

高等教育规划教材

卓越

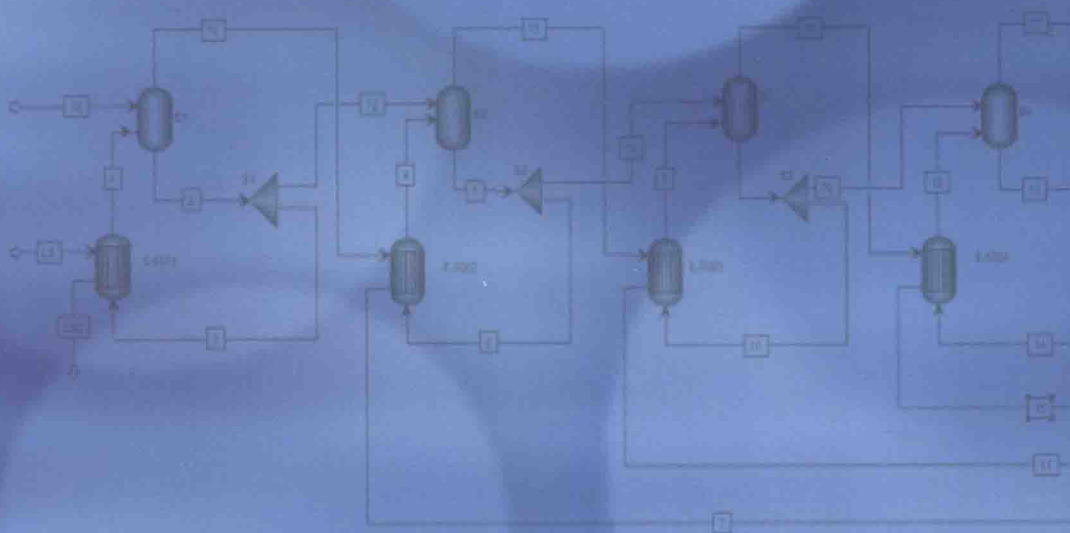
工程师教育培养计划系列教材

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

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

文字编辑: 丁建华

责任校对: 宋 玮

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 C₄ 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

例题目录

第 1 章 化工物性数据和相平衡数据的查询与估算

- 例 1-1 查询硫化氢和硫磺的物性 6
- 例 1-2 估算环八硫的物性参数 12
- 例 1-3 求甲基二乙醇胺 (MDEA) 水溶液的物性 19
- 例 1-4 泡、露点压力求取 24
- 例 1-5 不同压力下的共沸组成 25
- 例 1-6 正己烷-醋酸甲酯-甲醇三元体系的常压相图绘制 27
- 例 1-7 含甲基异丁基酮多组分混合物的共沸点求取 29
- 例 1-8 回归 Wilson 方程、NRTL 方程与 UNIQUAC 方程的汽液相平衡参数 32
- 例 1-9 三元体系液液相平衡数据回归计算 39

第 2 章 物料衡算与能量衡算

- 例 2-1 混酸过程——电解质过程数据包应用 53
- 例 2-2 蒸汽分配——硫磺回收装置废热锅炉产生水蒸气分流 57
- 例 2-3 氨气吸收——电解质过程数据包应用 58
- 例 2-4 甲醇汽化热求取 59
- 例 2-5 废热锅炉产汽量——HeatX 模块应用 60
- 例 2-6 汽-液-液三相平衡计算——Sensitivity 功能考察相变点

- 温度 61
- 例 2-7 液液平衡计算——Design Specifications 功能调整溶剂用量 63
- 例 2-8 液固平衡计算——Sensitivity 功能调整溶剂用量 68
- 例 2-9 气固平衡计算——Design Specifications 功能调整热空气用量 70
- 例 2-10 固液非平衡分离——Sep 模块应用 74
- 例 2-11 固液机械分离——HyCyc 模块应用 75
- 例 2-12 萃取精馏与溶剂再生 (分离甲苯与正庚烷) ——RadFrac 模块串联使用 78
- 例 2-13 多模块联合分离烷烃混合物——DesignSpecifications 功能调整釜液流率 81
- 例 2-14 甲醇空气氧化制甲醛——RStoic 模块应用 84
- 例 2-15 甲烷水蒸气重整制氢——Calculator + Sensitivity 功能的综合使用 86
- 例 2-16 非均相反应精馏合成乙酸丁酯——相图分析 88
- 例 2-17 硫磺回收——Claus + SCOT 硫磺回收燃烧炉 (废热锅炉) 计算 92
- 例 2-18 萃取精馏与溶剂回收组合流程——Calculator 功能应用 96
- 例 2-19 均相共沸物的分离——变压精馏

