



全国高等院校化工类专业规划教材

化工计算

主 编 杜 军

副主编 彭海龙 黄 宽 陈 扬



科学出版社

全国高等院校化工类专业规划教材

化 工 计 算

主 编 杜 军

副主编 彭海龙 黄 宽 陈 扬

南昌大学本科教材资助项目



科 学 出 版 社

北 京

内 容 简 介

本书按照化工工艺设计的基本要求,系统讲述了反应过程和非反应过程的物料衡算、能量衡算等化工工艺计算问题,以及运用 Aspen 模拟软件进行复杂化工过程模拟计算、优化计算和模拟运行。本书共分两部分:第一部分为常规的物料衡算和能量衡算,包括第 1~4 章,分别为绪论、物料衡算、能量衡算、过程的物料及能量衡算;第二部分为 Aspen 模拟软件在化工过程中的模拟计算和优化计算的应用,以 Aspen Plus V8.4 为模拟软件,结合实例介绍了 Aspen 模拟软件的操作步骤与应用技巧,包括第 5~8 章,分别为 Aspen Plus 软件入门、换热器模拟、塔设备模拟和反应器单元模拟。

本书可作为高等学校化学工程与工艺专业本科生和研究生的教学用书,也可供从事石油、化学和热能等领域的教师、研究生和工程技术人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

化工计算/杜军主编. —北京:科学出版社, 2019.8

全国高等院校化工类专业规划教材

ISBN 978-7-03-061625-8

I. ①化… II. ①杜… III. ①化工计算-高等学校-教材 IV. ①TQ015

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2019)第 115104 号

责任编辑:陈雅娴/责任校对:何艳萍

责任印制:张 伟/封面设计:迷底书装

科学出版社 出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

北京中石油彩色印刷有限责任公司 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2019 年 8 月第 一 版 开本:720×1000 B5

2019 年 8 月第一次印刷 印张:16

字数:338 000

定价:59.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换)

前 言

化工计算是高等学校化工类专业所开设的专业课之一，是一门理论联系实际、应用性较强的课程。随着化学工业与计算机技术的快速发展，先进的模拟软件在化工装备与工艺的模拟运行、设计优化的计算过程中得到了广泛应用，化工计算的人工智能化发展也在不断地显现出来。目前结合模拟计算软件学习的化工计算类教材几乎空白，使得化工类专业学生的学习明显落后于时代发展的需要，因此编写面向新时代、适应新发展的化工计算教材显得十分必要。

本书按照化工专业技术人员所必备的技能——化工工艺设计的基本要求，系统讲述了反应过程和非反应过程的物料衡算、能量衡算等化工工艺计算问题，以及运用 Aspen 模拟软件进行复杂化工过程模拟计算、优化计算和模拟运行。通过实例的讲解，把基础知识、解题方法和计算技巧融合在一起，以帮助学生提高解决实际工艺计算问题的能力，为化工类专业学生走上工作岗位后能较快胜任化工设计打下良好的技能基础。这对促进学生的专业学习、适应新时代化学工业的发展有明显的促进作用。

本书共分两部分。第一部分为常规的物料衡算和能量衡算，包括第 1~4 章，第 1 章是绪论，第 2 章和第 3 章分别介绍了物料衡算和能量衡算的基本方法，这是第 4 章过程的物料与能量衡算的基础。第二部分为 Aspen 模拟软件在化工过程中的模拟计算和优化计算的应用，包括第 5~8 章，第 5 章是 Aspen 模拟软件的使用介绍，第 6、7、8 章分别介绍了换热器、塔设备和反应器的模拟计算和模拟设计。本书是热力学和传质过程、分离工程、反应工程间的联系纽带。

本书的第 1、5 章由杜军执笔，第 2、3 章由黄宽执笔，第 4、6 章由陈扬执笔，第 7、8 章由彭海龙执笔。

由于编者水平有限，虽做了一些努力，但书中难免有取材不妥、叙述不清之处。希望读者指正，以便再版时修正，编者先致以深切的谢意。

编 者

2019 年 4 月

科学出版社 高等教育出版中心

教学支持说明

科学出版社高等教育出版中心为了对教师的教学提供支持，特对教师免费提供本教材的电子课件，以方便教师教学。

获取电子课件的教师需要填写如下情况的调查表，以确保本电子课件仅为任课教师获得，并保证只能用于教学，不得复制传播用于商业用途。否则，科学出版社保留诉诸法律的权利。

微信关注公众号“科学 EDU”



