



中国石油和化学工业行业规划教材

高职高专化工技术类



XIANDAI
HUAGONG
JISUAN

现代化工计算

第二版

○ 徐建良 等编著 ○ 丁志平 主审



化学工业出版社



中国石油和化学工业行业规划教材·高职高专化工技术类

“十二五”江苏省高等学校重点教材 (编号: 2013-1-128)

现代化工计算

第二版

徐建良 等编著
丁志平 主 审



化学工业出版社

· 北 京 ·

《现代化工计算》第二版系高等职业院校应用化工技术类专业化工计算课程教材,讲授 60 学时左右。

全书共分 5 个单元,分别是:数据处理、气体的热力学性质计算、化工过程物料衡算、单一化工过程能量衡算、典型化工过程工艺计算。本书在内容上尽可能做到与生产实际紧密结合,在解决具体定量计算问题时尽可能紧跟科技的发展,采用目前常规软件 Excel 和商用计算软件 ChemCAD 进行计算,提高了计算效率。同时,结合笔者长期的实践经验,介绍了如何运用 Excel/VBA 自行开发自定义函数,并对每一类具体的计算方法和步骤均进行了较为详细的说明。

本书可作为高职类院校化工及相关的专业教材或参考书,也可作为化工技术人员解决化工计算问题的参考书。

图书在版编目 (CIP) 数据

现代化工计算/徐建良等编著. —2 版. —北京:化学工业出版社, 2015. 8

中国石油和化学工业行业规划教材·高职高专化工技术类
“十二五”江苏省高等学校重点教材 (编号: 2013-1-128)
ISBN 978-7-122-24440-6

I. ①现… II. ①徐… III. ①化工计算-高等职业教育-教材 IV. ①TQ015

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2015) 第 140671 号

责任编辑: 窦臻 提岩
责任校对: 宋玮

文字编辑: 孙凤英
装帧设计: 刘剑宁

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: 北京云浩印刷有限责任公司

787mm×1092mm 1/16 印张 18½ 字数 475 千字 2016 年 3 月北京第 2 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: 39.00 元

版权所有 违者必究

前言

随着计算机软硬件的不断更新及我国高职教育、教学改革的不深入，由笔者编著出版的《现代化工计算》也需与时俱进。

本次修订再版的主要原因有以下三个方面：

1. 适应软件版本更新需要

第一版教材中有关 Excel 部分，采用的是 2003 版，目前计算机中已普遍采用 Excel2007 及以上版本，为了适应 Excel 的更新，需对第一版教材中有关 Excel 的应用部分重新进行编写，否则有些应用无法继续，如计算 CO_2 显热的 ExcelVBA 自定义函数，在 Excel2003 版中可命名为 QCO2，但在 Excel2007 以上版中将出错，这是由于 Excel 的升级使该函数名与单元格名重复。

2. 适应当前高职教育、教学改革的需要

(1) 以培养计算技能为重点，修订后的教材紧密围绕计算技能的培养这条主线，将作用相似的任务进行整合。

(2) 点面兼顾，为满足绝大多数高职学生的需要，调整了原教材中理论知识偏深的内容，但同时为了兼顾部分学生的学习需要及今后的发展之需，将与技能配套的部分理论作为知识拓展部分进行系统讲解，同时为兼顾部分优秀学员，将一些具有一定难度的技能作为技能拓展部分内容。

(3) 温故知新，为了更好地遵循技能训练规律、知识学习规律，以及使所学知识、技能更加适应化工生产，更换了原教材部分计算实例，并尽可能采用同一原始任务进行不同的技能训练，不断巩固所学知识和技能。重点任务，增加综合练习部分。

3. 丰富计算软件资源，适应信息化教学需要

经过笔者近 10 年的不断开发，现已开发了各类 ExcelVBA 自定义函数 3 万多个，此次修订将提供 3000 多个自定义函数。为配合 ChemCAD 软件的学习，将提供 8 个自学 ChemCAD 软件的动画文件。同时，为便于开展项目化教学，针对每个学习单元，将重点知识、计算技能凝练成训练任务，每个单元至少提供 1~2 个计算训练任务，全书将提供 8~10 个计算训练任务，每个训练任务提供 50~100 套不同的计算数据。上述文件使用本教材的读者如有需要，可以与化学工业出版社 (cipedu@163.com)，或笔者 (xjl361@163.com) 联系，免费索取。

