

计算机辅助 化工装置选型设计

刘超锋 编著

● 计算机软件操作过程典型案例

● 设计细节解决方法

● 最新标准规范

**Computer
Aided Selection
and Design of Equipment
for Chemical Plant**



化学工业出版社

计算机辅助 化工装置选型设计

刘超锋 编著



化学工业出版社

·北京·

本书介绍了化工装置选型设计的基本原则和基本方法,系统地讲述了:基于 Aspen Plus 软件的反应设备、板式精馏塔和填料吸收塔的工艺设计;基于 Aspen EDR 软件的管壳式换热器的工艺设计;基于 Cup-Tower 软件的板式精馏塔和填料吸收塔的水力学设计和校核;基于 SW6-2011 软件的反应设备、列管式换热器、板式精馏塔、填料塔、储罐的机械校核;基于 NSAS 软件的压力容器开孔结构分析设计;基于软件的安全阀选型、压力容器划类、流程泵选型;基于 AutoCAD 软件的过程设备绘图。以应用案例的形式分析了以下软件:换热设备工艺设计常用的 HTRI 软件和 Aspen EDR 软件;过程设备强度计算常用的 SW6 软件和 PV Elite 软件;压力容器分析设计常用的软件 ANSYS。附图包括列管移热式固定床催化反应器、搅拌反应釜、降膜式蒸发器、板式精馏塔、填料吸收塔、卧式储罐在内的过程设备的装配图图纸 6 张。

本书适用于化工装置选型设计人员使用,可以作为过程装备与控制工程、化学工程与工艺、能源与动力工程、机械工程等专业大学生、研究生参加全国大学生化工设计竞赛、课程设计和毕业设计的教材或参考书,也可以作为化工装置技术人员和社会其他读者继续教育的参考书。

图书在版编目(CIP)数据

计算机辅助化工装置选型设计/刘超锋编著. —北京:
化学工业出版社, 2018. 1
ISBN 978-7-122-31108-5

I. ①计… II. ①刘… III. ①化工设备-计算机辅助
设计 IV. ①TQ050. 2

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2017)第 297949 号

责任编辑:高 钰
责任校对:边 涛

文字编辑:陈 喆
装帧设计:刘丽华

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:三河市延风印装有限公司
787mm×1092mm 1/16 印张 23½ 字数 563 千字 2018 年 3 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:128.00 元

版权所有 违者必究

化工行业具有非标设备种类多的特殊性。目前，化工装置的选型和设计的主流设计过程，是借助计算机辅助的系统化手段，将化工过程装置内的工艺过程、成套过程装备转化为工程师语言的设计过程。随着对设计效率和设计质量要求的提高，计算机辅助化工装置选型和设计成为设计人员必须掌握的手段。

本书内容丰富，坚持“实用”为第一原则，针对化工装置里的典型设备（换热器、塔设备、反应设备、储罐、离心泵、安全阀等）以案例式编写，给出的图纸、图样的符号、代号参考国家和行业现在执行的标准规范，图文并茂，各章均有设计案例的软件操作，便于读者根据本书介绍的软件操作截图重复这些操作过程，直观地学习相关的知识并便于学以致用，解决读者多年来在多本参考书之间所面临的对化工装置选型设计领域复杂工程计算无从下手的问题，有利于提高本书的参考价值。

本书介绍了化工装置选型设计的基本原则和基本方法，系统地介绍了：基于 Aspen Plus 软件的反应设备、板式精馏塔和填料吸收塔的工艺设计；基于 Aspen EDR 软件的管壳式换热器的工艺设计；基于 Cup-Tower 软件的板式精馏塔和填料吸收塔的水力学设计和校核；基于 SW6-2011 软件的反应设备、列管式换热器、板式精馏塔、填料塔、储罐的机械校核；基于 NSAS 软件的压力容器开孔结构分析设计；基于软件的安全阀选型、压力容器划类、流程泵选型；基于 AutoCAD 软件的过程设备绘图。以应用案例的形式分析了以下软件：换热设备工艺设计常用的 HTRI 软件和 Aspen EDR 软件；过程设备强度计算常用的 SW6 软件和 PV Elite 软件；压力容器分析设计常用的软件 ANSYS。附图包括列管移热式固定床催化反应器、搅拌反应釜、降膜式蒸发器、板式精馏塔、填料吸收塔、卧式储罐在内的过程设备的装配图图纸。