，可在线申请教材课件。也可将本证明签字盖

章、扫描后，发送到 chem@mail.sciencep.com，我们确认销售记录后立即赠送。

如果您对本书有任何意见和建议，也欢迎您告诉我们。意见一旦被采纳，我们将赠送书目，教师可以免费选书一本。

证 明

兹证明_____大学_____学院/_____系第_____学年□上
□下学期开设的课程，采用科学出版社出版的_____ / _____
(书名/作者)作为上课教材。任课教师为_____共_____人，
学生_____个班共_____人。

任课教师需要与本教材配套的电子教案。

电 话：_____

传 真：_____

E-mail: _____

地 址：_____

邮 编：_____

院长/系主任：_____ (签字)

(学院/系办公室章)

____年__月__日

目 录

前言

第一部分 物料与能量衡算

第 1 章 绪论	3
1.1 物料衡算及其理论依据	3
1.1.1 质量守恒定律	3
1.1.2 物料衡算的基本方程式	4
1.1.3 物料衡算的基本步骤	4
1.1.4 基准及其选择	5
1.1.5 计量单位	6
1.2 物料平衡的一般分析	6
1.2.1 方程式	7
1.2.2 变量、变量数及系统变量总数	7
1.2.3 设计变量	7
1.2.4 自由度	7
1.2.5 求解方法	8
1.3 常用基本公式	8
第 2 章 物料衡算	13
2.1 无反应过程的物料衡算	13
2.1.1 简单无反应过程的物料衡算	13
2.1.2 多单元系统物料衡算	20
2.2 反应过程的物料衡算	22
2.2.1 直接算法	22
2.2.2 反应速率法	25
2.2.3 元素平衡法	28
2.2.4 化学平衡法	30
2.2.5 结点法	33
2.2.6 联系组分法	34
2.3 带有循环和旁路过程的物料衡算	35
2.3.1 循环过程	35
2.3.2 弛放过程	39

2.3.3 旁路	40
2.4 复杂过程的物料衡算	40
习题	45
第3章 能量衡算	48
3.1 基本概念	48
3.1.1 能量守恒定律	48
3.1.2 能量衡算方程式及其运用	50
3.1.3 热量衡算	50
3.1.4 热力学数据及其运用	51
3.1.5 反应热	57
3.1.6 混合热	59
3.2 能量衡算	60
3.2.1 能量衡算的一般方法	60
3.2.2 无化学反应过程的能量衡算	60
3.2.3 反应过程的能量衡算	65
3.3 焓衡算	71
3.3.1 焓的定义	71
3.3.2 物理焓 E_{xph} 的计算	74
3.3.3 物质的化学焓 E_{xc}	78
3.3.4 焓平衡方程式	79
3.3.5 两种损失与两种效率	82
习题	84
第4章 过程的物料及能量衡算	87
4.1 物料及能量衡算方程式	87
4.1.1 物料衡算方程式	87
4.1.2 能量衡算方程式	87
4.2 简单过程的物料及能量衡算	88
4.3 复杂过程的物料及能量衡算	89
4.3.1 过程分析	89
4.3.2 物料及能量衡算方程联解	91
4.3.3 多单元过程的物料及能量衡算	97
4.4 非稳态过程	101
4.4.1 非稳态过程的物料衡算	101
4.4.2 非稳态过程的能量衡算	105
习题	107