为满足不同学校及读者对化工计算内容的不同要求，书中拓展内容和加*的任务，使用时可根据实际需要有针对性地进行选择。

全书共分 5 个单元，20 个任务。单元一数据处理，由 5 个任务组成，旨在为后单元的化工计算作准备。单元二气体的热力学性质计算，由两个任务构

成，重点训练计算真实气体的 p 、 V 、 T 、 h 、 s 等基础数据的方法。单元三化工过程物料衡算，由3个任务组成，重点训练典型物理过程和典型化学反应过程的物料衡算方法和步骤。单元四单一化工过程能量衡算，共有5个任务，重点训练显热、相变潜热、溶解与混合热效应、化学反应热、气体压缩功的计算方法和步骤。单元五典型化工过程工艺计算，共分5个任务，训练内容尽可能做到与生产实际紧密结合。全书在解决具体定量计算问题时尽可能基于现代化计算工具——计算机，提高计算效率。全书内容尽可能结合实例，详细介绍如何采用 Excel 软件、ChemCAD 软件进行计算的方法和步骤。

本书由南京科技职业学院徐建良、江苏联化科技有限公司戴斌编著，由南京科技职业学院（原南京化工职业技术学院）丁志平教授主审，南京工业大学管国锋教授、常州工程职业技术学院陈炳和教授与刘承先副教授、湖南化工职业技术学院贺召平副教授、扬州市职业大学葛洪教授、南京科技职业学院许宁教授参与了审稿。书中有关 ChemCAD 软件的内容及单元五任务一、四、五由戴斌编写，其余部分均由徐建良编写并统稿。

本书在编写过程中参考了大量科技图书及相关教材，在此特表示感谢。限于编著者学术水平及教学经验，书中难免有不妥之处，恳请读者批评指正。

编著者

2015 年 3 月

第一版前言

为了适应当前高职教育、教学改革的需要,本书的编写尽可能体现“工学结合,理论实践一体化设计思想”,注重学生能力(技能)训练,优化整合课程内容,使之成为学生步入工作岗位、提升职业技能的必备手册。

本书内容上以质量守恒、能量守恒两个基本定律为重点,为了尽可能降低计算的繁杂程度,书中所涉及的计算尽可能以计算机为计算工具,Excel、ChemCAD 软件为主要计算手段,特别是 Excel 的应用,本书中穿插讲解了如何进行用于化工计算的 Excel VBA 自定义函数的开发内容,拓展了 Excel 在化工计算领域中的应用,是本书的首创,也是本书有别于其他教材的一大特色之一。

本书在内容编排上首次采用任务驱动式教学方式,通过配合各类计算实例,使学生能够在学中做(计算),在做(计算)中学,力求基本满足学生在化工企业生产岗位、生产车间进行物料、能量核算的需要。

全书共分五个单元,第一单元数据处理,由六个任务组成,旨在为后续单元的化工计算做准备,重点训练单位换算、插值、曲线拟合、求解一元非线性方程、求解线性方程组等。第二单元气体的热力学性质计算,由两个任务构成,重点训练计算真实气体的 p 、 V 、 T 、 h 、 s 等基础数据的方法。第三单元化工过程物料衡算,由三个任务组成,重点训练典型物理过程和典型化学反应过程的物料衡算方法和步骤。第四单元单一化工过程能量衡算,共有五个任务,重点训练显热、相变潜热、溶解与混合过程热效应、化学反应过程热效应、气体压缩功的计算方法和步骤。第五单元典型化工过程工艺计算,共分七个任务,分别以精馏过程、硫黄制酸过程、一氧化碳变换过程、甲醇脱水生产二甲醚过程、氯化氢合成工艺部分过程及乙炔制备工艺等具体生产过程为训练实例,训练内容尽可能做到与生产实际紧密结合。全书在解决具体定量计算问题时尽可能基于现代化计算工具——计算机,提高计算效率。全书尽可能结合实例,详细介绍如何采用 Excel 软件、ChemCAD 软件进行计算的方法和步骤。

