作パレットを用いてフローシートを作成
- 化学成分をリストから選択（ユーザー追加可）
- 熱力学モデルを選択
- フィード（原料）を入力
- 単位操作仕様を指定
- シミュレーションを実行
- （必要に応じて）結果の解析、最適化
- グラフやレポート、PFD や仕様書の作成

フローシート作成と化学成分の選択

グラフィカルレポート

# 特 長

## 分かりやすいユーザーインターフェース

●ユーザーのニーズに合わせて
　デザインされたユーザーインターフェース
●メニュー、ダイアログは完全日本語化
●インタラクティブ(対話式)操作
●すべてのプログラムでインターフェースを統合

## 優れた拡張性

●単位操作のカスタマイズ
　(COM、OLE、ViBA、OPC 統合、CAPE-OPENに準拠)
●ユーザー定義成分の追加、
　分子団寄与法による物性推算機能
●強力なデータ回帰機能
　(物性、平衡、電解質、反応速度データ)
●ストリーム＆単位操作設定を
　テンプレートとして登録し利用
●Microsoft Office アプリケーション等との連携
●レポート、PFD フォーマットのカスタマイズ

## 強力なデータベースと様々な熱力学モデル

●豊富な物性データ
●最新の熱力学(気液平衡、エンタルピー)計算モデルを採用
●外部データベースとのリンクが可能
●複数ユーザーによるデータベース共有を実現

## 多彩なレポート

●多様な相図の描画
●フローシート、単位操作、ストリームの豊富なレポート機能
●複合曲線、プロファイルを示す単位操作グラフ
●簡単な総合レポートの作成
●ダイナミックシミュレーションと
　連動するリアルタイムプロット

## 高度な最適化エンジン

●複数の変数や数式入力による目的関数の定義も可能
●複数の CPU による並列処理で高速化を実現
●分かりやすい最適化結果グラフ

# Process Simulations Solusions

CHEMCAD SUITE は用途に応じた複数のプログラムから構成されており、各プログラムをスタンドアロンとしても、基本ソフトであるCC-STEADY STATE（定常状態プロセスシミュレータ）のアドオンプログラムとしても導入できます。
各プログラムのインターフェースは完全に統合されており、ソフトウェア間の移行（定常状態からダイナミックプロセス解析へ等）を、シームレスに行うことができます。

定常状態プロセスシミュレータ
## CC-STEADY STATE

多数の化学成分データベース、熱力学モデル、単位操作モデルを保有しており、ラボスケールからプラントまで化学工学プロセスの定常状態シミュレーションを実行できます。

**主な用途**
- 蒸留
- 気体洗浄、吸収、脱着
- 化学反応（速度論モデル、平衡反応モデル）
- リサイクルプロセス、熱交換ネットワーク
- 配管ネットワーク　相変化、圧力損失計算
- 固体ハンドリング
- 電解質反応

**主な特長**
- 使いやすいインターフェース
- 優れた収束性
- 単位操作、塔トレイごとに異なる熱力学モデルを適用可能
- シナリオ感度分析（ケーススタディ機能）
- 最適化計算（目的変数最大、最小化）
- Excel との連動（Excel Data map）
- 豊富な単位操作（50 種以上）
- 装置サイジング／レーティング
- フローシートサイズ　無制限

ダイナミックプロセスシミュレータ
## CC-DYNAMICS

定常状態シミュレーションを実行したフローシートを次のレベルであるダイナミック（非定常状態）シミュレーションに移行できます。実現性の確認、制御パラメータのチューニング、オペレータトレーニングシステム、オンラインプロセスコントロールやソフトウェアセンサー機能など、利用の可能性は無限です。

**主な用途**
- 装置のキャリブレーション
- オペレータトレーニングシステム
- ソフトウェアセンサー
- オンライン制御／最適化
- トラブルシュートのスピードアップ
- 制御パラメータのチューニング

**主な特長**
- 定常状態シミュレーションからのスムーズな移行（同一インターフェース）
- 計算中リアルタイムにデータを表示（時系列データ表示）
- データ調整システムで測定データの精度を向上（データリコンシリエーション）
- プラント全体のユーティリティバランスを検証
- スタートアップ、シャットダウン時の運転最適化シミュレーション
- オンライン DCS とのリンク
- 反応速度パラメータの回帰機能

バッチ蒸留プロセスシミュレータ
## CC-BATCH

バッチ蒸留プロセスの解析に特化したソフトウェアで、非定常計算が可能です。CC-STEADY STATE のアドオンモジュールとしてだけでなく、スタンドアロンプログラムとして導入することができます。ステップごとの操作パラメータを直感的に指定でき、バッチ蒸留シミュレーションの解析と最適化を簡単に実行できます。