本书以化工装置选型设计人员为主要的读者对象，可以作为过程装备与控制工程、化学工程与工艺、能源与动力工程、机械工程等专业大学生、研究生参加全国大学生化工设计竞赛、课程设计和毕业设计的教材或参考书，也可以作为化工装置技术人员和社会其他读者继续教育的参考书。

本书由郑州轻工业学院刘超锋编著。在成书过程中，得到郑州轻工业学院相关领导的热情鼓励；学生陈振毅、司豪鹏、张满东、赵涌涛、常天文、杜腾飞、熊云涛参与本书的图文输入。此外，本书参考了相关的文献资料，在此一并致谢！

限于笔者的水平，书中不足之处恳请读者批评指正。

编著者

2017年10月

第 1 章 基于 Aspen 的反应设备的工艺设计	1
1.1 基于 RStoic 模块的物料衡算和热量衡算	1
1.2 基于 Heater 模块的反应设备出口温度计算	6
1.3 基于 Aspen EDR 软件的多管式固定床催化反应设备的设计	8
1.3.1 初步设计	8
1.3.2 初步设计结果	9
1.3.3 校核	11
1.3.4 校核阶段的计算结果	12
1.3.5 进一步优化后的结果	13
第 2 章 基于 Aspen EDR 软件的列管式换热器的工艺设计	15
2.1 管壳式换热设备设计原则	15
2.2 设计参数的初步确定	16
2.3 初步设计过程	17
2.3.1 建立和保存文件	17
2.3.2 设置应用选项	17
2.3.3 输入工艺参数	17
2.3.4 输入物性数据	17
2.3.5 输入结构数据	19
2.3.6 运行程序	19
2.3.7 设计计算结果分析	19
2.4 校核过程	21
2.4.1 设置应用选项	21
2.4.2 结构数据标准化	21
2.4.3 运行程序	22
2.4.4 校核计算结果分析	22
2.5 进一步优化过程	23
第 3 章 Aspen EDR 软件应用案例分析	24
3.1 关于换热器的型式	24
3.2 对于管壳式换热器	25

3.3	对于板翅式换热器	26
3.4	案例分析	28
第4章	HTRI 软件应用案例分析	43
4.1	关于物性参数	43
4.2	关于工艺条件	43
4.3	关于流程	43
4.4	关于换热器类型	44
4.5	关于换热器壳程流动的调整	46
4.6	关于换热管振动	49
4.7	关于热虹吸式再沸器	56
4.8	关于尾气焚烧炉	59
第5章	基于 Aspen Plus 软件的板式精馏塔的工艺设计	63
5.1	设计条件的确定	63
5.2	初步计算过程	64
5.2.1	模型的新建	64
5.2.2	物料的定义	64
5.2.3	物性方法的选择	64
5.2.4	流程的建立	65
5.2.5	物料衡算的单位设置	66
5.2.6	进料条件的定义	67
5.2.7	塔内参数的定义	67
5.2.8	恒算结果	68
5.3	进一步优化设计	69
5.4	塔设备尺寸计算过程	70
5.4.1	定义塔内的参数	70
5.4.2	处理量的调整对塔径的影响	70
5.4.3	水力学计算结果	72
5.4.4	塔板结构参数	72
5.4.5	塔板的工艺参数	73
5.5	小结	75
第6章	基于 Cup-Tower 软件的板式塔水力学校核和设计	76
6.1	水力学校核计算过程	76
6.1.1	参数设置	76
6.1.2	校核计算结果	78
6.2	水力学设计计算过程	81
6.2.1	设计参数的定义	81
6.2.2	设计计算结果	82