为了满足不同学校及读者对化工计算内容的不同要求,本书增加了部分知识拓展内容和加*的任务,使用时可根据实际需要有针对性地进行选择。另外,为了方便老师教学和广大读者开发、利用 Excel VBA 自定义函数进行化工计算,本书配有助学 Excel 文件。该 Excel 文件与书中所涉及的有关 Excel 计算内容完全配套,并在此基础上进行了扩展。该 Excel 文件中包含了本书正文及附录中所涉及的各类化工基础数据及 1000 多个可用于化工计算的自定义函数,如插值、牛顿迭代、近 80 种常见物质的临界参数、标准生成热、正常沸

点、正常熔点、相变潜热查询，蒸气压的计算，常见气体显热计算，硫酸、HCl、NaOH 的标准积分溶解热的查询和计算，气体的 p 、 V 、 T 、剩余焓、剩余熵的计算，气体可逆压缩功的计算，硫酸生产工艺和合成氨生产工艺部分计算等自定义函数。有需要的读者可登录 www.cipedu.com.cn 免费下载，或与化学工业出版社联系（cipedu@163.com）索取。

本书由贵州工业职业技术学院袁红兰教授主审。书中有关 ChemCAD 软件的内容及第五单元任务一、四、五由戴斌编写，第五单元任务六、七由贾冬梅编写，其余部分均由徐建良编写并统稿。

限于编著者学术水平及教学经验，书中难免有不妥之处，恳请读者批评指正。

徐建良

2009年5月22日

目录

绪论

1

一、现代化工计算的内容	1
二、化工计算的作用	1
三、现代化工计算课程的学习方法	2

单元一 数据处理

4

任务一 单位换算	4
一、单位制度的构成及其种类	5
二、单位换算的方法	9
任务二 查表	13
一、采用常用插值方法处理表格函数	14
二、基于 Excel 单元格的常用插值法	16
三、采用 Excel 曲线拟合法处理表格函数	17
四、技能拓展——ExcelVBA 自定义插值函数插值	24
五、知识拓展——线性最小二乘法	26
任务三 求解一元非线性方程	34
一、一元非线性方程求根方法	35
二、手工求解一元非线性方程	38
三、采用 Excel 求解一元非线性方程	39
四、技能拓展——ExcelVBA 自定义函数求解一元三次非线性方程	43
任务四 求解线性方程组	44
一、线性方程组的求解方法	44
二、手工求解线性方程组	47
三、采用 Excel 求解线性方程组	48
四、技能拓展——Excel 规划求解法解线性方程组	50
* 任务五 采用 ChemCAD 回归物性公式参数	51
单元一复习思考题	57
单元一习题	58

单元二 气体的热力学性质计算

61

任务一 计算气体的 p 、 V 、 T 数据	61
一、气体 p 、 V 、 T 数据的计算方法	61
二、手工计算气体的 p - V - T 数据	68
三、采用 Excel 计算气体的 p - V - T 数据	70
四、采用 ChemCAD 计算气体 p 、 V 、 T 数据	75

五、知识拓展——偏心因子	77
六、技能拓展——ExcelVBA 自定义函数计算 p 、 V 、 T 数据	79
任务二 计算气体的焓 (h)、熵 (s) 数据	81
一、气体 h 、 s 的计算方法	81
二、手工计算气体的 h 、 s 数据	84
三、采用 Excel 计算气体的 h 、 s 数据	86
四、采用 ChemCAD 计算气体的 h 、 s 数据	87
五、技能拓展——ExcelVBA 自定义函数计算剩余性质	90
单元二复习思考题	93
单元二习题	93

单元三 化工过程物料衡算

94

任务一 理解物料衡算基础知识	94
一、物料衡算的两大类型	94
二、化工生产过程的类型	94
三、物料衡算的理论依据及物料衡算式	95
四、物料衡算计算基准及其选择	96
五、物料衡算的一般步骤	98
任务二 物理过程的物料衡算	99
一、混合过程物料衡算	99
二、蒸发与结晶过程物料衡算	100
三、吸收过程物料衡算	103
四、精馏过程物料衡算	103
五、技能拓展——ExcelVBA 自定义函数计算结晶过程	105
任务三 化学反应过程的物料衡算	107
一、反应物配比	107
二、转化率、选择性、收率	108
三、简单反应系统的物料衡算	111
四、复杂反应系统的物料衡算	114
五、技能拓展——ExcelVBA 自定义函数计算 SO_2 平衡转化率	116
单元三复习思考题	117
单元三习题	117

