



高职高专“十一五”规划教材

化工计算

张桂军 薛 雪 主编

薛叙明 主审



化学工业出版社

高职高专“十一五”规划教材

化 工 计 算

张桂军 薛 雪 主编
薛叙明 主审



化学工业出版社

· 北 京 ·

本书主要介绍化工计算的基本原理、计算方法及解题技巧。全书共分五章。第一章为绪论,第二、第三章主要介绍有关化工计算的基础知识以及选取、估算物理性质数据的方法,第四、第五章着重介绍化工过程的物料衡算、能量衡算以及物料与能量联算等。各章均配有适量的习题,书后附有常用物质的物理性质数据表等,供解题需要时查用。

本书内容精炼,学以致用,从典型实例入手,逐步深入,便于教学和自学。

本书可作为高等职业学院高等专科学校、成人高校及本科二级学院举办的二级职业技术学院化工类专业及相关专业高年级学生的化工计算课程教材,亦可供从事化学化工及相关专业工作的科学技术人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

化工计算/张桂军,薛雪主编. —北京:化学工业出版社,
2007.2

高职高专“十一五”规划教材

ISBN 978-7-122-00006-4

I. 化… II. ①张…②薛 III. 化工计算-高等学校:技术学院-
教材 IV. TQ015

中国版本图书馆CIP数据核字(2007)第022910号

责任编辑:旷英姿 陈有华

装帧设计:史利平

责任校对:王素芹

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)

印刷:北京永鑫印刷有限责任公司

装订:三河市万龙印装有限公司

850mm×1168mm 1/32 印张6½ 字数173千字 2007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:12.00元

版权所有 违者必究

前 言

本书根据高职高专化工类专业《化工计算》教学大纲要求编写。主要内容包括化工工艺计算所依据的基本原理、化工基础数据、物料衡算、能量衡算以及物料与能量联算等。

物料衡算与能量衡算是进行化工工艺过程设计及对现有设备和过程进行经济评价的基本依据。例如,设计化工设备(如精馏塔、吸收塔、反应器等)或生产装置,甚至设计整个化工厂,都必须先对生产过程中整体或局部过程作详细的物料衡算和能量衡算,然后才能确定工艺流程和进行设备计算,从而完成整个设计。又如,在化工生产中,对各项技术经济指标,如消耗定额、产品产率、产品成本等作出评价时,同样需要对生产过程作物料衡算和能量衡算。此外,对化工过程进行深入研究时,需要用数学形式定量地、准确地表达理论和实验的结果。也就是说对所研究的系统建立数学模型。此时,物料衡算和能量衡算成为推导数学模型的基本方程。

由此可见,物料衡算和能量衡算对化工过程开发、设计及操作的改进具有重要的意义。因此,化工计算是化工技术工作者必须掌握的基本技能,也是学习化学工程学的基础,熟练地掌握它们,对今后的学习和工作都有重要意义。

化工计算课程的目的就是使学生掌握化工过程中物料衡算和能量衡算的理论基础、解题方法和技巧,培养学生收集、选取和估算物理性质数据的能力。

本书在编写过程中,总结了湖南化工职业技术学院、常州工程职业技术学院等高职院校历年来开设化工计算课程的教学经验,并考虑到高职学生教学上的特点和要求,编写时力求教材精炼、新颖,叙述由浅入深、循序渐进,并注重用典型例题说明基本原理和概念,每章均配难度适中的习题,加强基本功的培养和训练。

化工计算是化工类专业学生必修的一门专业课，其单独设课的目的是为了提高学生在工程计算方面的能力，使学生更好地适应化工生产技术和生产管理水平的提高。

本教材在内容的选择上尽量考虑工艺专业的学生在化工生产第一线工作时所遇到的工艺计算问题，力图将前面基础学科中的知识和方法结合到解决实际工程问题的计算中来，具体内容大致为以下几方面。

