

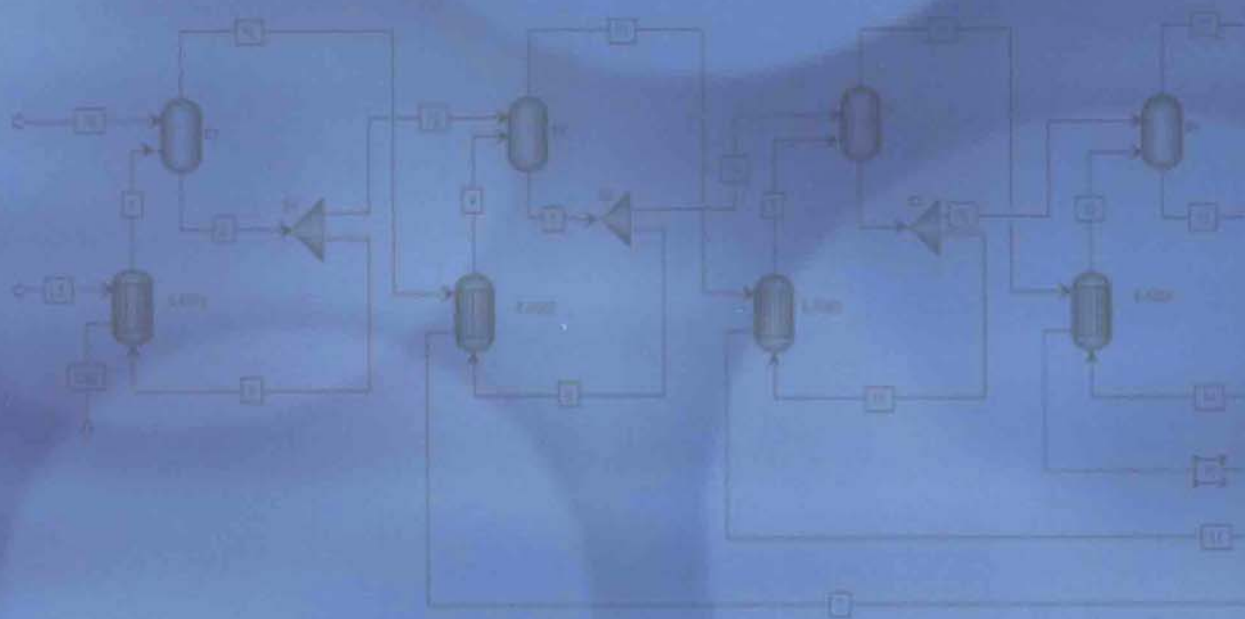
高等教育规划教材

**卓越** 工程师教育培养计划系列教材  
ZHUOYUE GONGCHENGSHI  
JIAOYU PEIYANG JIHUA XILIE JIAOCAI

包宗宏 武文良 ◎ 主编

# 化工计算与软件应用

HUAGONG JISUAN  
YU RUANJIAN YINGYONG



化学工业出版社

高等教育规划教材

卓越

工程师教育培养计划系列教材

ZHUOYUE GONGCHENGSHI  
JIAOYU PEIYANG JIHUA XILIE JIAOCAI

# 化工计算与软件应用

ISBN 978-7-122-16677-7



定价：38.00 元

9 787122 166777 >

高等教育规划教材

卓越  
工程师教育培养计划系列教材

包宗宏 武文良 ◎ 主编

# 化工计算与软件应用



化学工业出版社

· 北京 ·



本书以 Aspen Plus 及其系列软件为计算工具,以化工过程实例为线索,介绍化工计算中的基本原理、计算方法与解题技巧。全书共分 5 章,第 1 章介绍化工物性数据、相平衡数据的查询、估算与数据处理方法;第 2 章介绍化工过程物料衡算与能量衡算方法;第 3 章介绍节能技术在化工分离过程中的应用;第 4 章介绍化工设备的工艺计算;第 5 章介绍工业装置流程模拟方法。书后附录中有 Aspen Plus 物性术语对照表、综合过程数据包“Datapkg”和电解质过程数据包“Elecins”中的物性数据文件简介,供读者参考。