单元四 单一化工过程能量衡算

119

任务一 计算显热	119
一、采用 Excel 进行显热计算	119
二、采用 ChemCAD 计算显热	132
三、综合练习	136
四、技能拓展——采用剩余性质法计算真实气体状态变化过程显热	139
任务二 计算相变潜热	142
一、相变潜热的计算方法	143
二、采用 Excel 计算相变潜热	145
三、采用 ChemCAD 计算相变潜热	146
四、综合练习	148
*任务三 计算溶解与混合过程热效应	151

一、积分溶解热与积分混合热概念	151
二、手工计算溶解与混合过程热效应	153
三、采用 Excel 计算溶解与混合过程热效应	155
四、采用 ChemCAD 计算溶解与混合过程热效应	157
任务四 计算化学反应过程热效应	161
一、化学反应热的计算方法	162
二、手工计算化学反应热	163
三、采用 Excel 计算化学反应热	165
四、采用 ChemCAD 计算化学反应热	168
五、综合练习	172
六、技能拓展——绝热反应 Excel/VBA 自定义函数	176
* 任务五 计算气体压缩功	178
一、压缩功的计算方法	179
二、采用 Excel 计算各类压缩功	183
三、采用 ChemCAD 计算各类压缩功	183
四、原动机功率的估算	186
单元四复习思考题	187
单元四习题	187

单元五 典型化工过程工艺计算

189

* 任务一 精馏设计与严格模拟	189
一、采用 ChemCAD 进行精馏塔简捷设计计算	189
二、精馏过程严格计算	192
三、精馏设备的设计	202
任务二 硫黄制酸过程物料、能量衡算	203
一、计算熔硫釜的蒸汽消耗量	204
二、根据生产任务, 计算原料硫黄、空气、水的消耗量	205
三、计算焚硫过程中空气过剩系数与炉气组成、炉气温度之间的关系	206
四、计算废热锅炉的产汽量	210
五、计算 SO_2 的实际转化率和平衡转化率	211
六、计算空气过剩系数、 SO_2 转化率和转化炉一段出口温度之间的关系	215
七、技能拓展——采用 ChemCAD 计算焚硫过程中空气过剩系数与炉气组成、 炉气温度之间的关系	218
任务三 计算并绘制合成氨厂 CO 变换反应的 $t-x$ 图	223
一、确定变换炉一段出口温度和一段变换率	224
二、计算绝热反应操作线方程、平衡线方程和最佳反应温度线方程	227
三、采用 Excel 绘制 CO 变换炉一段 $t-x$ 图	228
任务四 CO 变换炉催化剂用量计算	228
一、化学反应速率的表示	229
二、采用手工计算 CO 变换催化剂用量	230
三、采用 Excel 计算 CO 变换催化剂用量	231
四、采用 ChemCAD 计算 CO 变换催化剂用量	234
* 任务五 甲醇脱水生产二甲醚过程的概念设计	237
一、过程的基本信息	237
二、流程输入、输出结构和循环结构	238