1. 进行物料和能量衡算时，合理正确地获取物理性质数据和热力学数据是至关重要的，为加强这方面的知识，将有关化工基础数据的内容独立成章。

2. 物料衡算中反应器的物料衡算是重点也是难点，化学反应过程中转化率、收率和选择性等过程参数是保证反应器物料衡算正确进行的基础。

3. 物料衡算是能量衡算的基础，对高职化工类学生主要是化工计算基础技能的训练，所以在这一章列举的例题深入浅出，且考虑到程度较好的学生的需要，列举了较综合的物料衡算例题。

4. 能量衡算是对化工过程进行经济评价的依据，是衡量工艺过程、设备设计、操作制度是否先进合理的主要指标之一。

本书既可作为高等职业院校、高等专科学校、成人高校及本科院校举办的二级职业技术学院化工类专业的教学用书，也可供从事化工及相关技术的专业人员参考。

全书共分五章，第一、第四章和附录由张桂军编写；第二、第三章由郭泉编写；第五章由薛雪编写。本书由张桂军、薛雪担任主编，薛叙明主审。

化学工业出版社对本书的编写出版给予了大力的支持；在编写过程中，同行们也提出了宝贵意见，对此编者致以衷心的感谢。

限于我们的水平，书中难免有不妥之处，恳请同行和读者批评指正。

编者

2007年1月

目 录

第一章 绪论	1
一、化工计算的目的地及意义	1
二、化工计算的内容	1
三、化工工艺过程的特征与构成	2
四、化工计算的作用	3
五、本课程的学习方法	6
第二章 化工常用基础数据	8
第一节 常用基本物性数据	9
一、气体的临界常数	9
二、密度和相对密度	13
三、蒸气压和饱和蒸气压	15
第二节 常用热力学数据	17
一、热容	17
二、相变热	20
三、焓	22
第三节 化学反应和热化学数据	23
一、标准摩尔生成热	23
二、标准摩尔燃烧热	23
三、反应热	24
第四节 传递参数	27
一、黏度	27
二、热导率	29
习题	30
第三章 化工过程参数	31
第一节 评价化工生产效果的常用指标	31

一、生产能力和生产强度	31
二、转化率	32
三、限制反应物与过量反应物	34
四、产率和选择性	38
五、收率	39
第二节 工艺技术经济指标	40
一、原料消耗定额	41
二、公用工程的消耗定额	42
习题	43
第四章 物料衡算	45
第一节 物料衡算概述	45
一、物料衡算的理论依据	45
二、物料衡算的意义	46
三、物料衡算的分类	46
第二节 物料衡算式	47
一、化工过程的类型	47
二、物料衡算式	50
第三节 物料衡算的基本方法	52
一、物料衡算的范围	52
二、物料衡算的基本步骤	53
第四节 无化学反应过程的物料衡算	61
一、简单过程的物料衡算	63
二、无化学反应过程多单元体系的物料衡算	72
第五节 化学反应过程的物料衡算	80
一、反应器的物料衡算	81
二、具有循环、排放及旁路过程的物料衡算	98
第六节 综合实例	112
习题	121
第五章 能量衡算	126
第一节 概述	126
一、能量衡算的意义	126

二、能量衡算的理论依据·····	126
三、能量衡算的应用·····	126
四、能量平衡图·····	128
第二节 能量的基本形式及与能量衡算有关物理量·····	128
一、能量的基本形式·····	128
二、与能量衡算有关的重要物理量·····	130
第三节 能量衡算的基本方法·····	132
一、能量衡算方程·····	132
二、机械能衡算·····	135
三、热量衡算·····	139
第四节 无化学反应过程的热量衡算·····	142
一、无相变过程的热量衡算·····	144
二、相变过程的热量衡算·····	150
三、溶解与混合过程的能量衡算·····	155
第五节 化学反应过程的热量衡算·····	158
一、化学反应过程的热量衡算·····	158
二、典型反应器的热量衡算·····	164
第六节 稳态流动过程物能联合衡算·····	169
一、物能联算的一般解法·····	169
二、计算举例·····	170
习题·····	179
附录 ·····	182
附录一 常见物质的物性数据表·····	182
附录二 常压下气体的平均摩尔热容·····	187
附录三 气体恒压热容表·····	188
附录四 25℃时摩尔生成热、摩尔溶解热及积分溶解热·····	189
附录五 25℃时化合物的标准摩尔生成热和标准摩尔 燃烧热·····	191
附录六 饱和水蒸气表(一)(以温度为准) ·····	195
附录七 饱和水蒸气表(二)(以压强为准) ·····	196
参考文献 ·····	199