本书为高等学校化工类专业本科生与研究生的教材,也可供从事化工过程开发与设计的工程技术人员参考。

### 图书在版编目(CIP)数据

化工计算与软件应用 / 包宗宏, 武文良主编. --北京:  
化学工业出版社, 2013.5  
高等教育规划教材  
卓越工程师教育培养计划系列教材  
ISBN 978-7-122-16677-7

I. ①化… II. ①包…②武… III. ①化工计算-应用  
软件-教材 IV. ①TQ015.9

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2013) 第 045749 号

---

责任编辑: 何 丽  
责任校对: 宋 玮

文字编辑: 丁建华  
装帧设计: 关 飞

---

出版发行: 化学工业出版社 (北京市东城区青年湖南街 13 号 邮政编码 100011)

印 装: 三河市延风印装厂

787mm×1092mm 1/16 印张 18 字数 465 千字 2013 年 7 月北京第 1 版第 1 次印刷

---

购书咨询: 010-64518888 (传真: 010-64519686) 售后服务: 010-64518899

网 址: <http://www.cip.com.cn>

凡购买本书,如有缺损质量问题,本社销售中心负责调换。

---

定 价: 38.00 元

版权所有 违者必究



# 前言

化工计算是化学工程与工艺专业学生的一门专业技术课程，一般包括物性数据的查询与估算、物料衡算和热量衡算、设备工艺计算、稳态过程的物料与能量联合衡算等。化工计算的目的，一是取得设备设计所需要的数据，二是为流程单元操作的调节和生产过程的控制提供依据，三是掌握原材料消耗量，中间产品和产品的生成量，估计能量以及水、电、蒸汽等动力消耗以及对生产操作进行经济分析。在化工厂设计时，化工计算是工厂或车间设计由定性规划转入定量计算的第一步；在现有装置进行技术改造时，对存在问题进行评价和对生产流程的经济性评价也是必不可少的。开设化工计算课程，可以训练学生的运算能力以及将化工专业理论知识运用于工程实际的能力。

化工过程涉及的计算问题大多较繁杂，求解大型非线性方程组、常微分方程组或偏微分方程组、大型矩阵等司空见惯。例如，对含  $C$  个组分的混合物进行绝热闪蒸计算时，涉及的 Jacobian 偏导数矩阵共有  $(2C+2)^2$  个元素，每个元素都要进行超越函数的偏导数计算。又比如用 Naphtali-Sandholm 同时校正法计算含  $C$  个组分、 $N$  块理论板的精馏塔时，需要求解  $N(2C+3)$  维非线性方程组。这些计算工作量巨大，手工难以完成。

根据计算工具的发展沿革，化工计算课程的发展可以划分为三个阶段：20 世纪 70 年代以前，化工计算的工具是计算尺，借助于这些原始计算工具，人们可以对一些简化、理想的数学模型进行求解，再借助于实际工作经验，工程师们进行化工厂的设计计算；20 世纪 70 年代以后，小型、微型数字计算机开始普及，人们可以自己动手编制一些小型的、独立的汇编语言程序，求解一些复杂一点的、手工难以计算的化工计算问题，比如固定床反应器的温度分布、泡点法精馏塔核算等。在此阶段，编制计算程序往往依赖个人的知识与经验，编制的程序也缺乏普遍性，只适用于个例；20 世纪 80 年代以后，美国、加拿大、英国的一些公司开发了基于流程图的过程稳态、动态模拟软件，这些软件经过不断的发展、更新、融合，功能越来越强大，应用范围越来越广泛，准确性、实用性越来越好，其中最具代表性的软件是美国 AspenTech 公司的 Aspen Plus 化工流程模拟软件。

古人说，“工欲善其事，必先利其器”。化工流程模拟软件就是化工计算的有力利器，它用严格和最新的计算方法，提供近似准确的单元操作模型，进行单元和全过程的计算，还可以评估已有装置的优化操作或新建、改建装置的优化设计。软件系统功能齐全，规模庞大，可应用于化工、炼油、石油化工、气体加工、煤炭、医药、冶金、环境保护、动力、节能、食品等许多工业领域。可以毫不夸张地说，使用模拟软件的水平，反映了一个人化工计算能力的高低。