三、反应器的工艺设计	239
四、分离系统	242
五、全流程模拟	247
六、能量集成	249
单元五复习思考题	249
单元五习题	249

附录

251

附录 1 常用数据表	251
附录表 1-1 压力单位换算表	251
附录表 1-2 常用能量单位换算表	251
附录表 1-3 功率单位换算表	251
附录表 1-4 80 种化合物的物性数据表	252
附录表 1-5 Pitzer 压缩因子关系式的 Z 值	254
附录表 1-6 常见物质的真实恒压摩尔热容 $c_p = f(T)/[J/(mol \cdot K)]$	256
附录表 1-7 某些气体的真实恒压摩尔热容数值 $[J/(mol \cdot K)]$	257
附录表 1-8 某些气体的平均恒压摩尔热容数值 $(t_0 = 0^\circ C)/[J/(mol \cdot K)]$	257
附录表 1-9 某些气体的平均恒压摩尔热容数值 $(T_0 = 298K)/[J/(mol \cdot K)]$	258
附录表 1-10 某些气体的焓值数据 $[J/mol]$	258
附录表 1-11 某些物质的物性数据表	259
附录表 1-12 水蒸气表	262
附录 2 常用热力学图	267
附录图 2-1 $Z^{[0]}$ 普遍化关系图	267
附录图 2-2 $Z^{[1]}$ 普遍化关系图	268
附录图 2-3 $(H^R)^{[0]}/RT_c$ 普遍化关系图	269
附录图 2-4 $(H^R)^{[1]}/RT_c$ 普遍化关系图	270
附录图 2-5 $(S^R)^{[0]}/R$ 普遍化关系图	271
附录图 2-6 $(S^R)^{[1]}/R$ 普遍化关系图	272
附录 3 ChemCAD 简介	273
附 3-1 什么是 ChemCAD	273
附 3-2 什么是流程模拟	273
附 3-3 ChemCAD 的用途	273
附 3-4 ChemCAD 的应用领域	274
附 3-5 ChemCAD6.0 的运行界面	275
附 3-6 ChemCAD6.0 进行流程模拟的基本步骤	275

参考文献

283

绪论

一、现代化化工计算的内容

化工产品的生产不同于其他工业产品的生产过程，它具有原料来源广泛、工艺路线多样、生产方法各异、生产设备种类和结构繁杂、产品种类众多、影响因素复杂、涉及知识面广等多种特点。因此，为了能够优化化工生产设备、优化操作化工生产过程，节能、降耗、增效，无论对于化工生产方案、工艺流程、生产设备的设计人员，还是化工生产一线的操作人员，如何定量计算化工生产过程中的各种参数显得意义重大。

针对高职化工类专业的培养目标和学生特点，《现代化化工计算》课程的主要内容可概括为以下几个方面：

- ① 现代化化工计算基础内容，包括单位换算、查表（插值、曲线拟合）、非线性方程求根、线性方程组的求解、气体的热力学性质计算等；
- ② 化工过程物料衡算，主要讲解典型物理过程、化学过程的物料衡算方法；
- ③ 单一化工过程能量衡算，主要讲解显热、相变潜热、溶解与混合过程热效应、化学反应热及气体输送过程压缩功计算；
- ④ 典型化工过程工艺计算，运用前面所学知识，以几个比较典型的实际化工生产过程为例，讲解具体的物料、能量衡算的方法；
- ⑤ 讲解目前常用软件 Excel、ChemCAD 等在化工计算中的应用。

二、化工计算的作用

计算的目的是，为了确定各类具体数据的数值及其相互之间的关系。化工计算的目的是为了能够向各类与化工有关的过程提供正确、可靠的数据，如化工设备的尺寸、工艺条件、各类消耗定额等，其主要作用有以下几方面。

（1）在化工过程开发中的作用

化工过程开发是指一个新的化工产品从实验室研究过渡到第一套工业化装置投产的全过程。传统的化工过程开发主要包括：① 化学反应研究，如转化率、选择性、收率等；② 化学工程研究，如体系的物性、相态、热性质、热传递方式、物料的输送、分离等；③ 机械设备、仪表及控制手段研究，如设备材料、制造、安装、维修、控制仪表、控制方法和手段等；④ 技术经济评价，如各类消耗、成本、效率等。在具体实施时，通常要包括实验室研究、小试、中试、工业化装置等几个步骤。其中每个步骤和环节都必须通过一定的计算确定、核实相关数据，用于判断过程开发的成败与优劣。

近年来，由于计算机性能的不断提高，化工过程开发中各类数据资源的逐渐丰富，通过开发相应的数学模型，使化工过程开发能通过相应的软件进行模拟放大，减少了从实验室到工业生产装置间的中间试验环节，提高了化工新产品开发的效率。

(2) 在化工设计中的作用

化工设计是化工新产品由科研成果实现工业化的桥梁。化工设计包括的内容很广, 主要包括工艺、机械、自控、电气、运输、土建、给排水、三废处理等, 而其中化工工艺设计是贯穿化工设计全过程、组织协调各专业设计工作的核心部分。

在化工工艺设计中, 化工计算又是其中的一个中心环节。当然, 目前化工设计工作已进入计算机优化设计的时代, 利用计算机进行化工设计不仅仅可缩短设计周期, 关键是实现了设备、流程的优化。