	分离乙醇和苯.....	99
例 2-20	非均相共沸物的分离——丁醇脱水.....	103
例 2-21	二氯乙烷裂解制氯乙烯（循环流）——Fortran 语言应用 ...	105
例 2-22	原油初馏塔模拟计算——Petro-Frac 模块应用	108

第 3 章 节能分离过程

例 3-1	乙醇与苯双塔双压精馏系统内冷热流体换热	122
例 3-2	乙醇与苯双塔双压精馏系统的热集成网络分析	125
例 3-3	汽提蒸汽优化配置——Optimization 优化功能应用	134
例 3-4	丙烯腈装置废水双效蒸发	139
例 3-5	甲醇-水溶液双效精馏——Fortran 语言应用	142
例 3-6	丙烯-丙烷热泵精馏	149
例 3-7	乙醇-正丙醇-正丁醇热偶精馏——分壁塔模块应用	153
例 3-8	氯乙烯精馏塔中间再沸器设置（总能耗不变，降低蒸汽消耗总量，降低蒸汽成本）	159
例 3-9	脱氯化氢精馏塔中间冷凝器设置（总理论级数不变，能耗略有	

增加，降低冷却介质品位，降低冷却成本）..... 163

第 4 章 设备工艺计算

例 4-1	芳烃分离工艺中的苯塔设备计算	175
例 4-2	芳烃分离工艺中的苯塔 AEL 型冷凝器计算	182
例 4-3	芳烃分离工艺中的苯塔再沸器计算	190
例 4-4	合成乙酸乙酯的釜式反应器工艺计算	199
例 4-5	环戊二烯二聚反应应用管式反应器工艺计算	203
例 4-6	输送液态苯用离心泵工艺计算	209
例 4-7	循环气压缩机工艺计算	211

第 5 章 工业装置流程模拟

例 5-1	环己烷、环己酮、环己醇混合物三效精馏流程模拟	218
例 5-2	75kt/h 丙烯腈工艺废水四效蒸发流程模拟	232
例 5-3	300kt/a 规模硫磺制酸装置的工艺模拟	238
例 5-4	从 100kt/a 抽余 C ₄ 烃中制取高纯度异丁烯	248