**主な用途と特長**
- バッチ蒸留シミュレーション
- 計算中の結果をリアルタイムで出力
- 操作ステップごとのパラメータの検討
- バッチ蒸留オペレーションの最適化

配管ネットワークシミュレータ
## CC-SAFETY NET

CC-STEADY STATE、DYNAMICS の配管ネットワーク解析の機能を特化させたもので、ポンプ、コンプレッサー、タービン、バルブを含む複雑な配管ネットワークの厳密な解析ができます。最新の二相リリーフデバイス計算、厳密な圧力損失計算、厳密な物性計算、厳密な相平衡計算を組み合わせ、迅速な解析を提供します。

**主な用途と特長**
- プラント全体の厳密な圧力損失計算
- リリーフデバイス安全解析とフレアネットワーク解析
- 緊急救援システムの設計（DIERS）
- 厳密なストリーム物性
- 相平衡計算
- 装置サイジング
- ネットワーク内の物質
- エネルギー収支計算

熱交換器　設計・解析ソフトウェア
## CC-THERM

熱交換器の解析評価、設計、機器の設計に基づく厳密なシミュレーションを実施するためのソフトウェアです。熱交換器のサイジングをより速く、正確に実施するために、デザインと材質に関する国際的な規格を採用しています。このプログラムは多管式（シェル＆チューブ）、プレート式、二重管式、空冷式などの熱交換器を扱い、CHEMCAD の物性データ、相平衡データを基盤にして厳密な解析ができます。

**主な用途と特長**
- 熱交換器のデザイン（設計）
- 熱交換器のレーティング（評価）
- フローシート上での厳密な熱交換器ネットワーク
- 熱交換器　詳細レポート出力
- TEMA データシート出力

物理特性、相平衡計算ソフトウェア
## CC-FLASH

CHEMCAD に内臓されている豊富な物性データベースを基に、純物質または混合物の物性計算や相平衡計算を実行できます。全ての CHEMCAD SUITE 製品は CC-FLASH の機能を含んでいます。

**主な用途と特長**
- 気液平衡計算（VLE）、液液平衡計算（LLE）、固液平衡計算（SLE）、電解質平衡計算
- 約2600成分（純物質）以上の成分データベース
- 混合物の相平衡、露点、沸点、二相状態、液体界面の計算
- ユーザー定義成分をデータベースに追加可能

CHEMCAD SUITE の様々なソフトウェアにより、装置サイジングを含むプロセスの基礎設計からコントロールシステムの検討まで、プラントライフサイクル全般に渡って化学工学の理論に基づいたシミュレーションを活用することができるようになります。

Chemstations™

開発元である Chemstations 社は、1988 年より CHEMCAD の営業を開始して以来、常に化学工学の技術進展に積極的に取り組んでおり、その技術をいち早くソフトウェアに反映させています。幅広い知識と経験を持つ技術スタッフによる開発とサポートにより、導入実績は世界で1200 社以上にのぼり、現在も順調にその数は増えています。

## 動作環境

| | |
|---|---|
| [プロセッサ速度] | 1 GHz 以上(32 bit／64 bit) |
| [OS] | Windows 7 以上(32 bit／64 bit) |
| [RAM] | 1 GB 以上(32 bit)／2 GB 以上(64 bit) |
| [ハードディスク容量] | 16 GB(32 bit)／20 GB(64 bit)(推奨空き容量:1 GB) |
| [その他] | 一部の機能で Microsoft Office® 製品が必要となります |


国内総代理店

i-EMORI 株式会社 江守情報

**お問い合わせ先(東京支店)**
〒112-0004　東京都文京区後楽1-4-14　後楽森ビル16階
TEL:03-6801-5910　FAX:03-3812-1501
E-mail:cc-info@i-emori.co.jp
Website:http//www.i-emori.co.jp/chemcad

## 主要なシミュレーションの機能

### ●シミュレーションエンジン
・感度分析（ケーススタディ）
・最適化（任意変数の最大化 / 最小化）
・データリコンシリエーション

### ●蒸留塔（分離塔）の取り扱い
・簡易計算（成分の比揮発度のみを考慮）
・厳密な留計算（理論段モデルと物質移動モデル）
・複合塔の配置
・フレキシブルな仕様
・アルゴリズム（同時補正法および厳密インサイドアウト）
・反応蒸留（反応の指定は反応器の機能に準拠）
・成分の拡散率を自動計算（物質移動モデル）
・物質移動係数のユーザーモデル
・周辺への熱損失の計算
・塔サイジング
　トレイ：□シーブ □バブルキャップ □バルブ
　充填物：□規則 □不規則
・バッチ蒸留操作ステップの指定（CC-BATCH）
・開始状態（ドライ / ウェット）とホールドアップの指定（CC-DYNAMICS）
・還流コントロールの指定（CC-DYNAMICS）