6.3 小结	85
第7章 基于 Aspen Plus 软件的填料吸收塔的工艺设计	86
7.1 模拟所需要的参数确定	86
7.2 吸收过程的初步模拟	86
7.2.1 创建新的模拟	86
7.2.2 物性方法的选择	89
7.2.3 流程图的定义	89
7.2.4 流程图中物流的定义	92
7.2.5 吸收塔的定义	94
7.2.6 初步模拟结果	96
7.3 吸收塔内过程的进一步优化	98
7.4 填料吸收塔的水力学设计	99
7.4.1 填料的选择	99
7.4.2 液泛分率的选择	100
7.4.3 水力学计算结果	101
7.4.4 查看填料塔尺寸及相关参数	103
第8章 基于 Cup-Tower 软件的填料吸收塔的水力学设计	104
8.1 填料塔水力学设计的一般要求	104
8.2 输入参数的定义	105
8.3 计算结果	106
第9章 基于 SW6 软件的反应设备的机械校核	108
9.1 主体设计参数输入	108
9.2 筒体数据输入	108
9.3 管板数据输入	109
9.4 前端管箱数据输入	110
9.5 后端管箱数据输入	111
9.6 前端管箱法兰数据输入	112
9.7 筒体法兰数据输入	113
9.8 开孔补强数据输入	115
9.9 反应设备校核结果	116
9.9.1 前端管箱筒体计算结果	116
9.9.2 前端管箱封头计算结果	117
9.9.3 后端管箱筒体计算结果	117
9.9.4 后端管箱封头计算结果	117
9.9.5 壳程圆筒计算结果	117
9.9.6 开孔补强计算结果	118
9.9.7 延长部分兼作法兰固定式管板计算结果	119

9.10	反应设备的裙座设计校核数据输入	119
9.10.1	主体设计参数输入	119
9.10.2	筒体数据输入	120
9.10.3	附件数据输入	120
9.10.4	上封头数据输入	120
9.10.5	下封头数据输入	121
9.10.6	裙座数据输入	121
9.11	裙座校核结果	123
第 10 章 基于软件的管壳式换热设备的机械校核		126
10.1	新建文件的操作	126
10.2	主体设计参数的输入	126
10.3	筒体数据的输入	126
10.4	管板数据的输入	128
10.5	前端管箱数据的输入	129
10.6	前端管箱法兰数据输入	131
10.7	后端管箱数据输入	132
10.8	筒体法兰数据输入	134
10.9	开孔补强数据输入	135
10.10	运行	136
10.11	前端管箱筒体的设计计算结果	137
10.12	前端管箱封头的设计计算结果	137
10.13	后端管箱筒体的设计计算结果	137
10.14	后端管箱封头的设计计算结果	138
10.15	壳程圆筒的设计计算结果	138
10.16	开孔补强的设计计算结果	138
10.17	固定式管板的设计计算结果	139
10.18	管箱法兰的设计计算结果	140
10.19	耳式支座的选择	140
10.19.1	数据输入	140
10.19.2	计算结果	141
10.19.3	校核所选耳式支座	141
第 11 章 基于 SW6 软件的板式精馏塔的机械校核		142
11.1	板式塔机械设计参数的确定	142
11.1.1	设计压力的确定	142
11.1.2	设计温度的确定	142
11.1.3	材料选择和实验压力的确定	142
11.1.4	封头的确定	142
11.1.5	管口和人孔	143

11.1.6	塔顶空间高度的确定	144
11.1.7	塔底部空间高度的确定	144
11.1.8	裙座高度的确定	144
11.1.9	液柱静压力的确定	145
11.1.10	接管尺寸	145
11.1.11	吊柱的选取	145
11.2	基于 SW6 软件的板式塔机械强度校核	146
11.2.1	主体设计参数的输入	146
11.2.2	筒体参数的输入	146
11.2.3	塔板参数的输入	147
11.2.4	附件数据的输入	147
11.2.5	上封头数据的输入	147
11.2.6	下封头数据的输入	147
11.2.7	载荷数据的输入	148
11.2.8	裙座数据(1)的输入	149
11.2.9	裙座数据(2)的输入	149
11.2.10	裙座数据(3)的输入	150
11.2.11	开孔补强的数据输入	151
11.3	校核计算结果	154
11.4	小结	160
第 12 章 基于 SW6 软件的填料吸收塔的机械校核		161
12.1	主体设计参数	162
12.2	筒体数据	163
12.3	内件数据	164
12.4	附件数据	165
12.5	封头数据	166
12.6	载荷数据	167
12.7	裙座数据	167
12.8	开孔补强数据	169
12.9	容器壳体强度计算结果	175
12.10	上封头校核计算结果	176
12.11	下封头校核计算结果	176
12.12	裙座校核结果	177
12.13	开孔补强校核结果	181
第 13 章 基于 SW6 软件的卧式容器的机械校核		183
13.1	SW6 的打开方式	183
13.2	新建文件	184
13.3	数据输入	184

