

化工软件应用

第一章 绪论



汤吉海
化工学院

1

自我介绍-高雪超

受教育经历:

- 2003-2007 河北工业大学 本科 生物工程
- 2007-2010 华东理工大学 硕士 化学工程
- 2010-2014 昆士兰大学 博士 化学工程

工作经历:

- 2014-2016 中科院宁波材料所 博士后
- 2016-至今 南京工业大学 教师

研究背景: 吸附扩散、膜分离过程、数值和DFT计算

南京工业大学

2

调查 (1)

● 计算机的用途



影音娱乐



沟通交流



电子竞技



信息检索



专业研究

南京工业大学

3

调查 (2)

使用过的软件有哪些？

日常生活

专业学习

南京工业大学

4

化工专业学生需要掌握的计算机软件

Colorado大学化工系本科阶段接触的软件

- Office
- MATCAD
- MATLAB
- MATHEMATICA
- Simulink
- Polymath
- EZ-Solver
- HYSYS
- ASPEN+
- Minitab
- Control Station
- Labview
- Ladsim
- Autocad

University of Texas at Austin

化工系课程中所用计算机软件

- 物料衡算和能量衡算: EZ-Solver, Polymath
- 热力学: Mathcad, Polymath等
- 分离: Aspen
- 过程控制: Matlab, Excel
- 化学反应工程: Polymath, Octave
- 产品与过程设计: Aspen, Hysys, Chemcad, Pro/II
- 统计: JMP, SAS, Minitab

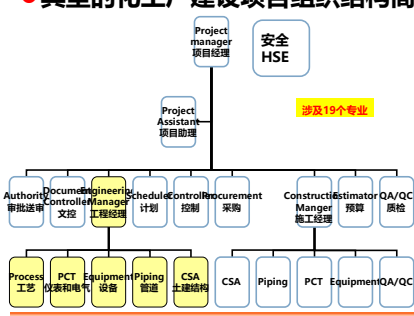
不算Excel, CAD, 一个学生需会用3个以上软件。

南京工业大学

5

化工设计

● 典型的化工厂建设项目组织结构简图

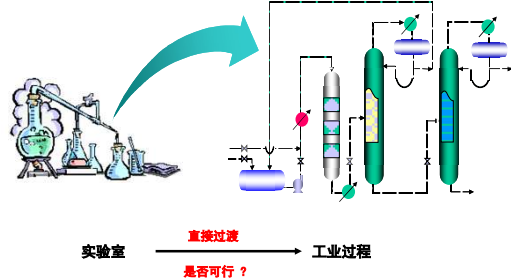


- 总图运输专业
- 工艺专业
- 设备专业
- 结构专业
- 建筑专业
- 仪表专业
- 给排水专业
- 电气专业
- 暖通通风专业
- 机修专业
- 粉体工程专业
- 环境保护专业
- 分析化验专业
- 外管专业
- 电信专业
- 概预算专业
- 技术经济专业
- 消防专业

南京工业大学

6

化学工程师的工作



南京工业大学

第 7 页

7

化学工程师的工作

●解决的问题:

装置放大

流程设计



●理论基础: (三传一反)

质量传递; 动量传递; 能量传递

化学反应过程

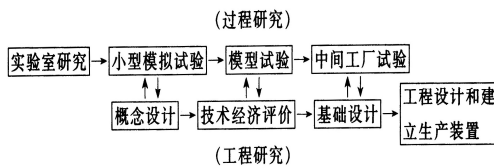
南京工业大学

第 8 页

8

化学工程师如何工作?

●从实验室研究到工业生产



实验室成果能否进行工业化的四个要求:

技术上可靠

经济上可行

生产上安全

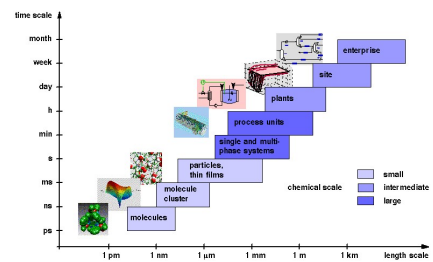
环境上友好

南京工业大学

第 9 页

9

化学工程师面临的多尺度范围



●多尺度控制是化学及过程工程今后的发展方向, 是化学工程学家必须关注的重要问题。

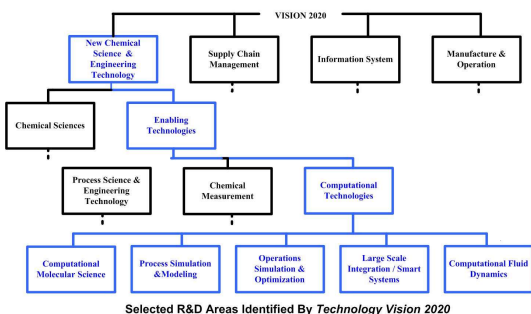
- 欧洲化学工程联合会主席 J.-C. Charpentier 教授 (Chem. Eng. Sci., 2002, 57: 4667-4690)

南京工业大学

第 10 页

10

计算技术成为有效的工程技术



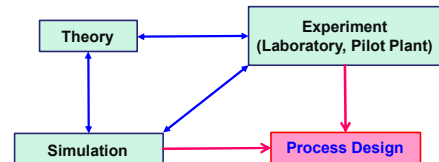
南京工业大学

第 11 页

11

21世纪的化工过程开发与设计模式

●University of Texas的Tomas Edgar教授等在“Vision 2020: Computational Needs of the Chemical Industry”中给出了21世纪的过程工程开发与设计模式



南京工业大学

第 12 页

12

工欲善其事，必先利其器

- My teaching philosophy is that the problems engineers are solving today are usually intractable with analytical methods, but they can be solved with the sophisticated software available today. Thus, every engineer will be solving a problem that no one knows the answer to, and it is the engineer's job to ensure that the problem is posed correctly on paper and in the computer, and it is correctly solved. --

Bruce A. Finlayson (University of Washington)

- 要进行计算，当然离不开计算工具。掌握的计算工具越先进，就越有可能以较少的精力完成较复杂的计算任务。——**朱开宏** (华东理工大学)

南京工业大学

第 13 页

13

课程目标

达成能力	课程设定目标
化学及化工过程的图形化表达	用图形化和可视化方法表达化学结构和工艺流程结构
专业能力	数据定量分析与实证的能力 辨识、规划和解决工程问题的能力
一般能力	数学、计算机、科学和工程知识的应用能力，以及新知识、新理论和新技术的获取能力。
沟通能力	项目设计报告，项目口头表达
使用现代软件工具的能力	Word, Excel, Visio, web site, Aspen Plus, Chemdraw, etc.

南京工业大学

第 14 页

14

课程目标

- 对专业认证中毕业生要求的12条能力标准的支撑

▷ **工程知识**：能够将数学、自然科学、工程基础和化工专业知识用于解决复杂工程问题。

▷ **使用现代工具**：能够针对复杂化工工程问题，开发、选择与使用恰当的技术、资源、现代工程工具和信息技术工具，包括对复杂化工工程问题的预测与模拟，并能够理解其局限性。

南京工业大学

第 15 页

15

本课程内容安排



南京工业大学

第 16 页

16

本课程内容安排



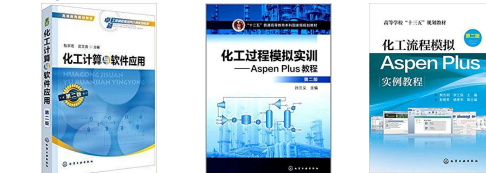
南京工业大学

第 17 页

17

本课程参考教材 (1)

- 包宗宏, 武文良, 化工计算与软件应用 (第二版), 化学工业出版社, 2018年08月, 56元
- 孙兰义, 化工过程模拟实训—Aspen Plus教程(第二版), 化学工业出版社, 2017年10月, 79元
- 熊杰明, 李江保, 化工流程模拟Aspen Plus实例教程 (第二版), 化学工业出版社, 2016年01月, 45元



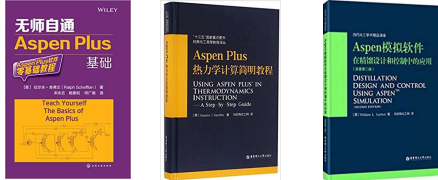
南京工业大学

第 18 页

18

本课程讲义参考教材 (2)