第一章 绪 论

一、化工计算的目的及意义

在化工生产中，无论是工艺流程的确定、设备的设计，还是操作参数的选定，乃至经济分析等，都需要了解原料消耗量、产品产量、能量消耗、产品和中间产物的成分及其相互关系等，为此必须进行定量的计算。而化工生产的特点是产品种类多、设备型号各异、影响过程的因素多、技术水平高，因此无论是在工厂从事技术管理，还是在研究单位开展科学研究，特别是在设计单位从事设计工作，都必须掌握这些计算，工人也需要学习、掌握和运用化工基本计算。比如，为了配制一定浓度的溶液，必须知道要用多少体积或多少质量的各种物质，这就要求我们会进行准确而熟练的浓度计算。在炼油厂气体分离操作中，经常碰到气体的流量、体积和压力的计算问题。在精馏操作中，如果进出物料不平衡，便会引起操作不正常，使产品质量不合格，为了改善操作，使产品质量尽快合格，就要运用物料平衡的基本原理进行计算并指导调节。总之，运用化工基本计算解决生产问题的例子举不胜举。由此可知，化工生产相关人员掌握化工计算的基本知识，对于改善操作、降低成本、提高产品质量、减少生产过程的盲目性都是十分重要的。

二、化工计算的内容

涉及化工过程的计算很多，大致有以下几个方面。

- ① 化工过程基本参数如温度、压力、流量、浓度的计算；
- ② 基础物理性质特别是混合物物理性质的计算；
- ③ 物料衡算：计算生产过程中各种物料的数量与组成的关系；
- ④ 能量衡算：计算生产过程中各种物料的状态与能量变化的关系；
- ⑤ 化学或物理过程的平衡关系：解决过程进行的方向与限度；

- ⑥ 化学或物理过程的速率的计算：解决过程进行的快慢问题；
- ⑦ 对各种设备的结构和尺寸进行计算的设备计算。

本课程重点进行以下计算。

- ① 化工基础数据的获取；
- ② 物料衡算：对化工过程物料的流量及组成进行计算；
- ③ 能量衡算：对化工过程能量变化进行计算，在许多情况下，操作所涉及的能量只有热能，这时能量衡算即为热量衡算。

为了熟练地进行化工基本计算，不仅要牢固地掌握有关的概念、公式和方法，而且应具有分析问题和解决问题的能力。为此，必须进行严格认真的基本功训练。

化工计算课程的目的就是要使学生掌握化工过程中物料衡算和能量衡算的理论基础、解题方法和技巧，培养学生收集、选取和估算物理性质数据的能力。

另外，围绕上述计算问题，需要查阅和处理大量物质的物理性质数据和热力学性质数据，对复杂的计算还需采用相应的计算机应用技术。

三、化工工艺过程的特征与构成

按一定程序使原料发生物理和化学变化成为所需要的产品的过程，都可称为化工工艺过程。

在化工工艺过程中，原料经历一系列化学反应和物理变化，得到结构、组成、形状都和原料完全不同的产品，化学反应通常在各种形式的反应器中进行，它是化工工艺过程的中心环节和基本特征。各种辅助的物理变化过程也是化工工艺过程必不可少的环节。化学反应必须在适当的反应条件下才能迅速、充分、有效地进行，而化工工艺过程的原料通常都含有各种杂质并处于一定的环境状态，因此在反应之前必须进行原料的预处理。例如原料的破碎、分级、溶解、提纯，改变其温度、压力、结构、组成和相态以满足反应要求。反应产物通常是包括产品物质在内的处于反应器出口条件下的混合物，也必须进行后处理。后处理的目的主要有：通过分离精制得到合乎质量规格要求的产品和副产品；处理过程的排放废料