化学工程与工艺专业的大四年级本科生、参加卓越工程师教育培养计划的学生已经学完



了专业基础课程和部分专业课程,对化学工程的基础理论知识已有一定的掌握,但综合应用各门课程的知识去研究、分析实际化工问题仍需要一定训练,化工计算是一个很好的训练途径,同时又是一项实用的专业技能。针对此背景,本书以 Aspen Plus 及其系列软件为计算工具,以实例为线索,侧重于介绍如何应用化工专业知识结合软件求解化工计算中的一般问题,包括化工物性数据、相平衡数据的查询与估算、物料衡算与能量衡算、节能分离技术应用、设备工艺计算、综合流程模拟等内容。

书中的例题与习题部分来源于编者为本科生、研究生讲授化工原理、化工分离工程、化工设计等课程准备的例题与习题,部分取材于编者指导本科生、研究生毕业论文的课题,部分取材于编者指导在校生参加全国大学生化工设计大赛提交的作品。这些例题与习题涵盖了化工设计过程中常见的一般计算问题,读者可以在学习例题、完成习题的基础上举一反三,以解决化工设计、技术改造中的其他问题,提高自己的化工工艺设计能力。

本书编写过程中,注意把物理化学、化工原理、化工热力学、化学反应工程、分离工程、化工设计等先修课程的专业知识与软件解题过程相结合,灵活应用这些知识对软件解题过程中、解题完成后的数据进行分析,以提高读者分析问题与解决问题的能力。学习一个软件的操作并不难,而正确使用软件并不容易。把所学的化工专业知识用于软件的操作过程、对软件中间计算数据分析、对计算结果正确性的评判,这才是难点所在。

本书以 Aspen Plus 及其系列软件为计算工具,以化工过程实例为线索,介绍化工计算中的基本原理、计算方法与解题技巧。全书共分 5 章,第 1 章介绍化工物性数据、相平衡数据的查询、估算与数据处理方法;第 2 章介绍化工过程物料衡算与能量衡算方法;第 3 章介绍节能技术在化工分离过程中的应用;第 4 章介绍化工设备的工艺计算;第 5 章介绍工业装置流程模拟方法。书后附录中有 Aspen Plus 物性术语对照表、综合过程数据包“Datapkg”和电解质过程数据包“Elecins”中的物性数据文件简介,以供读者在解题或在扩展学习中查询、应用。本书第 5 章的 5.2 节由南京中图数码科技有限公司范会芳编写,其余章节由南京工业大学包宗宏、武文良编写,在读研究生张少石、张杰等编译了附录 1,在读研究生汤磊对书稿进行了校验。

本书不仅可以作为高校本科生、参加卓越工程师教育培养计划学生的化工计算教材,也可作为化工类研究生的选修教材,也可作为中级 Aspen Plus 及其系列软件的学习教材,对从事化工过程开发与设计的工程技术人员有一定参考价值。由于编者的水平所限,书中错误难免,敬请读者批评指正。

编 者

2013 年 3 月于南京



# 目 录

## 第1章 化工物性数据和相平衡数据的查询与估算 / 1

|                             |    |
|-----------------------------|----|
| 1.1 化工物性数据的查询               | 1  |
| 1.1.1 从文献中查找                | 1  |
| 1.1.2 从 Aspen Plus 软件数据库中查找 | 5  |
| 1.1.3 物性查询举例                | 6  |
| 1.2 纯物质的物性估算                | 9  |
| 1.2.1 基础物性常数                | 9  |
| 1.2.2 与温度相关的热力学性质           | 10 |
| 1.2.3 与温度相关的迁移性质            | 11 |
| 1.2.4 纯物质物性估算举例             | 12 |
| 1.3 混合物的物性估算                | 15 |
| 1.3.1 估算热力学性质的模型            | 16 |
| 1.3.2 估算传递性质模型              | 17 |
| 1.3.3 混合物的物性估算举例            | 19 |
| 1.4 相平衡数据查询与使用              | 21 |
| 1.4.1 相平衡数据手册               | 21 |
| 1.4.2 用软件计算相平衡数据与绘制相图       | 23 |
| 1.4.3 溶液活度系数方程参数的估算         | 31 |
| 习题                          | 43 |
| 参考文献                        | 46 |