(3) 在技术革新和技术改造中的作用

由于化工生产过程的复杂性和化工设备的非标性, 往往一套化工装置中常常存在扩产、增效的“瓶颈”问题。通过对生产装置或某一设备进行系统核算, 就能找出这一问题, 从而实现节能、降耗、增效的目的。

(4) 在化工操作方面的作用

化工操作不同于其他加工工业操作, 属于智能操作类型, 其主要工作任务是控制化工生产过程中工艺参数, 如温度、压力、流量等的稳定。作为一名优秀的化工操作人员, 操作控制不能仅停留在使工艺参数稳定在工艺指标范围内, 更要懂得、理解工艺指标为什么要在此范围内? 其极限范围是多少? 而要具备这方面的能力, 就必须具有一定的化工计算能力。

(5) 在化工生产的组织和管理中的作用

在化工生产的组织和管理过程中, 需要面对大量的工艺技术指标、各类消耗定额指标, 如原料、水、电、汽等, 如何制定合理的考核和评价指标就必须经过严密、细致的计算, 因此对于一个优秀的化工生产组织和管理人员, 就必须掌握一定的化工计算知识和化工计算的技能。

三、现代化工计算课程的学习方法

学好任何一门课程, 首先必须对该课程的主要内容、作用等有一个比较全面的了解, 化工计算也不例外。

对于化工技术类专业的学生而言, 化工计算课程属于专业基础类课程, 在整个教学环节中起承上启下的作用, 要学好该门课程, 应当注意以下几个方面:

(1) 基础知识的复习巩固

化工计算课程是一门综合性较强的课程, 涉及的知识面较广, 例如, 要对一个较复杂的化学反应过程进行物料、热量衡算, 首先必须写出该过程中所发生的化学反应, 若该步骤无法正确完成, 则下面的计算工作就根本无法进行。因此, 要学好该课程, 就必须不断复习以前所学的知识, 认真体会温故知新这一道理。

(2) 计算机、计算软件的应用能力

目前, 计算机已成为现代化生产、生活的必备工具, 采用手工计算、处理复杂问题的年代已成为过去。像对于大型化工装置的优化设计等复杂问题, 采用手工计算根本无法完成, 即使一个比较简单的一元三次非线性方程的求根问题, 采用手工计算不仅费时, 而且准确性不高, 而采用计算机计算, 就可做到既快速又准确。因此, 作为当今高素质化工类专业人才, 熟悉、了解常用的计算软件, 运用计算机进行化工计算已成为必然。

(3) 理论联系实际

化工计算的结果是否正确、可靠, 不能仅依赖于计算方法、计算软件和计算工具, 更要注意将计算结果与生产实际相结合, 必须经受实际生产的考验。而要具备这方面知识, 平时

就必须多注意理论与实际的结合。

(4) 严谨、细致的工作作风

对于较为复杂的化工计算问题，往往需要处理大量的原始数据，如需查阅物质的物性数据、热力学数据，采集实际生产数据等。因此，在具体计算之前，第一，要对查阅的数据、采集的数据进行耐心、细致的检验，保证第一手数据不出错，如，采集的混合气体成分的摩尔分数数据，先检查一下其摩尔分数之和是否为 100%，若非 100%，则往下计算没有意义；第二，要对所选计算公式的使用条件进行核对，如公式中各参数的单位、使用范围、计算结果的误差范围等，避免在计算时用错了原始数据；第三，要选择合适的计算方法，从数学角度保证能求解出结果；第四，要对各类计算结果的大致范围有所了解，以便保证计算的可靠性。