使之达到排放标准；分离小部分未反应的原料进行再循环利用。原料预处理和产物后处理都会伴随着各种物理过程。使物料发生必要的物理变化，同时实现能量的充分利用。即使在反应过程中，也必然伴随着不同的物理过程，如搅拌、混合、加热、冷却等。

由此可见，化工工艺过程通常由原料预处理过程、化学反应过程和产物的后处理过程三个基本部分构成，如图 1-1 所示。

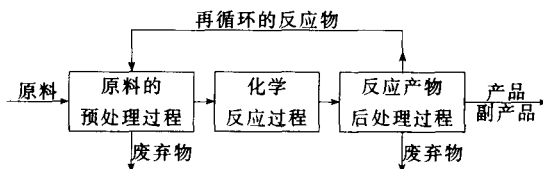


图 1-1 化工工艺过程的基本构成

在复杂的化工工艺过程中，进入过程的原料常常不止一种，而且往往要经过化学反应得到某些中间产品，这些中间产品再进行反应以得到最终产品；在原料提纯和产物的分离过程中，也常遇到化学反应，这又构成了以化学反应为中心环节的各种子过程。这样，化工工艺过程总体上既具有如图 1-1 所示的基本构成，局部上又包括了若干类似基本构成的子过程。用这个观点去分析化工工艺过程，有助于了解过程中每个部分的作用，也有助于综合地进行流程的构成并设计一个新过程，化学工业中进行的一系列使物料发生物理变化的基本操作，诸如物料粉碎、输送、加热、混合和分离等统称为单元操作。因此，化工工艺过程又可看成是以反应器为中心环节配以各种单元操作的有机组合。因此在进行物料衡算和能量衡算都是和具体的化工工艺过程分不开的，只有了解了什么是化工工艺过程才能顺利地完化工基本计算。

四、化工计算的作用

化工计算在化工生产中占有很重要的位置，主要体现在以下几个方面。

1. 合理组织生产和管理方面

作为化工生产的高等专业技术人员和管理人员，其工作内容往

往与生产的组织和管理工作有直接的联系，化工生产的组织和管理所涉及的内容很多，包括从操作岗位的划分、操作人员数的配置、操作规程的制订、事故处理的方法、原材料和各种辅助原料的供应、公用工程的维护、原料和产品的质量控制，到各项工艺技术指标的确定和监控、原料及水、电、煤、汽等辅助原料的消耗指标的确定和考核、生产设备的维修和保养、生产计划的合理调度等诸多方面，它们中间包含着大量的数据指标，这些数据指标的得到都离不开化工计算，虽然有些数据是由原来设备的设计要求直接确定的，但另一些则需根据设备运转的实际情况通过计算而不断加以调整。这些指标的考核和评价，是生产的组织和管理水平高低的依据，而这些考核和评价数据本身也需要利用生产过程中一些可测的数据经过各种的计算而得到，因此化工计算在合理组织生产和管理方面是很重要的。

2. 化工过程开发方面

化工过程开发是指一个化学反应从实验室过渡到第一套生产装置的过程。

化工过程开发，首先是决定于化学反应的可能性、转化率及反应速率是否具有工业价值，产物分离的难易程度以及机械、设备、材料是否可行。当然，最终取决于是否有经济效益。

广义而言，过程开发是指对一个过程从形成概念开始，经过试验研究、设计放大和施工建设，直到实现生产的整个过程。而化工过程开发是指一个新的产品从实验室研究过渡到工业化装置投产的全过程。这个过程包括对小试结果的评价及预设计，中试及评价，工业装置设计及评价，其中每一个环节都必须通过一定的计算过程给出定量的数据结果，用以判断过程开发的成败与优劣。