第二部分 Aspen 模拟计算

第 5 章 Aspen Plus 软件入门	111
5.1 Aspen Plus 简介	111
5.2 Aspen Plus 主要功能	112
5.3 Aspen Plus 图形界面	112
5.3.1 Aspen Plus 界面主窗口	112
5.3.2 主要图标功能	113
5.3.3 状态指示符号	113
5.3.4 Aspen Plus 专家系统	114
5.4 Aspen Plus 自带示例文件	114
5.5 Aspen Plus 物性环境	115
5.6 Aspen Plus 模拟环境	120
5.6.1 设置全局规定	120
5.6.2 建立流程图	121
5.6.3 输入物流数据	125
5.6.4 输入模块数据	125
5.7 运行模拟	127
5.8 查看结果	128
5.9 模拟的物性方法选择	130
5.9.1 状态方程法和活度系数法比较	130
5.9.2 常见体系物性方法推荐	131
5.9.3 经验选取	133
5.9.4 使用帮助系统进行选择	134
习题	135
第 6 章 换热器模拟	137
6.1 两股物流换热器简捷设计	139
6.2 两股物流换热器严格设计	144
习题	151
第 7 章 塔设备模拟	152
7.1 简介	152
7.2 精馏塔简捷设计	152
7.3 精馏塔简捷校核	158
7.4 精馏塔严格计算	161
7.5 气体吸收模拟	179
7.6 塔板和填料的设计与校核	184

7.6.1 塔效率	184
7.6.2 塔板和填料的设计与校核	186
习题	191
第8章 反应器单元模拟	192
8.1 化学计量反应器	193
8.2 产率反应器	198
8.3 平衡反应器	201
8.4 吉布斯反应器	203
8.5 化学反应	205
8.6 全混釜反应器	209
8.7 平推流反应器	212
8.8 间歇反应器	217
习题	221
主要参考文献	223
附录	224
附表 1 临界常数和偏心因子	224
附表 2 理想气体热容	226
附表 3 液体热容	227
附表 4 纯组分蒸气压的安托因 (Antione) 公式	229
附表 5 水蒸气热力学性质	231
附表 6 一些物质的热力学函数	239
附表 7 单位换算表	245

第一部分

物料与能量衡算

第1章 绪 论

对于化学工业的专业技术人员来说，新厂建设和老厂技改的化学工程设计是日常性的本职工作，将这方面的全部工程技术工作统称为工厂设计，而其中为实现工艺过程所进行的各项设备和流程的专业设计则称为工艺设计。工艺设计是决定生产过程中能否顺利实现生产和产量达标，评判技术指标是否先进、经济指标是否合理以及工业生产是否可持续发展的关键步骤。

工艺设计的主要内容包括：确定生产工艺、物料衡算、能量衡算、温度和压力范围、原料和产品规格、反应速率、收率和生产周期、设备设计、对公用工程的要求、厂址选择与平面布置、技术经济评价。

显然，物料衡算和能量衡算是工艺设计中最基础的内容。对任一工艺过程来说，无论是生产、开发和设计，还是生产装置和工艺的评估、优化及技改，化工工艺计算都是必不可少的。掌握其基本原理与计算方法，对于化学工业的专业技术人员来说是必备的技能。

化工计算以实例讲授为主，目的是把基础理论、解题方法和计算技巧融汇在一起，在理论与实践之间架起一座桥梁，以提高学生运用所学的基础知识解决实际工艺计算问题的能力；并通过改进分析方法，提高学生计算技巧，以及提高寻查降耗、增产增值的薄弱环节的能力，最终为较快胜任化工工艺设计工作打下良好的技能基础。

为了能熟练地进行计算，必须牢固掌握基本概念、基本原理和基本公式。本章主要介绍物料衡算、量纲和单位、物料平衡的一般分析。

1.1 物料衡算及其理论依据

1.1.1 质量守恒定律

质量守恒定律即在一孤立体系中，不论物质发生何种变化，它的质量始终保持不变(物质的质量不能被创造，也不能被消灭)。

根据爱因斯坦质能互换关系式：

$$\Delta E = \Delta m \cdot c^2 \quad (1-1)$$

对于碳氢化合物的燃烧，每克碳氢化合物燃烧时放出的能量约为 42 kJ，则

$$\frac{\Delta m}{m} = \frac{\Delta E}{c^2} = \frac{42 \times 10^3}{(3 \times 10^8)^2} \times 10^3 = 0.5 \times 10^{-9}$$