13.3.1	主体设计参数输入	184
13.3.2	筒体数据输入	185
13.3.3	左封头数据输入	185
13.3.4	右封头数据输入	185
13.3.5	鞍座数据输入	186
13.3.6	接管数据输入	187
13.4	校核计算	188
13.4.1	计算	188
13.4.2	退出并保存	189
13.5	内压圆筒校核结果	190
13.6	左封头计算结果	190
13.7	右封头计算结果	190
13.8	鞍座计算结果	191
13.9	开孔补强计算结果	192
第 14 章 基于软件的过程设备局部结构设计		193
14.1	基于 SW6 软件的齿啮式卡箍计算	193
14.2	基于程序的非标准螺纹法兰设计	195
14.3	基于 NSAS 软件的压力容器开孔结构优化	199
14.3.1	启动过程	199
14.3.2	管口类型的选择	199
14.3.3	数据输入	201
14.3.4	工况设置	202
14.3.5	参数调整	202
14.3.6	计算	204
14.3.7	计算结果的处理	208
14.3.8	接管壁厚的影响	209
14.3.9	筒体壁厚的影响	209
14.3.10	焊接角度对最大应力比的影响	210
14.3.11	正交试验	210
第 15 章 SW6 软件应用案例分析		212
15.1	对于一般的设备	212
15.1.1	腐蚀裕量	212
15.1.2	封头壁厚	212
15.1.3	焊接接头系数	213
15.1.4	液柱压力	213
15.1.5	接管实际外伸长度	213
15.1.6	非圆形开孔计算直径	213
15.2	对于管壳式换热器	214

15.2.1	换热管受压失稳当量	214
15.2.2	分程隔板槽面积	214
15.3	对于夹套容器	215
15.3.1	夹套容器两腔的压力确定	216
15.3.2	计算工况的处理	216
15.4	关于鞍座的宽度	222
第 16 章	PV Elite 软件应用案例分析	223
16.1	关于材料的添加	223
16.2	关于鞍座底板厚度计算	226
16.3	关于换热器计算	228
第 17 章	ANSYS 软件压力容器应用案例分析	236
17.1	关于设计过程	237
17.2	关于命令流文件	244
17.2.1	开启新的工作	246
17.2.2	定义参数	246
17.2.3	前处理	246
17.2.4	求解部分	247
17.2.5	后处理部分	247
17.3	关于 APDL 命令流文件的运行方式	250
17.3.1	在 ANSYS 环境中运行	250
17.3.2	间接通过 VB 的方式	251
第 18 章	基于软件的压力容器划类	256
18.1	管壳式换热设备的压力容器划类	258
18.1.1	介质的输入	258
18.1.2	压力和容积尺寸的输入	258
18.1.3	划类结果	260
18.2	板式塔的划类	260
18.2.1	划类前的计算	260
18.2.2	进行划类	260
第 19 章	基于软件的安全阀选型	262
19.1	基于 Aspen Plus 软件的安全阀选型所需参数的计算	263
19.1.1	动力故障工况时的物性参数	263
19.1.2	火灾工况时的汽化潜热	263
19.1.3	计算最小泄放面积所需的多个物性参数	266
19.1.4	塔顶回流故障时的泄放量	268
19.1.5	真实气体摩尔体积的求解	269
19.2	基于 Aspen Plus 软件的安全阀设计	270