习题目录

第1章 习题	43
1-1 估算乙基溶纤剂的物性	43
1-2 估算异丁基醇的物性	43
1-3 估算三乙基苯的物性	43
1-4 估算甲基异丁基酮合成反应器中 流出的物料性质	44
1-5 计算湿空气的扩散系数、Prandtl 数、Schmidt 数	44
1-6 求 80% 乙酸乙酯 (A) 和 20% 乙醇 (E) 物流的泡点温度和露 点温度	44
1-7 求甲基乙基酮 (MEK) 与水共沸 相图	44
1-8 求丙酮-甲醇-氯仿三元物系在 常压下的共沸温度与共沸组成	44
1-9 求丙酮-乙醇-氯仿三元物系在 63.2°C 下的共沸压力与共沸组成	44
1-10 乙酸乙酯与乙醇二元体系等压汽 液平衡数据回归	44
1-11 异丙醚~1-丙醇~水三元体系液 液相平衡数据回归	45
第2章 习题	114
2-1 三种无机酸的混酸计算	114
2-2 两种硫酸的混酸计算	114
2-3 75% 的浓硫酸稀释计算	114
2-4 化工厂蒸汽管网计算	114
2-5 液氨汽化的供热速率计算	115
2-6 分配器应用	115
2-7 干空气增湿计算	115
2-8 氨合成气部分冷凝热计算	115
2-9 异丙醚作萃取剂从醋酸水溶液中 萃取醋酸——DECANTER 模块 应用	115
2-10 30% 的硫酸钠水溶液冷却结 晶——Crystall 模块应用	115
2-11 氯化钠的溶解度计算	115
2-12 硫酸吸收空气中的水汽计算	116
2-13 乙醇、丙醇、丁醇、水分离—— SEP 模块应用	116
2-14 反渗透膜制备淡水——SEP 模块 应用	116
2-15 煤气除尘——Cyclone 模块 应用	116
2-16 <i>n</i> -辛烷-水气-液-液三相平衡 计算——Sensitivity 考察相变点 温度	116
2-17 用苯酚萃取精馏分离甲苯、甲基 环己烷	116
2-18 乙醇-正丙醇-正丁醇混合物两 塔串联精馏分离	117
2-19 氨氧化反应器——RStoic 模块 应用	117
2-20 计算甲烷气与空气燃烧最高 温度	117
2-21 反应精馏合成乙酸丁酯 (双塔) ..	117
2-22 Claus 两级反应器串联计算	118
2-23 用苯酚萃取精馏分离甲苯-甲基 环己烷 (溶剂循环)	118
2-24 用水为溶剂萃取精馏分离丙酮- 甲醇二元混合物	119
2-25 苯为共沸剂分离异丙醇-水混	

合物	119	3-13	用分壁塔分离提纯 MTBE	172	
2-26	反应精馏合成 MTBE	119	3-14	含中间再沸器的苯酚溶剂再生塔模拟计算	172
2-27	苯-甲苯分离 (进料位置、灵敏板、原料变化)	120	3-15	含中间冷凝器与中间再沸器的乙烯精馏塔模拟计算	172
2-28	原油初馏塔加常压精馏塔模拟计算	120			
第 3 章 习题	167	第 4 章 习题	212		
3-1	芳烃双塔分离, 求各自的最优再沸器能耗	167	4-1	芳烃分离工艺中的甲苯塔设备计算	212
3-2	以苯酚为萃取溶剂分离等摩尔甲苯、甲基环己烷的混合物, 物料换热	167	4-2	芳烃分离工艺中的甲苯塔冷凝器计算	213
3-3	酸性废水用水蒸气汽提	168	4-3	芳烃分离工艺中的甲苯塔再沸器计算	213
3-4	丙烯腈装置废水三效蒸发	168	4-4	以甲醛和氨为原料合成乌洛托品的釜式反应器计算	213
3-5	Claus 尾气吸收再生模拟 (循环流)	168	4-5	以丁二烯和乙烯为原料合成环己烯的管式反应器计算	213
3-6	甲醇-水分离 (双效并流精馏)	169	4-6	甲烷高温偶联脱氢制乙烯的管式反应器计算	213
3-7	苯与乙醇双效精馏流程	169	4-7	水泵选型计算	214
3-8	烷烃混合物三塔双效精馏流程	169	4-8	压缩机选型计算	214
3-9	丙烯-丙烷分离 (塔顶气体压缩式热泵精馏)	170	4-9	乙烯丙烯分离用筛板塔设备计算	214
3-10	醚后 C ₄ 烃双塔精密精馏 (塔顶气体压缩式热泵精馏)	171	4-10	乙苯脱氢用管式反应器计算	214
3-11	分离丙醇-丁醇-水混合物 (三相精馏)	171	第 5 章 习题	258	
3-12	废水双塔汽提脱 H ₂ S、脱 NH ₃ , 求两塔理论塔板数、进料位置、能耗	172	5-1	醚后混合 C ₄ 烃分离 1-丁烯全流程模拟	258
			5-2	天然气制甲醇全流程模拟	261

第1章

化工物性数据和相平衡数据的查询与估算

化工物性数据与相平衡数据是化工工艺计算的依据。在化工设计过程中,物性数据与相平衡数据的查询与估算是耗时最多的工作。能够熟练地查找、分析、处理、应用所需数据是化工专业人员的基本功之一。在实际化工计算中,涉及物性数据和相平衡数据的计算占有相当大的比重,有时甚至是整个计算过程的关键步骤。