3. 在设计型计算方面

化工工艺过程计算过程大体可以分为两种类型，即设计型计算和操作型计算。

设计型计算是根据既定的设计要求进行的，例如要设计一个新

过程，给定产品的产量和质量要求以及原料组成，先要进行物料衡算，确定原料用量和过程中各个设备的进出口物料的数量和组成，同时进行能量衡算，确定物料的未知状态变量以及设备的热负荷和动力消耗。由此进一步确定设备的工艺尺寸，原材料消耗，水、电和蒸汽的消耗，并进行其他设计计算。在设计型计算中物料衡算和能量衡算是其他计算的前提和必要条件。

4. 在操作型计算方面

生产实际操作总是在已定工艺流程和已有设备条件下进行的，这就是操作型计算的背景。操作型计算有下列作用。

① 分析操作条件改变对操作结果的影响。例如当进料量或进料组成发生改变、操作压力和温度等发生改变时对于产品产量和质量的影响。这类计算，对于如何保证操作在优化条件下进行，以及如何进行生产调整以适应条件的变动，都是十分必要的。操作型计算常需根据现有的流程和设备尺寸，将速率方程、平衡关系式和衡算方程联立求解，计算结果则是给出完整的物料衡算和能量衡算的定量关系。

② 分析生产过程的实际操作情况，找出生产中的薄弱环节。通过在生产现场直接测定各种数据，进行物料衡算和能量衡算。这样，衡算结果本身就反映了生产的基本状况，此外，通过这种计算，可以得到一些难以直接测定的物理量数据，或者用来检验测定数据的正确性。

③ 通过对操作设备的物料和能量衡算，可以进一步分析和计算设备的操作特性，例如换热器的传热系数、填料塔的传质单元高度、塔板效率以及设备的水力学特性等，作为评价设备的操作性能和改进设备、强化过程的依据。

一套化工生产装置投入生产运行后，随着生产年限的增加，设备的老化会不同程度地引起生产能力和生产效率的下降，同时化工生产的新技术又在不断地发展，因此通过技术革新和技术改造引进新的工艺和新的设备，解决老装置扩产增效中存在的“瓶颈”问题，是现有生产企业始终关注的一个问题。

五、本课程的学习方法

化工计算是以许多基础学科的理论和方法为基础来解决工艺过程实际问题的一门学科，比如化学、物理、物理化学、化工热力学、化工原理、化工工艺学、数学、计算机等都是化工计算课程的基础。化学和物理提供了物质变化和运动的内在规律；物理化学和化工热力学知识是能量衡算的基础；化工原理使我们掌握了化工单元操作过程的设备结构和工作原理；化工工艺学为我们了解生产工艺流程打下了基础，而数学和计算机应用技术则为化工计算提供了解题的方法和手段，是解决复杂问题的保障。如何将这些理论和方法应用到实际的工程计算中去，熟练地进行化工基本计算，不仅要牢固地掌握有关的概念、公式和方法，而且应具有分析问题和解决问题的能力。为此，必须进行严格认真的基本功训练。为了较好的掌握计算方法和计算技能，提高实际应用的能力，在学习当中应当注意以下几个问题。

1. 正确分析化工计算的任务

在进行计算前要运用化工工艺学知识去分析计算对象的过程特征，明确计算目标，这是正确解题的先决条件，也是化工计算顺利进行的关键。

2. 正确收集和处理有关化工基础数据

化工计算过程中往往要用到物质的基础物理性质数据和热力学物理性质数据，这些数据的获得需要通过查阅有关的手册和图表资料，有的还要用相关的经验公式来估算，因此学会各类图表的使用，注意获取数据的适用条件，都是正确进行化工计算的有力保证。随着计算机网络的飞速发展，有条件的还应掌握利用计算机检索数据的方法。

3. 合理选择计算方法

对于同一问题可能有不同的解题方法，但计算结果应该是相同的，应尽可能选用步骤简单、所需数据容易查取的解题方法。有时方法选择得不恰当，还会让问题变得无法解决。另外，对于同一计算过程所涉及的数学问题，可能有不同的数值计算方法，而计算结