- Ralph Schefflan, 无师自通Aspen Plus基础, 化学工业出版社, 2015年09月, 45元
- Stanley I.Sandier, Aspen Plus热力学计算简明教程, 华东理工大学出版社, 2016年09月, 98元
- William L.Luyben, Aspen模拟软件在精馏设计和控制中的应用 (第二版), 华东理工大学出版社, 2015年06月, 98元



南京工业大学

第 19 页

19

本课程讲义参考教材 (3)

- Bruce A.Finlayson, 化工计算导论(第2版), 华东理工大学出版社, 2014年08月, 51元
- 胡桂香, 化学化工软件应用, 化学工业出版社, 2013年09月, 33.9元
- 崔中伟, 夏丽华, Visio 2016图形设计标准教程, 清华大学出版社, 2017年09月, 41元



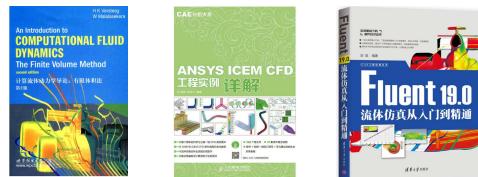
南京工业大学

第 20 页

20

本课程讲义参考教材 (4)

- H K Versteeg, W Malalasekera, 计算流体力学导论: 有限体积法(第2版), 世界图书出版公司, 2010年04月, 54.5元
- 胡坤, 李振北, ANSYS ICEM CFD工程实例详解, 人民邮电出版社, 2014年08月, 45.1元
- 刘斌, Fluent19.0流体仿真从入门到精通, 清华大学出版社, 2019年05月, 69.5元



南京工业大学

第 21 页

21

成绩考核与答疑安排

- 上课地点与时间
 - 课堂教学20学时, 上机12学时 (尽早安排)
 - 3-13周, 周三1-2节, 浦江A楼407
 - 3-11单周, 周四7-8节, 浦江A楼407
- 考核方式:
 - 平时15% (课堂教学、上机、作业)
 - 项目35% (项目综合设计)
 - 考试50% (课程教研组统一命题)
- 办公室
 - 重点实验室CD401, 随时恭候答疑
- 联系方式
 - 电话: 13057602672;
 - E-mail: 396867954@qq.com
 - QQ: 396867954

南京工业大学

第 22 页

22

促进化工专业理论教学

- 目前的教学现状



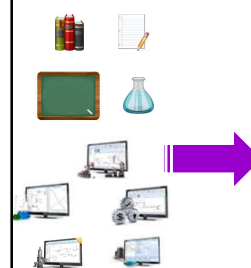
- 没有化工设备 → 难教
- 只能用脑子想 → 难懂
- 实验费用高
- 只学, 不(能)练
- 好想法没处试
- 易忘

南京工业大学

第 23 页

23

促进化工专业理论教学



- 极其有效的演示工具
- 模拟工具是良好的实验室: 干净, 快捷, 便宜
- 随时随地联网操练化工知识
- 拥有与世界顶级专家相同工具
- 随时验证和升华想法
- 演示, 操练, 尝试加深理解所学化工知识

南京工业大学

第 24 页

24

促进化工专业理论教学

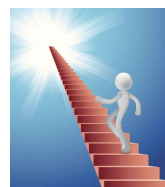


25

学习建议

● 师傅领进门 修行在个人

- ▷ 前路漫漫，任重道远，当慎独，当克己
- ▷ 从细微着手，化难为易、化粗为细
- ▷ 从点滴做起，积少成多，积薄成厚



南京工业大学

第 26 页

26

学习建议

● 混合式学习

- ▷ 学习资源的混合：教材、在线视频、网络资料
- ▷ 学习环境的混合：课堂、机房、自主、团队互助
- ▷ 学习方式的混合：传统课堂学习方式和网络化学习结合

● 网络论坛

- ▷ <https://bbs.mahoupao.com/>
- ▷ <https://bbs.hcbbs.com/>
- ▷ <http://muchong.com/bbs/>



南京工业大学

第 27 页

27

调查课堂作业

使用过的软件有哪些？

日常生活

专业学习

南京工业大学

第 28 页

28

化工软件应用



第二章 ASPEN PLUS入门

29