化工物性数据内容很多,数量庞大,纯物质的物性数据一般可以归纳为以下5类:

- (1) 基础物性 如常压沸点、临界温度、临界压力、临界体积、临界压缩因子、偏心因子、三相点、熔点(或凝固点)等不随温度变化的性质,此类数据一般只要知道物质的名称就可查得;
- (2) 参考状态性质 如标准生成自由焓、标准生成自由能;
- (3) 与温度相关的热力学性质 如蒸气压、汽化热、液体摩尔体积、焓、熵、热容等;
- (4) 化学反应与热化学数据 如反应热、生成热、燃烧热、反应速率常数、活化能、化学平衡常数等;
- (5) 与温度相关的传递性质 如等张比容、液体黏度、液体热导率、表面张力、扩散系数等。

以上(2)~(5)类数据必须知道系统的温度、压力,然后通过计算(函数关系式)或插值(列表函数)才能得到。

混合物的物性数据往往需要在纯物质物性数据的基础上由合适的混合规则计算得到。

化工相平衡数据有两个来源,一是通过相平衡实验测定获得数据,经过上百年的积累,已经有了相当数量的气液、汽液、液液、固液、气固等相平衡的实验数据,一般都以列表函数的形式存在;二是通过合适的状态方程进行计算,状态方程的参数一般由相平衡实验数据回归得到,且各种状态方程对物系类型有一定的适应性,需要使用者能够正确选择使用。

1.1 化工物性数据的查询

1.1.1 从文献中查找

前人对各种常见物质的物性数据已经进行了系统的归纳总结,一般以公式、表格或图形的形式表示,可以从有关化学化工物性数据的专著、手册、百科全书等工具书中查询。涉及化学化工领域的工具书种类繁多,有综合性的,也有专业性的,以下是对几种常用工具书进行介绍。

1.1.1.1 中文工具书

- (1)《化工辞典》 王箴主编,化学工业出版社出版。中型化工专业工具书,1969年首

次出版，目前最新版本是 2000 年出的第 4 版，共收词 16000 余条。正文词条为汉语拼音字母顺序排列，有英文名称和英文索引。该辞典收词全面、新颖、实用，释义科学、准确、简明、规范，检索查阅方便，长期以来深受广大读者青睐。

(2)《石油化工基础数据手册》 卢焕章主编，化学工业出版社 1982 年出版。本手册分为两篇，第一篇介绍各种化工介质物理、化学性质和数据的计算方法，第二篇则是将 387 个化合物的各种数据列成表格，以供查阅。这些数据包括临界参数及其在一定温度、压力范围内的饱和蒸气压、汽化热、热容、密度、黏度、热导率、表面张力、压缩因子、偏心因子等 16 个物理参数。

1993 年，化学工业出版社出版了由马沛生主编的《石油化工基础数据手册（续编）》，本续编包括 552 个新化合物的 21 项物性。全书分为三个部分，第一部分介绍物性数据的估算方法，第二部分给出了 552 个化合物的物性数据，第三部分是索引与附表。

(3)《化学工程手册》 《化学工程手册》编辑委员会编，化学工业出版社出版。第 1 版共 26 篇，于 1980~1989 年按篇分册出版，1989 年又分 6 卷合订出版。第 2 版由时钧、汪家鼎、余国琮、陈敏恒主编，分上、下两册于 1996 年出版，篇幅较第 1 版做了压缩，共 29 篇，另有附录及索引。本手册第 2 版的主要目录见表 1-1。本手册总结了中国化学工程学科科研、设计和生产领域的成果，也介绍了世界先进技术和发展趋势。是一部介绍化学工程原理的实际运用和化学工程操作数据的经典性工具书。它提供简明的理论，实用的设计计算方法，丰富的设备性能数据和图表。