### ●反応器の取り扱い
・化学量論反応
・平衡反応
・ギブス自由エネルギー最小化
・反応速度論（Arrenius、Langmuir-Hinshelwood、ユーザーモデル）
・ジャケット / コイルの指定（CC-DYNAMICS）
・反応速度の回帰（CC-DYNAMICS）
・バッチ / セミバッチ / 連続操作の指定（CC-DYNAMICS）

### ●ダイナミックシミュレーションの機能（CC-DYNAMICS）
・ダイナミック条件の指定
　□プロセスパラメータの変動 □制御ループの組み込み □確率的外乱
・単位操作ホールドアップを考慮
・時系列データのグラフ表示
・OTS リアルタイムスケールの指定

### ●ダイナミックシミュレーションの単位操作（CC-DYNAMICS）
・PID コントローラ：□PID 制御 □カスケード制御 □スプリットレンジ制御
・ランプ：□フローシート変数の時間 / 値の表 □確率的攪乱要因 □サイン曲線
・バッチ反応器：□反応器の指定 □DIERS
・ダイナミックベッセル：□容器の指定 □DIERS

### ●配管網シミュレーションの機能（CC-SAFETY NET）
・ノード（圧力節点）を参照する厳密な流量計算
・配管網の単位操作のサイジング計算

### ●配管網シミュレーションの単位操作（CC-SAFETY NET）
・ノード：圧力バランス計算の節点
・パイプ：□継手の指定 □パイプスケジュールの指定 □ユーザー定義の継手
・ポンプ：□特性関数の指定 □性能曲線の指定
・コンプレッサ / エキスパンダ：性能曲線の指定
・コントロールバルブ：□イコールパーセント弁 □リニア弁 □ユーザー定義のバルブ特性

### ●配管の流量計算（CC-SAFTY NET）
・ダルシー・ワイズバッハ式
・ベーカー式
・Beggs and Brill 式
・等温流の式
・ヘーゼン・ウィリアムズ式
・Fritzsche 式
・スチームシステムでの圧力損失式
・クリティカルフロー（臨界流）を感知、レポート

### ●熱交換器のゾーン分割による厳密なサイジング / 評価ならびに汚れ係数の評価（CC-THERM）
・対応している熱交換器
　□多管式 □空冷式 □プレート式 □二重管式
・考慮できる規格
　□TEMA □ASME □DIN □BS
・考慮できる流れの動態
　□相変化を伴わない流れ（蒸気 / 液体）□強制蒸発 □流下膜蒸発 □縦型 / 横型サーモサイフォン □水平凝縮 □垂直凝縮 □還流凝縮
・乾き壁（ドライウォール）または湿り壁（ウェットウォール）凝縮
・気液で別々の流出ストリームとした蒸発装置の計算
・蒸留塔単位操作の結果を参照しコンデンサー / リボイラーを計算

Chemstations™ 国内総代理店


株式会社 江守情報
i-EMORI

お問い合わせ先（東京支店）
〒112-0004　東京都文京区後楽 1-4-14　後楽森ビル 16 階
TEL：03-6801-5910　FAX：03-3812-1501
E-mail：cc-info@i-emori.co.jp
Website：http//www.i-emori.co.jp/chemcad/


# CHEMCAD 技術データ

## データベース

### ●純成分の物性
・DIPPR データベースを採用（約 2600 成分）
・多数の物性推算機能を搭載
　□沸点から疑似炭化水素を予測 □UNIFAC 法 □ Joback 法 □燃焼固体 □電解質
・シンプルな指定から複雑な指定まで多彩な検索機能を実装
・追加 / 編集が可能であり、温度依存物性の回帰機能を保有

### ●成分ペアの相互作用パラメータ
・DECHEMA のデータを採用（約 2100 データ）
・推算モデル
　□UNIFAC VLE □UNIFAC LLE □修正 UNIFAC
・多様な実測 / 文献データからの回帰に対応できるよう複数の回帰オプションを搭載