19.3	反应设备安全阀的选型	273
19.3.1	确定阀门类型的数据输入	273
19.3.2	定径计算的数据输入	274
19.3.3	确定材料和规格的数据输入	275
19.3.4	最终参数的数据输入	275
19.3.5	其他内容的数据输入	276
19.3.6	安全阀软件的选型结果	276
19.4	精馏塔安全阀的选型	276
19.5	储罐安全阀的选型	279
第 20 章	基于软件的流程泵选型	286
20.1	介质对选型的影响	286
20.2	操作参数对选型的影响	287
20.3	换热设备液体进料泵选型	288
20.4	精馏塔液体进料泵选型	291
20.5	储罐进料泵选型	294
第 21 章	基于 AutoCAD 软件的过程设备绘图	298
21.1	图纸上表达的内容	299
21.1.1	总体要求	299
21.1.2	图纸上需要特别注意的内容	300
21.1.3	数据表	305
21.1.4	管口明细表	305
21.1.5	明细表	305
21.1.6	装配图标题栏	307
21.1.7	零部件标题栏	308
21.2	绘图环境常用的设置	308
21.2.1	图形单位	308
21.2.2	图层	308
21.2.3	显示线宽	309
21.2.4	联机的内容和触摸体验	309
21.2.5	选择集模式	310
21.2.6	样板文件	311
21.3	常用的命令及快捷键	312
21.3.1	范围缩放	312
21.3.2	全屏幕模式键盘和鼠标的控制	312
21.3.3	相对坐标	314
21.3.4	切换正交模式	315
21.3.5	波浪线	315
21.3.6	剖面线	315
21.3.7	文字	316

21.3.8 对象特性	316
21.3.9 快捷键绘图	316
21.4 画图比例的控制	320
21.4.1 图幅法	320
21.4.2 布局法	320
21.5 画图顺序	320
21.6 简化画法	321
21.7 筒体、封头的画法	322
21.8 接管及法兰的画法	322
21.9 支座的画法	323
21.10 管板布管图的画法	324
21.11 焊接符号的画法	324
21.12 尺寸标注	325
21.12.1 一般要求	325
21.12.2 一般尺寸标注样式的设置	328
21.12.3 引出水平标注样式的设置	330
21.12.4 角度标注样式的设置	330
21.12.5 尺寸公差标注样式的设置	331
21.13 件号和管口号的编制	332
21.14 技术要求的填写	332
21.15 表面粗糙度属性块	333
21.16 标高符号的画法	333
21.17 表格的画法	333
21.17.1 直接法	333
21.17.2 借助 Excel 软件的方法	336
21.18 特性的调整	336
21.19 多余设置的清理	336
21.20 图纸打印	336
21.21 基于 AutoCAD 二次开发的过程设备的参数化绘图	337
21.21.1 基于 VBA	337
21.21.2 基于 .NET	342
附图	348
附图 1 列管式反应设备的图纸	348
附图 2 搅拌反应釜图纸	350
附图 3 管壳式换热设备的图纸	352
附图 4 板式精馏塔的图纸	354
附图 5 填料吸收塔的图纸	356
附图 6 储罐的图纸	358
参考文献	360

基于Aspen的反应设备的工艺设计

化学反应设备是化工生产过程装置的中心。反应设备内发生的是传热、传质等物理过程和化学过程共同以及交互作用的结果，比单纯的物理操作过程要复杂得多。反应设备设计所依据的是化学反应工程理论。由于化学反应过程的复杂性，因此反应设备的理想设计往往依赖长期的研究工作。

本章讨论的反应设备是对外换热式固定床催化反应器。其长径比较大，由于流动阻力很小而被认为是活塞流，即在垂直于流动方向的同一截面的各质点的流速完全相同、物料质点在反应器内的停留时间相同且平行向前流动，习惯称为理想管式反应器。其次，它类似于管壳式换热器，管内充填催化剂的颗粒直径不超过换热管内直径的 $1/8$ ，壳间走换热流体。此类反应器例如：国内制造的环氧乙烷反应器的直径超过 7000mm ；挠性管板丁醇转化器的直径超过 5000mm 。