表 1-1 《化学工程手册》第 2 版主要目录

序 号	篇 名	序 号	篇 名
第 1 篇	化工基础数据	第 18 篇	吸附及离子交换
第 2 篇	化工热力学	第 19 篇	膜过程
第 3 篇	流体流动	第 20 篇	颗粒及颗粒系统
第 4 篇	流体输送	第 21 篇	流态化
第 5 篇	搅拌及混合	第 22 篇	液固分离
第 6 篇	传热及传热设备	第 23 篇	气固分离
第 7 篇	工业炉	第 24 篇	粉碎、分级及团聚
第 8 篇	制冷	第 25 篇	反应动力学及反应器
第 9 篇	蒸发	第 26 篇	生物化工
第 10 篇	结晶	第 27 篇	过程系统工程
第 11 篇	传质	第 28 篇	过程控制
第 12 篇	气体吸收	第 29 篇	污染治理
第 13 篇	蒸馏	附录一	常用单位换算表
第 14 篇	气液传质设备	附录二	化工常用数学方法
第 15 篇	萃取及浸取	附录三	常用材料表
第 16 篇	增湿、减湿及水冷却		索引
第 17 篇	干燥		

(4)《化工百科全书》 化学工业出版社 1991~1998 年出版，正文 19 卷，索引 1 卷，全书 4800 多万字，是一套全面介绍化学工艺各分支的主要理论知识和实践成果，并反映化学工业及其相关工业的技术现状与发展趋势的大型专业性百科全书，由陈冠荣等 4 位院士主编，全国 1800 多名知名专家、学者和高级工程技术人员历时 10 年编撰完成。该全书较全面、准确地反映了化工领域最新的技术和发展趋势，覆盖内容齐全完备，所涉及的专业和学科十分广泛，包括无机化工、基本有机化工、精细化工、高分子化工、染料、农药、橡胶、纤维、

涂料、造纸和制革、摄影和感光材料、日用化工、油脂和食品、石油、材料科学和工程、半导体、电子和信息材料、冶金、纺织和印染、生物技术、化学工程、化工机械、化工仪表和自动化、电子计算机技术、分析方法、安全和工业卫生、环境保护以及化学和物理的一些基本问题，所收录主词条达 800 余条，按条目标题的汉语拼音顺序编排，索引卷包括 1~19 卷总目录、作者索引、汉语拼音检字表、笔画检字表、主题索引、主题英文索引等，方便读者检索，该全书主要目录见表 1-2。

表 1-2 《化工百科全书》主要目录

序 号	卷 名	序 号	卷 名
第 1 卷	铜系元素和铜系后元素~丙烯酰胺聚合物	第 11 卷	氯代烃~模具
第 2 卷	玻璃~氮化物	第 12 卷	木材和林产化学品~前列腺素
第 3 卷	刀具材料~发电	第 13 卷	羟基苯甲醛~山梨酸
第 4 卷	发光材料~氟	第 14 卷	商标~水
第 5 卷	氟化合物~工业溶剂	第 15 卷	水产养殖~天然树脂
第 6 卷	功能性色素~合成气化学	第 16 卷	天然药物~无机过氧化物和过氧化物
第 7 卷	核能技术~计算机技术	第 17 卷	无机聚合物~心血管疾病药物
第 8 卷	计算机控制系统~聚硅氧烷	第 18 卷	锌和锌合金~硬质合金
第 9 卷	聚合机理和方法~空间化学	第 19 卷	油墨~X 射线技术
第 10 卷	空气调节~氯代醇	第 20 卷	索引

这部百科全书的使用价值主要体现在下列几方面：一是使读者获取完整、系统的化工知识，当需要有关开发、产品制造和应用领域某一专业知识时，可查阅此书；二是带着具体问题可查到成熟、稳定、可靠、先进的性能数据、生产工艺流程和工艺参数，产品规格指标、毒性与安全、技术经济统计、用途和应用等实用性技术资料；三是主词条按照汉语拼音顺序排列，便于查阅检索，同时主词条下列出参见条目，便于读者检索相关资料。

1.1.1.2 外文工具书

(1) “Perry’s Chemical Engineer’s Handbook” 美国 McGraw-Hill 公司出版的一部关于化学工程的权威性工具书。该手册 1934 年首次出版，并随着科学技术的发展不断更新，至 2008 年已经出版了 8 个版本。手册中包含大量的化工信息和数据，包括化工基本原理、基础数据、化工工艺、化工设备和计算机应用，该手册第 8 版的主要目录见表 1-3。在基础数据部分，包含各种物质的物理和化学数据、临界常数、热力学性质、传递性质、热学性质、安全性质等各种数据表和图。