### ●電解質のパラメータ
・NBS Tables of Thermodynamics Data のデータを採用(約120データ)
・回帰
　□BIP □ヘンリー定数 □電解質反応平衡定数の回帰が可能

### ●その他シミュレーション用のデータ
・水性ガスシフト反応、メタン化反応の化学平衡データ
・コスト計算のためのデータおよびコストインデックス（McGraw-Hill 刊行の「CHEMICAL ENGINEERING」2020 年 5 月）
・物質移動計算で使用される充填物データ
・配管材質のデータ
　□粗度 □継手類の相当長 □スケジュール番号
・熱交換器の材質データ
　□管 □胴 □ボンネット □管板 □プレート
・伝熱計算のための装置データ
　□フィンチューブ（多管式、二重管式）□撹拌機 □ファン（空冷式）□反応器形状

## 熱力学モデル

### ●K 値モデル
・状態方程式
　□Soave-Redlich-Kwong(SRK) □Grayson-Streed修正 Chao-Seader(GS) □Peng-Robinson(PR) □Benedict-Webb-Rubin-Starling(BWRS) □API Soave-Redlich-Kwong(API-SRK) □修正 Soave-Redlich-Kwong(MSRK) □Extended Soave-Redlich-Kwong(TSRK) □Predictive Soave-Redlich-Kwong(PSRK) □ Volume Translated Peng-Robinson(VTPR) □Elliott Suresh Donohoe(ESD) □Statistical Associating Fluid Theory(SAFT) □Peng-Robinson-Stryjek-Vara(PRSV)
　オプション：□水の炭化水素への溶解度 □Boston-Mathias のα関数（SRK、PR）□エタン / エチレンおよびプロパン / プロピレンの特殊な相互作用(SRK、PR)
・活量係数法
　□NRTL □UNIQUAC □Wilson □UNIQUAC/UNIFAC □UNIFAC VLE □UNIFAC LLE □修正 UNIFAC(Dortmund) □ポリマー用 UNIFAC □T.K.Wilson □HRNM修正 Wilson □Van Laar □Margules □GMAC(Chien-Null) □正則溶液モデル(Scatchard-Hildebrand)
　オプション：□気相フガシティーの補正 □塩効果（Wilson 式のみ）□ヘンリー則の適用 □気相会合(Marek&Standart、Hayden O' connell)
・経験式
　□ESSO（Maxwell-Bonnell 蒸気圧式）□蒸気圧（理想溶液）□ヘンリー則（水に対する気体の溶解）
・特殊な系
　□アミン（気液平衡および液液平衡）□サワーウォーター □トリエチレングリコールによる脱水 □Flory-Huggins 法 □電解質（Pitzer 式、MNRTL）
・ユーザー追加モデル
　□活量係数の温度関数モデル □C++ によるカスタム K 値モデル □K 値表 □分圧 K 値（HCl / 水と$NH_3$ / 水を内蔵）□温度依存多項式 K 値モデル □ユーザー指定 SRK

### ●エンタルピー
・状態方程式
　□Redlich-Kwong □Soave-Redlich-Kwong □Peng-Robinson □ Volume Translated Peng-Robinson □API Soave-Redlich-Kwong □Lee-Kesler □Benedict-Webb-Rubin-Starling □Peng-Robinson-Stryjek-Vara
・化学系
　□潜熱 □電解質エンタルピー
・特殊な系
　□潜熱と SRK 式の混合モデル □アミン
・蒸気表（IAPWS-IF97）
　スチーム / 水のエンタルピーとエントロピーは蒸気表を参照して計算（オプション：高圧での補正）
・ユーザー追加モデル
　□エンタルピー表 □温度依存多項式エンタルピーモデル
　オプション：□溶解熱ファイルの使用(分圧K値法とのセット)
　□活量係数による液エンタルピーの補正