## 第2章 物料衡算与能量衡算 / 47

|                      |    |
|----------------------|----|
| 2.1 衡算方法             | 48 |
| 2.1.1 基本概念           | 48 |
| 2.1.2 衡算方程式          | 48 |
| 2.1.3 衡算的基本步骤        | 49 |
| 2.1.4 用软件进行物料衡算与能量衡算 |    |

|                 |     |
|-----------------|-----|
| 的要点             | 50  |
| 2.2 简单物理过程      | 52  |
| 2.2.1 混合过程      | 52  |
| 2.2.2 汽化过程      | 59  |
| 2.2.3 单级相平衡分离过程 | 61  |
| 2.2.4 非平衡级分离过程  | 74  |
| 2.2.5 机械分离过程    | 75  |
| 2.3 设备组合过程      | 78  |
| 2.3.1 同类设备的组合   | 78  |
| 2.3.2 不同设备的组合   | 81  |
| 2.4 含化学反应过程     | 84  |
| 2.4.1 单个反应器     | 84  |
| 2.4.2 含反应器的组合流程 | 88  |
| 2.5 含循环流过程      | 94  |
| 2.6 分离复杂组成混合物   | 108 |
| 习题              | 114 |
| 参考文献            | 121 |

## 第3章 节能分离过程 / 122

|                |     |
|----------------|-----|
| 3.1 流体换热与热集成网络 | 122 |
| 3.1.1 冷热流体换热   | 122 |
| 3.1.2 热集成网络分析  | 124 |
| 3.2 蒸汽优化配置     | 134 |
| 3.3 多效蒸发       | 138 |
| 3.4 精馏过程       | 141 |
| 3.4.1 多效精馏     | 141 |
| 3.4.2 热泵精馏     | 147 |
| 3.4.3 热偶精馏     | 152 |
| 3.4.4 中段换热精馏   | 158 |
| 习题             | 167 |
| 参考文献           | 173 |

## 第4章 设备工艺计算 /174

|                   |     |
|-------------------|-----|
| 4.1 塔设备 .....     | 174 |
| 4.2 换热器 .....     | 181 |
| 4.2.1 冷凝器 .....   | 181 |
| 4.2.2 再沸器 .....   | 190 |
| 4.3 反应器 .....     | 199 |
| 4.3.1 釜式反应器 ..... | 199 |
| 4.3.2 管式反应器 ..... | 203 |
| 4.4 流体输送设备 .....  | 209 |
| 4.4.1 离心泵 .....   | 209 |
| 4.4.2 气体压缩机 ..... | 211 |
| 习题 .....          | 212 |
| 参考文献 .....        | 215 |

## 第5章 工业装置流程模拟 /216

|                                          |     |
|------------------------------------------|-----|
| 5.1 混酸过程 .....                           | 216 |
| 5.2 环己烷、环己酮、环己醇混合物的高效分离过程 .....          | 218 |
| 5.3 75kt/h 丙烯腈工艺废水四效蒸发浓缩过程 .....         | 232 |
| 5.4 300kt/a 规模硫磺制酸过程 .....               | 238 |
| 5.5 从醚后 C <sub>4</sub> 烃中提取高纯异丁烯过程 ..... | 248 |
| 习题 .....                                 | 258 |
| 参考文献 .....                               | 265 |

|                                  |     |
|----------------------------------|-----|
| 附录1 Aspen Plus 物性术语对照表 /         | 266 |
| 附录2 综合过程数据包“Datapkg”中物性数据文件简介 /  | 273 |
| 附录3 电解质过程数据包“Elecins”中物性数据文件简介 / | 275 |