表 1-3 Perry 化工手册第 8 版主要目录

序 号	篇 名	序 号	篇 名
第 1 篇	转换系数与数学符号	第 3 篇	数学
第 2 篇	物理与化学数据	第 4 篇	热力学
第 5 篇	热量与质量传递	第 16 篇	吸附与离子交换
第 6 篇	流体与颗粒动力学	第 17 篇	气固操作与设备
第 7 篇	反应动力学	第 18 篇	液固操作与设备
第 8 篇	过程控制	第 19 篇	反应器
第 9 篇	过程经济	第 20 篇	非传统分离过程
第 10 篇	流体输送与贮存	第 21 篇	固固过程与设备
第 11 篇	传热设备	第 22 篇	废物处理
第 12 篇	湿度测定、蒸发冷却与固体干燥	第 23 篇	过程安全
第 13 篇	精馏	第 24 篇	能源、转化与利用
第 14 篇	精馏、气体吸收与相分离设备	第 25 篇	建筑材料
第 15 篇	液液萃取过程与设备		索引

(2) “CRC Handbook of Chemistry and Physics” 美国 CRC Press 公司出版的一部著名的化学和物理学科的实用工具书, 其中含有约 20000 种物质的准确、可靠和最新的化学物理数据, 一直是全世界化学家、物理学家和工程师们不可替代的工具书。第 1 版于 1913 年问世, 此后几乎逐年进行修订再版, 后来又改为每两年再版一次, 内容不断扩充更新。手册中的数据都经由各领域专家认真评估, 质量保证始终放在首位, 数据资源都做了详细记录, 每年更新, 使手册能够及时添加新数据。目前最新的版本为 2012 年出版的第 92 版(网络版), 其主要目录见表 1-4。

表 1-4 CRC 化学与物理手册 2012 年第 92 版(网络版) 主要目录

序 号	篇 名	序 号	篇 名
第 1 篇	基础常数、一次与转换系数	第 11 篇	核与粒子物理学
第 2 篇	符号、术语与命名	第 12 篇	固体性质
第 3 篇	有机化合物的物理常数	第 13 篇	聚合物性质
第 4 篇	元素、无机化合物的限制	第 14 篇	地球物理学、天文学与声学
第 5 篇	热力学、电化学与动力学	第 15 篇	实验室实用数据
第 6 篇	流体性质	第 16 篇	健康与安全信息
第 7 篇	生物化学	第 17 篇	数学用表
第 8 篇	分析化学	第 18 篇	物理与化学数据来源文献
第 9 篇	分子结构与光谱学	第 19 篇	早期版本表格
第 10 篇	原子、分子与光学物理	第 20 篇	索引

(3) “Lange’s Chemistry Handbook” 美国 McGraw-Hill 公司出版, 1934 年开始出版。第 1~10 版由 N.A.Lange 主编, 第 11~15 版由 J.A.Dean 主编。目前最新版本是 2004 年出版的第 16 版, 由 J.G. Speight 主编。本书是一部资料齐全、数据翔实、使用方便、供化学及相关学科使用的单卷式化学数据手册, 在国际上享有盛誉, 一直受到各国化学工作者的重视和欢迎。第 16 版中包含约 4400 种有机化合物、1400 种无机化合物的物性数据。全书共分 4 个部分, 分别是无机化合物数据、有机化合物数据、光谱学数据、通用信息与转换表格, 每部分前面列出详细目录, 全书有索引, 便于查询。