## CHEMCAD モジュール別の機能

| | CC-STEADY STATE | CC-DYNAMICS | CC-BATCH | CC-THERM | CC-SAFETY NET | CC-FLASH |
|---|---|---|---|---|---|---|
| VB/COM/OPC/Excel データマップ | ○ | ○ | | | | |
| 感度分析(ケーススタディ)/最適化(目的変数の最大化/最小化) | ○ | ○ | | | ○ | |
| 定常状態シミュレーション | ○ | | ○ | ○ | ○ | ○ |
| ダイナミックシミュレーション | | ○ | | | ○ | |
| リサイクル計算 | ○ | ○ | | | ○ | |
| コスト計算 | ○ | ○ | | | ○ | |
| データリコンシリエーション(フローシートに時系列データを適用) | ○ | ○ | | | | |
| 塔サイジング トレイ(シーブ、バブルキャップ、バルブ) 充填物(不規則、規則) | ○ | ○ | ○ | | | |
| 機器サイジング(パイプ/バルブ/オリフィス/ベッセル/安全装置) | ○ | ○ | | | ○ | |
| 熱交換器サイジング | | | | ○ | | |
| 経済性評価 | ○ | ○ | | | | |
| レポート(Excel 含む) | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ |
| DIERS 計算 | ○ | ○ | | | ○ | |
| $CO_2$ 固体予測 | ○ | ○ | | | ○ | ○ |
| 水和物予測 | ○ | ○ | | | ○ | ○ |
| 減圧容器の計算 | ○ | ○ | | | ○ | ○ |
| TOC/COD 計算 | ○ | ○ | | | ○ | ○ |
| 純成分物性の回帰 | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ |
| BIP 回帰 | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ |
| 電解質物性の回帰 | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ |
| 反応速度回帰 | ○ | ○ | | | | |
| 単位換算 | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ |
| パーサー実行 | ○ | ○ | | | | |
| 環境レポート | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ |
| カルキュレイター | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ |
| スペックシート(仕様書) | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | |

## CHEMCAD モジュール別の単位操作

CHEMCAD で使用できる単位操作は、モジュールによって異なります。

| | CC-STEADY STATE | CC-DYNAMICS | CC-BATCH | CC-THERM | CC-SAFETY NET | CC-FLASH |
|---|---|---|---|---|---|---|
| バグフィルター | ○ | ○ | | | | |
| バッチ蒸留塔 | | | ○ | | | |
| ダイナミック反応器 | | ○ | | | | |
| カルキュレイター | ○ | ○ | | | | |
| 遠心濾過機 | ○ | ○ | | | | |
| 成分分離器 | ○ | ○ | | | | |
| コンプレッサ | ○ | ○ | | | ○ | |
| コントロールバルブ(制御弁) | ○ | ○ | | | ○ | |
| コントローラ | ○ | ○ | | | ○ | |
| 粉砕機/破砕機 | ○ | ○ | | | | |
| 晶析装置 | ○ | ○ | | | | |
| サイクロン | ○ | ○ | | | | |
| 分流器 | ○ | ○ | | | ○ | ○ |
| 電気集塵機 | ○ | ○ | | | | |
| 平衡反応器 | ○ | ○ | | | | |
| Excel 単位操作 | ○ | ○ | | | | |
| エキスパンダ | ○ | ○ | | | ○ | |
| 加熱炉 | ○ | ○ | | | | |
| フラッシュ分離器 | ○ | ○ | | | ○ | ○ |
| ギブス反応器 | ○ | ○ | | | | |
| 熱交換器 | ○ | ○ | | ○ | ○ | |
| ハイドロサイクロン | ○ | ○ | | | | |
| 速度論反応器 | ○ | ○ | | | | |
| 液液抽出器 | ○ | ○ | | | | |
| LNGH 熱交換器(多流熱交換器) | ○ | ○ | | | | |
| ループ | ○ | ○ | | | | |
| 膜分離 | ○ | ○ | | | | |
| ミキサー(混合器) | ○ | ○ | | | ○ | ○ |
| ノード | ○ | ○ | | | ○ | |
| PID コントローラ | ○ | ○ | | | ○ | |
| パイプ(配管) | ○ | ○ | | | ○ | |
| ポンプ | ○ | ○ | | | ○ | |
| ランプコントローラ | ○ | ○ | | | ○ | |
| 安全装置(リリーフバルブ) | ○ | ○ | | | | |
| META(サブフローシート) | ○ | ○ | | | | |
| SCDS 塔 | ○ | ○ | | | | |
| スクリーン | ○ | ○ | | | | |
| 遠心沈降機 | ○ | ○ | | | | |
| ショートカット塔 | ○ | ○ | | | | |
| 固体乾燥機 | ○ | ○ | | | | |
| 固体洗浄機 | ○ | ○ | | | | |
| 化学量論反応器 | ○ | ○ | | | | |
| ストリーム参照 | ○ | ○ | | | | |
| タンク(バッチアキュムレータ) | | | ○ | | | |
| タイムディレイ | | ○ | | | ○ | |
| タイムスイッチ | | ○ | ○ | | | |
| タワー塔 | ○ | ○ | | | | |
| タワープラス塔 | ○ | ○ | | | | |
| ユーザー追加モジュール | ○ | ○ | | | | |
| 真空濾過機 | ○ | ○ | | | | |
| バルブ(弁) | ○ | ○ | | | ○ | |
| ベンチュリースクラバ | ○ | ○ | | | | |
| ベッセル | ○ | ○ | | | | |