即碳氢化合物因燃烧反应而引起的质量减少小于 10 亿分之一，可忽略不计。

对于分离过程，如吸收、蒸馏等单元操作，其能量变化更小。因此，将质量守恒定律运用于化工过程的物料衡算是可行的。

1.1.2 物料衡算的基本方程式

物料衡算即对于生产过程中各种物料量平衡关系的计算，又称为物料平衡计算。

物料衡算是研究某一系统进出物料量及组成变化的方法。根据质量守恒定律，对于人为指定系统有

$$\text{系统的积累} = \text{输入} - \text{输出} + \text{生成} - \text{消耗} \quad (1-2)$$

对于稳态过程，系统的积累为零，则有

$$\text{输入} = \text{输出} - \text{生成} + \text{消耗} \quad (1-3)$$

对于无化学反应的稳态过程，无物质的生成与消耗，则有

$$\text{输入} = \text{输出} \quad (1-4)$$

物料衡算有总物料衡算式、组分衡算式及元素原子衡算式。对于无化学反应或有化学反应的稳态过程，其适用性如表 1-1 所示。

表 1-1 物料衡算形式(稳态过程)

分类	物料衡算形式	无化学反应	有化学反应
总物料衡算式	总质量衡算式	是	是
	总摩尔衡算式	是	否*
组分衡算式	组分质量衡算式	是	否*
	组分摩尔衡算式	是	否*
元素原子衡算式	元素原子质量衡算式	是	是
	元素原子摩尔衡算式	是	是

* 有时平衡式可能符合。

1.1.3 物料衡算的基本步骤

为了在物料衡算时不走弯路或少走弯路，做到计算迅速、结果正确，一般采用如下步骤进行物料衡算：

(1) 画流程示意图(用框图)。

(2) 列出已知数据，包括：①实验室或中试提供的数据及生产装置测定的数据；②查阅有关手册及专业书籍获得的数据；③在工程设计计算允许的范围内推算或假定的数据。

(3) 列出需求解的问题。

(4) 决定衡算系统的边界。

- (5) 写出主、副产品的化学反应方程式。
 - (6) 写出约束条件关系式。
 - (7) 选择合适的计算基准。
 - (8) 列出物料衡算式，与约束条件关系式一起组成方程组，求解未知量。
 - (9) 列出平衡表，并进行核算。
 - (10) 给出结论，并说明题意需求解的问题和计算的误差。
- 如题目或需求解的问题简单，可从简处理。

1.1.4 基准及其选择

1. 基准

基准为解答某一问题所选择的起始条件。在一般的化工工艺计算中，根据过程特点选择的基准大致有如下几种：

(1) 时间基准。①对于连续生产，有 1 s、1 h、1 d、1 a；②对于间歇生产，一般采用一釜或一批料的生产周期作为基准。

(2) 质量基准(固、液相)。一般采用 1 kg、1000 kg，有时采用物质的量(摩尔)作为基准更为方便。

(3) 体积基准(气体物料)。一般采用 1 m^3 。

(4) 干、湿基准。生产中的物料不算水分为干基；生产中的物料算水分为湿基。

2. 计算基准选择

计算基准选择原则是：计算简便和计算误差小。根据过程特点，进行计算基准选择时还应注意以下几点：

(1) 应选择已知变量最多的流股作为计算基准。

(2) 对于液、固系统，常选用单位质量作基准。

(3) 对于气体系统，如环境条件(p 、 T)已定，常选用体积作基准。

(4) 对于连续流动系统，采用单位时间作基准较为方便；而对于间歇体系常采用一釜或一批料的生产周期作基准。

例 1-1 已知丙烷完全燃烧的反应式为 $\text{C}_3\text{H}_8 + 5\text{O}_2 \longrightarrow 3\text{CO}_2 + 4\text{H}_2\text{O}$ 。供给所需空气量的 125% 的空气，求每 100 kmol 燃烧产物需要的空气量。