(4) “Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology” 美国 John Wiley & Sons Inc 公司出版。该书第 1 版于 1947~1960 年出版, 含正编 15 卷加两个补编。此后版本不断更新, 目前最新版为第 5 版, 2004~2007 年出版, 共 26 卷加 1 卷补编。该书是一部具有重要参考价值的大型化工参考工具书, 主要介绍各种化工产品的性质、制法、较新的经济资料、分析与规格、毒性与安全以及用途等有关内容。对化学化工的基本原理、化工单元操作和流程等问题进行了探讨, 并提供了化学领域的最具综合性的参考文献, 涵盖了整个化工技术范畴, 包括基本的化学信息以及应用卫生和安全内涵。全书以化学物质(一种化合物或一类化合物)、材料、化工过程等主题词为条目, 分别进行详细论述。本书检索方法较为简便, 主要利用各卷的目录和累积主题词索引进行检索。对于那些未设标题的混合物, 利用索引可直接查到它的有关内容的卷页号。

(5) “DECHEMA Chemistry Data Series” 德国化工与生物技术学会(DECHEMA)编辑出版的规模宏大的系列化学数据手册。该系列手册中数据重点是化合物和混合物, 尤其是流体相态的热物理性质的数据, 包括汽液相平衡、液液相平衡、固液相平衡、临界性质、活度系数、混合物热导率及黏度、电解质相平衡及相图、聚合物溶液数据和大分子化合物溶解度及相关性质等。涵盖了 36500 个化合物和 124000 个混合物, 且这些数据均经过分析评估, 为化工工程师的工程设计和技术开发提供不可或缺的依据。该系列手册从 1977 年开始出版, 目

前已经出版了 13 卷, 各卷内容见表 1-5。

表 1-5 DECHEMA 系列化学数据手册卷名

卷 号	卷 名	卷 号	卷 名
I	汽液平衡数据大全	IX	无限稀溶液的活度系数
II	纯物质的临界数据	X	流体混合物的热导率与黏度数据
III	混合热数据大全	XI	电解质溶液的相平衡与相图
IV	选择化合物和二元混合物的推荐数据	XII	电解质数据大全
V	液液平衡数据大全	XIV	聚合物溶液数据大全
VII	低沸点物质混合物的汽液平衡	XV	大而复杂化学品的溶解度和相关性质
VIII	固液平衡数据大全		

1.1.2 从 Aspen Plus 软件数据库中查找

图书馆内关于化工物性数据的专著、手册、图册、教材琳琅满目, 对于新加入化工领域的学生来说, 查找物性数据往往耗时很多, 而使用大型化工流程模拟软件查找、计算、估算化工物性数据, 则为他们提供了一条查找物性数据的快捷通道。即使是经验丰富的化工工程师, 掌握软件的物性数据查找、估算、计算功能, 也会对他们的设计工作提供一个事半功倍的利器, 大大提高工作效率, 成为他们设计工作中爱不释手的有力工具。

Aspen Plus 软件自带的数据库称为系统数据库, 其中含有大量的纯物质和混合物, 可被方便地查询、调用。一般而言, 从软件中查询得到的纯物质的物性数据与手册中的数据基本一致, 如果有差异, 应以手册中的数据为准。

系统数据库是 Aspen Plus 的一部分, 并与 Aspen Plus 一起同时被安装。根据数据类型不同, 物性数据被放置在纯组分数据库 (PURECOMP)、固体数据库 (SOLIDS)、水溶液数据库 (AQUEOUS)、无机物数据库 (INORGANIC)、二元混合物交互作用参数数据库 (BINARY)、燃烧热数据库 (COMBUST) 等子数据库中。

系统数据库适用于每一个 Aspen Plus 程序的运行, 物性参数会自动从各数据库中检索出来。使用者可以修改系统数据库来添加自己的组分或参数, 但不鼓励这样做。当使用者有大量的数据要用于 Aspen Plus 中时, 可用内置数据库来代替系统数据库。当某种数据不是供所有的 Aspen Plus 用户所使用时, 可以使用用户数据库。在数据的准确性有问题或数据具有专有性质时, 建议创建用户数据库。

Aspen Plus 系统数据库的概况:

(1) PURECOMP 数据库 最主要的纯组分数性数据库, 包含 1800 种以上纯组分的物性参数。主要纯组分数数据库的内容是在不断更新扩展和改进的, 因此从一个版本到下一个版本的 Aspen Plus 软件中某个参数值可能改变。如果使用更新的数据库进行模拟计算, 可能会引起模拟结果的不同。