果取决于所采用的数值计算方法和精度要求，应在满足计算精度要求的前提下，尽可能选用过程简单、模型容易建立的方法。

4. 多动手、勤思考

计算技能的培养必须通过对大量实际问题的演算来进行，书中虽然有大量的例题来说明针对各种不同计算内容的计算方法和解题步骤，但是由于实际遇到的计算对象会有各自不同的特点，这就需要大家通过各种类型的习题进行反复练习，然后归纳总结，多动手，多思考，逐步积累经验。这是掌握计算方法，提高计算技能的必由之路。在计算过程中尽量使用国际单位制。对一些比较复杂的过程，容易引入误差的，要注意有效数字的保留，尽可能减少计算误差。

5. 培养严谨、细致的工作作风

计算过程中涉及到大量的数据，要注意单位的统一，尽可能用国际单位制，并且对计算结果要进行校核，以保证计算的正确性。过程较复杂和计算结果较多的时候要列表汇总或是画出物料流程衡算图和能量衡算图。

第二章 化工常用基础数据

物质本身的属性叫做性质。物质的有些性质改变时，并不牵涉其化学组成的变化，这些性质就叫做物理性质。像密度、沸点、蒸气压、热容、黏度、导热系数、扩散系数、表面张力等都是物质的物理性质，物理性质简称物性。

在化工计算及化工工艺和设备设计中，必不可少地要利用有关化合物的物性数据。例如，化工过程物料与能量衡算时，需要用到密度、沸点、蒸气压、焓、热容及生成热等基础数据；设计一个反应器时，则需要化学反应热的数据；计算传热过程时，需要导热系数的数据等。这些数据习惯上称为化工基础数据。

化工基础数据包括很多，常用的一些化工基础数据大致归纳成以下几类。

① 基本物性数据。如临界常数（临界压力、临界温度、临界体积）、密度、状态方程参数、压缩系数、蒸气压、气—液平衡关系等。

② 热力学物性数据。如内能、焓、熵、热容、相变热、自由能、自由焓等。

③ 化学反应和热化学数据。如反应热、生成热、燃烧热、反应速率、活化能、化学平衡常数等。

④ 传递参数。如黏度、扩散系数、热导率等。

在进行化工计算或设计时，设法取得所需的有关基础数据是重要的一步。这些数据通常可通过查阅手册或文献资料得到。

常用物质的有关化工基础数据，前人已系统地进行归纳总结，以表格或图的形式表示。这些数据可从有关的化学化工类手册或专业性的化工手册中查到。

① 《化学工程手册》，《化学工程手册》编辑委员会，化学工业出版社，1996。

②《化工工艺设计手册》，国家医药管理局上海医药设计院编，化学工业出版社，1996。

③《化工工艺算图手册》，刘光启、马连湘主编，化学工业出版社，2002。

④《化工物性算图手册》，刘光启、马连湘主编，化学工业出版社，2002。

《化学工程手册》是一本通用性的工作手册。全书共分 26 篇。第一篇为化工基础数据，其中内容取材注意结合国内情况及已取得的成果，并吸收国外有关的技术数据。

《化工工艺设计手册》是针对化工设计工作人员所需技术资料而编写的。全书分上、下两册。共包括常用物质的物性数据、常用化工设备、机电设备和化工仪表以及常用工程材料、管道管件等三个部分。

《化工工艺算图手册》、《化工物性算图手册》是汇编了根据公式和实验数据绘制的图册，共有算图达 1000 余种。利用算图计算，查阅简捷，使用方便，可以避免繁琐的计算。

除以上介绍的几本通用性手册外，尚有一些专业性的手册。如《石油化工基础数据手册》、《无机盐工业手册》[上、下册（第二版），天津化工研究院编，化学工业出版社，2003]（卢焕章编，化学工业出版社，1982）、《氮肥工艺设计手册 理化分册》（石油化学工业部化工设计院主编，石油化学工业出版社，1977）等。

当手册或文献中查不到现成的数据或查得数据不完整时，可用估算或用实验直接测定的方法得到。

本节介绍常用化工基础数据的物理意义、物理单位及计算或估算方法。

第一节 常用基本物性数据

一、气体的临界常数

临界常数是重要的物质基本性质数据，它不仅表示本身的物理意义，而且也是用以计算其他物质基本性质的主要数据。