第一章

基础单元

在化工计算中，经常会遇到一些基础单元，如：质量、体积、摩尔、能量等。这些基础单元是进行复杂计算的基础，必须熟练掌握。

在化工计算中，经常会遇到一些基础单元，如：质量、体积、摩尔、能量等。这些基础单元是进行复杂计算的基础，必须熟练掌握。

在化工计算中，经常会遇到一些基础单元，如：质量、体积、摩尔、能量等。这些基础单元是进行复杂计算的基础，必须熟练掌握。

在化工计算中，经常会遇到一些基础单元，如：质量、体积、摩尔、能量等。这些基础单元是进行复杂计算的基础，必须熟练掌握。

在化工计算中，经常会遇到一些基础单元，如：质量、体积、摩尔、能量等。这些基础单元是进行复杂计算的基础，必须熟练掌握。

数据处理

在化工操作、化工计算过程中，必然会遇到各种各样的原始数据，如反应温度、压力、物料的组成等，在对这些原始的化工数据进行具体计算、校核时，还需借助一些手册查询与这些原始数据相关的基础物性数据，这些基础数据大多以表格和图形曲线的形式出现，只有很少或极少以公式的形式表达。大量的基础数据往往无法直接获得，通常在具体计算之前必须先对这些基础数据进行必要的处理，尤其是为了便于利用计算机编程连续计算，需将离散的表格数据处理成公式等。本单元将重点讨论化工计算过程中常遇到的单位换算、插值、曲线拟合及一元非线性方程的求解等问题。

任务一

单位换算

知识目标

掌握单位制度的构成及其种类，掌握化工过程中常用单位的换算方法。

能力目标

能用 Excel、ChemCAD 进行单位换算。

尽管目前世界各国都在推行采用国际统一单位制，但现有的大量手册等工具书中仍有相当数量的数据沿用各种各样的单位，这些单位明确地表示出了该数据代表的物理意义，因此掌握所在领域的国家法定单位制度、熟悉各种不同的单位制以及各种单位之间的换算是每个化工技术人员必备的知识和技能。

本任务将讨论主要的几种单位制，介绍单位换算方法以及量纲的应用。

☆思考：何谓量纲（或因次）？何谓单位？

所谓量纲或称因次，是指表示物料性质和状态的基本物理量。如长度（ L ）、质量（ M ）、时间（ t ）和温度（ T ）就是常用的量纲。由量纲组成的表示物理量特性的式子称为量纲式或因次式。如体积的量纲式为 L^3 、密度的量纲式为 M/L^3 、速度的量纲式为 L/t 等。

单位是量纲的具体表示。如长度的单位通常用米（ m ）表示，质量的单位通常用千克（ kg ）表示等。

☆思考：何谓单位制度？通常由哪几个部分构成？目前比较常用的单位制有哪几种？

一、单位制度的构成及其种类

所谓单位制度即为人为规定的计量制度。单位制度的构成通常由基本单位和导出单位两部分构成。

所谓基本单位就是一些彼此独立的物理量及单位。如长度 (L)、质量 (M) 等。导出单位是利用物理学规律建立起基本单位和其他物理量单位之间的联系,即用基本单位表示出其他物理量的单位,如力的单位牛顿 (N) 为 $1\text{kg} \cdot \text{m}/\text{s}^2$ 。

我国的法定计量单位,是以国际单位制为基础,保留少数国内外习惯或通用的非国际单位制所构成。

☆思考:国际单位制由哪几个基本单位构成?

(一) 国际单位制 (SI 制)

国际单位制简称国际制,它是在米·千克·秒制 (MKS 制) 即米制的基础上发展起来的。国际单位制的构成遵循下列几个原则:

① 遵守建立单位制的原则。即选定基本单位,再按物理学规律构成一系列导出单位。由基本单位和导出单位构成单位制。

② 遵守一惯性原则。即国际单位制中,由基本单位相乘、相除而构成的导出单位,都不附加任何数值因素,或者说数值因素都等于 1。

例如:SI 制中力的单位为牛顿 (N)。1N (牛顿) 等于作用于质量为 1kg (千克) 的物体上产生 $1\text{m}/\text{s}^2$ (米/秒²) 加速度所需的力,即

$$1\text{N} = 1\text{kg} \cdot \text{m}/\text{s}^2$$

③ 一种物理量只有一个 SI 单位。如长度单位中,只有“米”是 SI 单位,千米就不是 SI 单位,而是 SI 倍数单位,“千”称为词头。但也有例外,质量单位“千克”,本身虽带词头,却仍然作为 SI 单位。