新版本的 Aspen Plus 软件数据库具有向上兼容性, 其中纯组分数数据库以版本号命名。使用者可以采用新版本 Aspen Plus 软件中的旧版本数据库进行模拟, 以得到与以前版本相同的模拟结果。例如 8.5-6 版的纯组分数数据库称为 PURE856, 9.3 版的纯组分数数据库称为 PURE93, V7.2 版的纯组分数数据库称为 PURE24。

(2) AQUEOUS 数据库 包括 900 种离子化合物的参数, 用于电解质溶液的计算。关键参数有: 水合热、无限稀释状态下的吉布斯生成自由能以及无限稀释状态下的水合相热容, 该数据库可以向上兼容。

(3) INORGANIC 数据库 包括大约 2450 个组分(大多数是无机物)的热化学数据,关键数据是焓、熵、吉布斯自由能和热容关联式系数。对于给出的一个组分,可以有大量的固相、一个液相和理想气相的数据。相同的参数集可用于计算给定的温度范围之内的一个给定相态的焓、熵、吉布斯自由能和热容。

INORGANIC 数据库中的焓、熵和吉布斯自由能是这些组分在 25℃、101325Pa (1atm) 下的标准相态的数值。

(4) SOLIDS 数据库 包括 3314 个固体组分的参数,该数据库用于固体和电解质应用,该数据库大部分被 INORGANIC 替代了,但它对于电解质应用来说仍然是必要的。

(5) BINARY 数据库 为 WILSON、NRTL 和 UNIQUAC 等方程提供二元混合物的交互作用参数,包含 3600 套以上二元汽液平衡、液液平衡体系的交互作用参数,1600 套以上汽液平衡体系的亨利系数。

(6) COMBUST 数据库 COMBUST 数据库是一个用于高温气相计算的专用数据库,它包括在燃烧产品中发现的 59 个典型组分的参数和自由基。纯组分理想气体热容(CPIG)由 JANAF 表中的数据决定,温度高达 6000K (JANAF 热化学表)。需要注意的是,ASPENPCD 和 PURECOMP 中的参数在 1500K 以上时,计算结果通常不够准确。

COMBUST 数据库只能用于理想气体计算(IDEAL 选项集)和下列单元操作模型:混合器(MIXER)、分配器(FSPLIT, SEP, SEP2)、换热器(HEATER, HEATX, MHEATX)、反应器(RSTOIC, RYIELD, REQUIL, RGIBBS, RCSTR, RPLUG, RBATCH)、压缩机(COMPR, MCOMPR)、流股复制器(DUPL 和 MULT)等。

了解软件数据库的内容与功能,为的是在化工设计过程中应用。在工艺设计之初,大量时间被用于查找物性数据。化工模拟软件的普及,为物性数据查找提供了极大的便利。

1.1.3 物性查询举例

例 1-1 查询硫化氢和硫磺的物性。

为保护环境,工业废气中的硫化氢都采用 CLAUS 工艺转化为液态硫磺进行回收。请从 Aspen Plus 软件数据库中查询硫化氢和硫磺的全部纯组分的物性。

解 步骤 1: 双击 Aspen Plus 软件用户界面图标,开启软件计算程序。软件弹出开启模式询问窗口,选择“Template”模板开启,如图 1-1 所示。单击“OK”按钮,进入选择计量单位集、选择计算模式窗口。选择“General with Metric Units”公制计量单位模板,默认计算模式(Run Type)为“Flowsheet”,如图 1-2 所示。

步骤 2: 全局性参数设置。从下拉菜单“DATA”中单击“Setup”子目录,启动数据浏览器窗口。在“Global”页的程序名“Title”栏填入程序名称。对于 11.1 版本软件,需要在“Accounting”页中的“User name”栏填入用户账号,可填入任意符号。对于 V7.2 以后版本的软件,可以不填写用户账号。

选择计算程序的计量单位集。在“Units of measurement | Input data”栏目中选择“SI-CBAR”计量单位集。在“Global settings | Ambient pressure”栏目中把大气压改为 101.325kPa,如图 1-3 所示。