解法一 丙烷燃烧过程物料计算示意图见图 1-1。直接设 $F_3 = 100 \text{ kmol}$ ，则

$$f = 7 - [2 + (4 + 1)] = 0$$

$$\text{C 衡算式} \quad 3F_1 = F_{34}$$

$$\text{H 衡算式} \quad 8F_1 = 2F_{35}$$

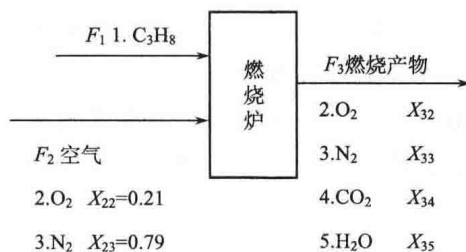


图 1-1 丙烷燃烧过程物料计算示意图

$$\text{O 衡算式 } 0.21F_2 = F_{34} + 0.5F_{35} + F_{32}$$

$$\text{N 衡算式 } 0.79F_2 = 100 - (F_{34} + F_{35} + F_{32})$$

$$\text{解得: } F_1 = 3.1484 \text{ kmol}; F_2 = 93.7023 \text{ kmol}$$

$$F_{34} = 9.4453 \text{ kmol}; F_{35} = 12.5934 \text{ kmol}$$

$$F_{32} = 3.9355 \text{ kmol}$$

解法二 设 $F_1 = 1 \text{ kmol}$, 则

$$F_2 = 5 \times 1.25F_1 / 0.21 = 29.76 \text{ (kmol)}; F_{34} = 3F_1 = 3 \text{ (kmol)}; F_{35} = 4F_1 = 4 \text{ (kmol)}$$

$$F_{32} = 0.25 \times 5 = 1.25 \text{ (kmol)}; F_{33} = 0.79F_2 = 29.76 \times 0.79 = 23.51 \text{ (kmol)}$$

$$F_3 = 3 + 4 + 1.25 + 23.51 = 31.76 \text{ (kmol)}$$

$$\text{所以 } k = 100/F_3 = 3.1486 \text{ (kmol)}; F'_2 = kF_2 = 93.7023 \text{ (kmol)}$$

解法三 设 $F_2 = 1 \text{ kmol}$, 则

$$F_1 = 0.21F_2 / (1.25 \times 5) = 0.0336 \text{ (kmol)}; F_{34} = 3F_1 = 0.1008 \text{ (kmol)}; F_{35} = 4F_1 = 0.1344 \text{ (kmol)}$$

$$F_{32} = 0.2 \times 0.21F_2 = 0.042 \text{ (kmol)}; F_{33} = 0.79F_2 = 0.79 \text{ (kmol)}$$

$$F_3 = 0.1008 + 0.1344 + 0.042 + 0.79 = 1.0672 \text{ (kmol)}$$

$$\text{所以 } k = 100/F_3 = 93.7031; F'_2 = kF_2 = 93.7031 \text{ (kmol)}$$

从上述三种解法可以看出, 第一种解法虽然避免了换算, 但是比第二、三种解法工作量大。如果方程复杂, 则解题工作量更大。因此, 从解题过程看, 第二、三种解法所选的计算基准较恰当。

1.1.5 计量单位

(1) 量纲是指物理量(如长度、质量、温度、加速度等)的基本属性。

(2) 单位是计量用的单元, 如长度用 m、时间用 s 等。

(3) 单位运用的原则: 属于不同量纲的单位, 不能进行加减乘除等数学运算; 相同量纲而不同单位要运算时, 需先将其转换成相同单位, 才能进行加减乘除等数学运算。

(4) 单位换算常采用“连接单位法”。

1.2 物料平衡的一般分析

物料衡算的任务是利用过程中已知的流量和组成, 通过建立独立的方程式(物料和组分衡算式及约束式), 求解未知的物料流量和组成。物料平衡的一般分析就是对衡算系统的设计变量、方程式及系统变量数值的代数关系进行分析, 以了解系统的确定性。

1.2.1 方程式

物料衡算时可建立的方程式有：

(1) 物料衡算式，包括总物料衡算式、组分衡算式及元素原子衡算式。

(2) 约束式，包括：①每股物料的归一方程($\sum X_i=1$)；②气液或液液平衡方程式($y_i=KX_i$)、溶解度、恒沸组成等；③设备约束式，如两物料流量比、回流比、萃取时的相比等。