Aspen Plus 是由美国 Aspen Tech 开发的工程应用软件 Aspen ONE Engineering 的套件之一，是世界级标准流程模拟软件，可以自动形成物料流程图。下面以固定床反应器为例，说明基于 Aspen 软件的反应设备的工艺设计过程。用 Aspen 软件进行反应设备计算时，相关参数不能超过程序允许的数值，例如反应设备某组分的转化率不能超过 1 ，否则会出现错误。

使用 Aspen Plus 软件的化学计量反应器模块进行设计时，平衡反应器 REquil（绝热反应器的一种）模块需要输入反应过程的操作条件和方程式即可计算；平衡反应器 RGibbs 模块不需要输入反应方程式，只要设置进出口物料的组成、反应压力和反应温度就可以估算出物料经过反应后大概的反应热；绝热反应器（RStoic）模块需要已知反应的转化率、反应压力、反应温度和化学反应方程式，可以计算出出口物料的成分以及组成。RStoic 模块比较清晰地反映出反应热负荷和物料的进出口组成情况，并且随着反应热负荷的变化，反应器的出口温度也会随之变化。

1.1 基于 RStoic 模块的物料衡算和热量衡算

启动 Aspen Plus 软件，选择模块“General with Metric Units”，将文件保存为“反应器模块 RSTOIC 的流程模拟.bkp”。

建立如图 1-1 所示的化学计量反应器 RSTOIC 流程图。其中，反应器模块 RSTOIC 中选用模块库中的“Reactors/RSTOIC/ICON2”模块。

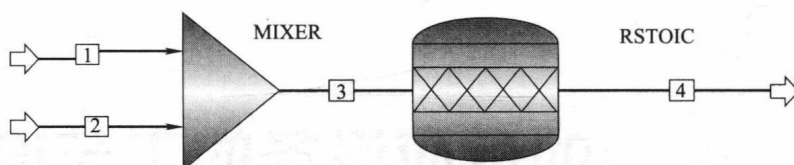





图 1-1 化学计量反应器 RSTOIC 流程简图


点击“”，出现“Flowsheet Complete”对话框，点击确定，进入“Setup/Specifications/Global”页面，在名称（Title）对话框中输入“RSTOIC”。


点击“”，进入“Components/Specifications/Selection”页面，输入组分一氧化碳（CO）、甲醇（CH₄O）、乙酸（C₂H₄O₂）、水（H₂O）、二氧化碳（CO₂）、氢气（H₂）、乙二醇（C₂H₆O）、乙酸甲酯（C₃H₆O₂）、碘甲烷（CH₃I）、碘化氢（HI），如图 1-2 所示。


Select components			
Component ID	Type	Component name	Alias
CO	Conventional	CARBON-MONOXIDE	CO
CH4O	Conventional	METHANOL	CH4O
C2H4O2-1	Conventional	ACETIC-ACID	C2H4O2-1
H2O	Conventional	WATER	H2O
CO2	Conventional	CARBON-DIOXIDE	CO2
H2	Conventional	HYDROGEN	H2
C3H6O2-3	Conventional	METHYL-ACETATE	C3H6O2-3
C2H6O-2	Conventional	ETHANOL	C2H6O-2
CH3I	Conventional	METHYL-IODIDE	CH3I
HI	Conventional	HYDROGEN-IODIDE	HI


图 1-2 该模拟输入的组分

点击“”，进入“Properties/Specifications/Global”页面，进行物性方法的选择，选择物性方法“RK-SOAVE”。物性方法“RK-SOAVE”可以应用于二氧化碳、硫化氢、氢气等。

点击“”，进入“Properties/Parameters/Binary Interaction/RKSKBV-1/Input”页面，查看 Reactions 方程的二元交互作用的参数，本模拟所采用的均是采用系统默认值，不需要做修改。

点击“”，出现“Required Properties Input Complete”的对话框，点击“OK”，进入“Streams/1/Input/Specifications”页面，输入进料温度是 185℃，压力是 3MPa，以及一氧化碳（CO）的流率是 1784.61kmol/h，如图 1-3 所示。