④ 倍数单位 (包括分数单位) 一律按十进或千进关系构成,并使用统一的 SI 词头。

国际单位制包括基本单位、辅助单位、导出单位以及用于构成十进倍数和分数单位的词头几部分。

(1) SI 的基本单位和辅助单位

国际单位制共选定了 7 个基本单位,如表 1-1 所示,它们是长度单位米 (m)、质量单位千克 (kg)、时间单位秒 (s)、电流单位安培 (A)、热力学温度开尔文 (K)、物质的量单位摩尔 (mol)、发光强度单位坎德拉 (cd),以及两个辅助单位平面角,单位为弧度,球面角,单位为球面度。

表 1-1 SI 的基本单位和辅助单位

量的名称	单位名称	单位符号	量的名称	单位名称	单位符号
长度	米	m	物质的量	摩(尔)	mol
质量	千克	kg	发光强度	坎(德拉)	cd
时间	秒	s	平面角	弧度	
电流	安(培)	A	球面角	球面度	
热力学温度	开(尔文)	K			

(2) SI 导出单位

国际单位制的导出单位有三种：

① 直接用基本单位表示的 SI 导出单位。化工中常用的用基本单位表示的 SI 导出单位列于表 1-2。

表 1-2 化工中常用的用基本单位表示的 SI 导出单位

量的名称	单位名称	单位符号	量的名称	单位名称	单位符号
面积	平方米	m ²	加速度	米每秒平方	m/s ²
体积(容积)	立方米	m ³	密度	千克每立方米	kg/m ³
摩尔体积	立方米每摩尔	m ³ /mol	质量摩尔浓度	摩尔每千克	mol/kg
比体积(比容)	立方米每千克	m ³ /kg	物质量浓度	摩尔每立方米	mol/m ³
速度	米每秒	m/s	运动黏度	平方米每秒	m ² /s

② 具有专门名称的 SI 导出单位。具有专门名称的国际制导出单位共有 19 个，化工中常用的几个名称和符号见表 1-3。

表 1-3 化工中常用的具有专门名称的 SI 导出单位

量的名称	单位名称	单位符号	用其他 SI 单位表示的关系式	用 SI 基本单位表示的关系式
力;重力	牛[顿]	N		kg · m/s ²
压力,压强;应力	帕[斯卡]	Pa	N/m ²	kg/(m · s ²)
能量;功;热量	焦[耳]	J	N · m	m ² · kg/s ²
功率;辐射通量	瓦[特]	W	J/s	m ² · kg/s ³
摄氏温度	摄氏度	℃		K

③ 用专门名称和基本单位表示的 SI 导出单位。此类导出单位在化工中常用的如黏度(动力)(帕斯卡·秒, Pa·s)、力矩(牛顿·米, N·m)、表面张力(牛顿/米, N/m)及摩尔热容[焦耳/(摩尔·开尔文), J/(mol·K)]等。如表 1-4。

表 1-4 用专门名称和基本单位表示的部分 SI 导出单位

量的名称	单位名称	用其他 SI 单位表示的关系式	用 SI 基本单位表示的关系式
黏度(动力)	帕[斯卡]·秒	Pa · s	kg/(m · s)
力矩	牛顿·米	N · m	m ² · kg/s ²
表面张力	牛顿每米	N/m	kg/s ²
摩尔热容	焦/(摩尔·开尔文)	J/(mol · K)	m ² · kg/(s ² · mol · K)

☆思考：SI 制的词头使用规则有哪些？

(3) SI 的倍数单位

国际单位制的一个重要构成原则是一种物理量只有一个 SI 单位。但实际应用时可能太大或太小。例如，太阳到地球的平均距离为 $1.495 \times 10^{11} \text{ m}$ ，氢原子核的半径却只有 $1.2 \times 10^{-15} \text{ m}$ 。为了适应这种需要，国际单位制规定了一套词头，称 SI 词头，如表 1-5。

词头使用规则：

① 词头符号用正体字，词头符号和单位符号之间不留间隙，如：kJ、MPa。

② 带词头单位符号上有指数，则表明倍数单位或分数单位按指数自乘，如： $1 \text{ cm}^3 = (0.01 \text{ m})^3 = 10^{-6} \text{ m}^3$ 。

③ 不允许把两个以上 SI 词头叠起来用，如： $10^{-9} \text{ m} = 1 \text{ nm}$ ，不能写成 $1 \text{ m}\mu\text{m}$ 。