注意：物料衡算时可建立的方程式较多，但是在列出的求解方程组中的所有方程都要求是独立的，即求解方程组中的任一方程都不能为其他方程数学运算的结果。例如，某一求解方程组中含有总物料衡算式和全部组分衡算式，则必有一个方程不独立，因为这些方程中的任一方程都为其他衡算方程式数学运算的结果，只有去掉任一方程，其余衡算方程式才是独立方程式。

1.2.2 变量、变量数及系统变量总数

(1) 变量：物料衡算时，可描述系统平衡关系的物理量都称为变量。显然，这些物理量包括物料流量、组分流量和组成。

(2) 变量数：描述系统某一物流状况所需的最少变量的数值(等于其组分数)。

(3) 系统变量总数：为设备各变量数之和。

显然，变量数应是相互独立的。

1.2.3 设计变量

设计变量是指在进行物料衡算之前必须由设计者赋值的变量。

如果系统变量总数为 N_v ，独立方程数为 N_e ，设计变量数为 N_d ，若要依题意列出的方程有解，则下式必成立：

$$N_d = N_v - N_e \quad (1-5)$$

否则就会无解或出现矛盾解。将式(1-5)移项变换为

$$N_e = N_v - N_d \quad (1-6)$$

式(1-6)右边为系统未知变量数，其数值应等于系统独立方程数，此时方程组必有唯一解。

1.2.4 自由度

在研究复杂系统时引入自由度(degree of freedom)概念，对于判断系统的性质是很有益的。某个系统的自由度等于该系统独立物流的变量总数(N_v)减去规定的变量数(设计变量数 N_d)，再减去可能建立的独立物料衡算式数与其他约束关系式数之和(N_e)，即

$$f = N_v - [N_d + (N_{e1} + N_{e2})] \quad (1-7)$$

式中, N_v 为系统变量总数; N_d 为设计变量数; N_{e1} 为系统独立物料衡算式数; N_{e2} 为约束关系式数。

自由度分析是指研究一个系统(或问题)中的独立变量、衡算式和约束式数量之间的代数关系,用以说明系统的确定性。

(1) 当 $f > 0$, 则表明系统不确定, 限制或约束(设计变量数 N_d) 少, 不可能去解所有的未知变量, 有时可能有部分解。

(2) 当 $f < 0$, 则系统限制或约束(设计变量数 N_d) 过多, 各种限制条件之间可能出现矛盾, 而使系统出现矛盾解, 这时一般在求解前酌情去掉多余的(或误差大的)限制条件。

(3) 只有当 $f = 0$ 时, 系统恰好作了正确的规定, 系统各未知变量具有唯一解。

1.2.5 求解方法

对一般的线性或非线性方程, 可用代数法或图解法求解; 对线性方程组可用消去法求解; 对复杂的非线性方程可用牛顿(Newton)法求解。

1.3 常用基本公式

1. 原材料的消耗定额

原材料的消耗定额是评价工艺、生产装置经济合理性的重要指标。对于大多数化学反应过程而言, 原材料的成本占产品成本的 60%~70%。为了确定原材料的消耗定额, 工程师必须对整个工艺有比较全面的了解, 尽量减少生产过程中的消耗量, 还必须对以下概念有清晰的理解。

(1) 理论消耗定额: 工业上按化学反应式的化学计量关系计算所得的消耗定额。

(2) 实际消耗定额: 考虑了工艺过程中的生产损耗及化学反应过程中副反应的消耗量的消耗定额。

2. 工业指标和概念

工业上为了评价和计算常采用一些工业指标和概念, 具体如下。

(1) 限制反应物: 反应物中以最小化学计量存在的反应物。

(2) 过量反应物: 化学计量超过与限制反应物反应的反应物。

$$\text{过量百分数} = \frac{\text{实际过量的反应物摩尔数}}{\text{与限制反应物完全反应所需的反应物摩尔数}} \times 100\% \quad (1-8)$$

(3) 反应完全程度: 用于衡量反应是否进行完全。