同样地，点击“”，出现“Required Properties Input Complete”的对话框，点击“OK”，进入“Streams/2/Input/Specifications”页面，输入进料温度是 185℃，压力是 3MPa，以及甲醇（CH₄O）、碘甲烷（CH₃I）的流率分别是 1164.55kmol/h、11.808kmol/h，如图 1-4 所示。

点击“”，进入“Blocks/RSTOIC/Setup/Specifications”页面，输入 RSTOIC 模

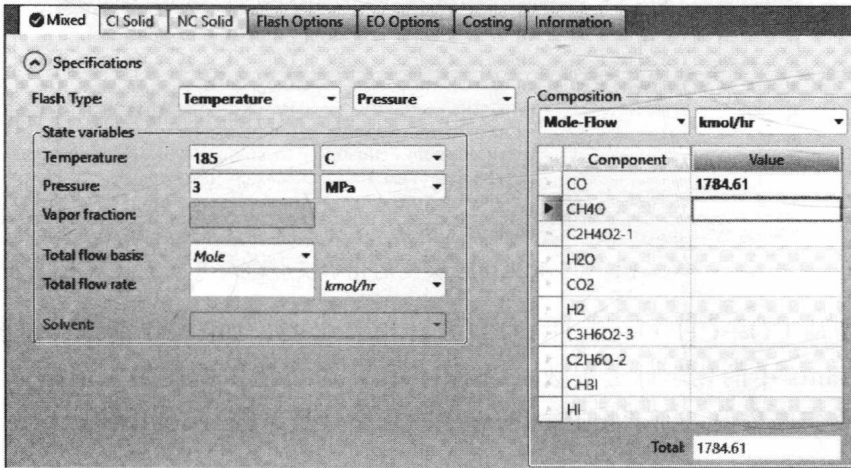


图 1-3 物流 stream 1 组分输入

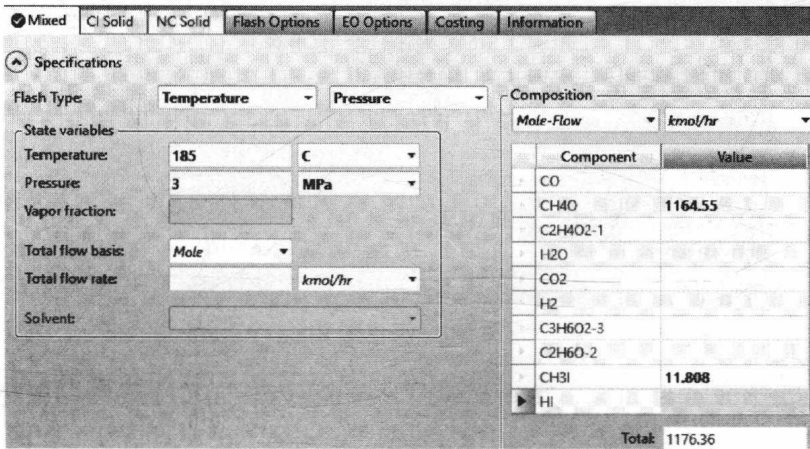


图 1-4 物流 stream 2 组分输入

块的参数，在操作条件（Operating conditions）的对话框中输入压力是 3MPa，温度是 185℃，有效相态选择“Vapor-Only”，如图 1-5 所示。

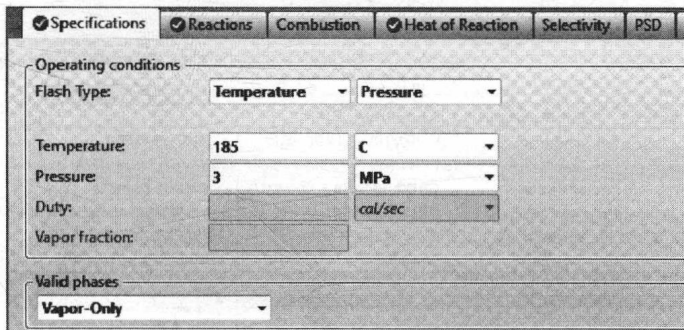



图 1-5 RSTOIC 模块参数的输入

点击“”，进入“Blocks/RSTOIC/Setup/Reactions”页面，进行化学反应的设定，如图 1-6 所示。

点击“New”，出现“Edit Stoichiometry”的对话框，“Reaction No.”默认是“1”，

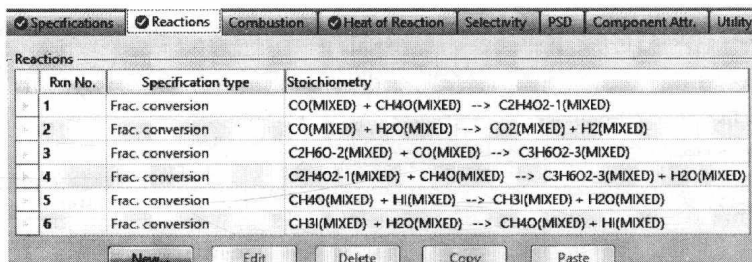


图 1-6 RSTOIC 模块的化学反应输入

输入第一个反应 $\text{CO} + \text{CH}_4\text{O} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$ 以及转化率 0.95，如图 1-7 所示。需要注意的是，反应物 Reactants 中的化学计量系数 (Coefficient) 为负值，即使是正值输入的，系统也会自动将其改变成负值，而产物 Products 中的化学计量系数 (Coefficient) 为正值。

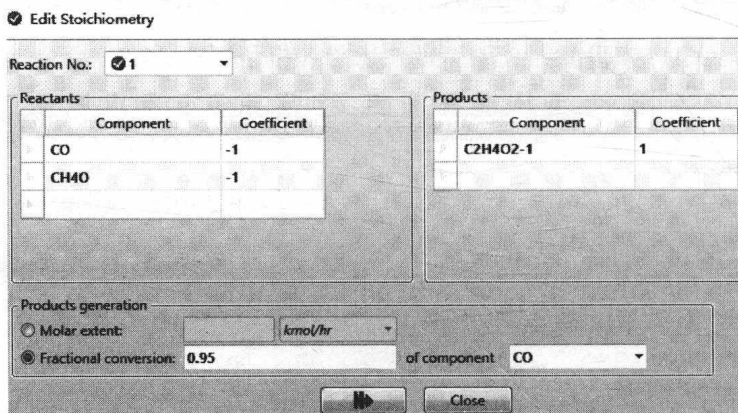


图 1-7 反应定义

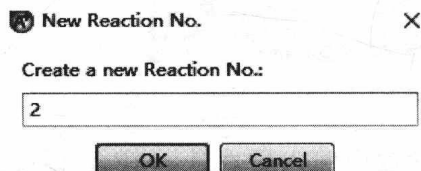


图 1-8 “New Reaction No” 对话框

从“Reaction No.”下拉菜单中选择“<New>”，出现“New Reaction No.”对话框，如图 1-8 所示。

同样的，定义其他反应以及其转化率，完成后点击对话框中的“New”或者“Close”。重新回到“Blocks/RSTOIC/Setup/Reactions”页面，如图 1-9 所示。

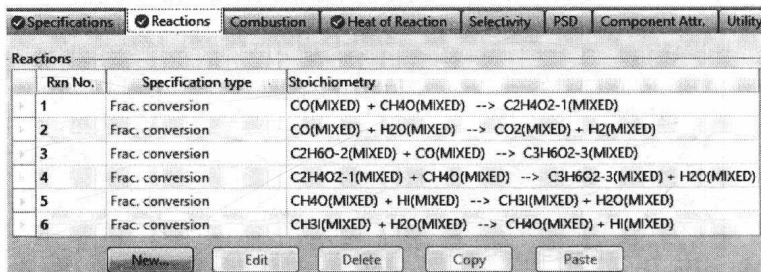


图 1-9 反应化学式输入的结果

本模拟的目的是计算反应热，因此，点击进入“Blocks/RSTOIC/Setup/Heat of Reaction”页面，计算类型 (Calculation type) 选择计算反应热 (Calculate heat of reaction)。在参考条件 (Reference condition) 对话框中输入所有的“Rxn No.”以及各个反应对应的参考组分，参考温度、参考压力均采用默认值，如图 1-10 所示。