

高等学校教学用书

化学工程计算

钟穗生

北京师范大学出版社

高等学校教学用书

化学工程计算

钟 穗 生

北京师范大学出版社

(京)新登字160号

高等学校教学用书
化 学 工 程 计 算
钟穗生

北京师范大学出版社出版
新华书店总店科技发行所发行
交通出版社印刷厂印刷

开本: 850×1168 1/32 印张: 12 字数: 291 千
1992年3月第1版 1992年3月第1次印刷
印数: 1—1 000

ISBN 7-303-01400-4/O·154

定价: 3.95元

前 言

化学工程计算涉及的内容十分广泛。然而化工实验数据的处理、物料与热量的平衡计算是最基础的内容。

在工程技术中，一个必要的步骤就是把从实验中获得的数据变为解决某个具体问题有用的信息，这种转变的过程就叫做数据处理。一个图表、一个经验公式的价值就在于是否运用过先进的数理统计技术，对原始数据加以归纳、整理。所以，数据处理对一个实验研究人员、其他科技工作者，是十分重要的工作。可以想象，不掌握数据处理技术，或者忽略对数据误差的重视和分析，必然导致数据的准确度变差，因而得不出完满甚至不正确的结论，功亏一篑，把实验时辛辛苦苦保持的准确度损失殆尽。为了解决这一问题，本教材试图解决化学工程研究中实验数据的处理技巧，以及在建立数学模型过程中遇到的困难。

要获得准确可靠而富有价值的数学模型，除了掌握正确的数据处理技术外，首先必须获得准确可靠的实验数据，这就要求对实验数据进行中肯的分析，掌握数据误差的来源、数据的检验分析和数字修约规则。

数据是数字与量值（即计量单位）的组合，没有量值的数字是空洞的，毫无意义的。尽管在1960年第11届国际计量大会上决定，在MKS制的基础上建立了国际单位制(SI)，也已为世界上多数国家接受采用。尽管我国国务院在1984年2月正式发布在我国统一实行以SI为基础的法定计量单位（即中华人民共和国法定计量单位）的法令。目前，单位制的使用仍十分混杂，很不利于教学、研究及国际间的经济与技术交往，极不适应我国国民经

济的迅速发展。本书统一使用我国的法定计量单位，此外，还对SI及我国的法定计量单位进行介绍和讨论。

需要说明的一点，就是涉及的各种数据，一般以科学计数法表示。由于目前世界上一些权威的理化手册中，都很难找全SI表示的理化及热力学数据，所以本书的有些数据是由现有手册中工程单位的数据换算得来的，为了保持与原数据一致，未按科学计数法处理，请诸读者见谅。

在内容安排上，本教材先讨论我国的法定计量单位，然后讨论实验数据的可靠性，并在此基础上讨论将实验数据进行曲线拟合以建立数学模型，最后对建立的数学模型进行统计检验。

物料平衡计算是进行热量衡算、传热计算、设备计算等化工工艺计算的基础，也是过程操作控制最佳化、工程可行性分析论证的基础，通过物料与热量衡算，可为化工生产优质、高产、低耗、高效益提供科学依据，为强化生产指出正确的途径。在现代科学技术手段越来越先进的今天，人们可以通过热量与物料衡算，将描述化学过程特征的动力学方程式、描述物理过程特征的流体力学方程式、传热方程式、传质方程式加以综合，建立起描述过程的数学模型，该模型是一组复杂的代数方程或微分方程，难于应用常规的数学手段进行解算，必须借助电子计算技术。本教材介绍这方面最基本的理论和实用方法，初步培养学生应用数学语言模拟简单化工过程的能力，应用电子计算机解算模拟方程的能力，以及培养学生收集、选取、估算化工设计计算常用数据的能力。内容安排上采取由简而繁，先易后难的程序；先介绍物料衡算，后讨论热量衡算，再剖析物料与热量平衡联合运算；先物理过程，后化学过程；先单元设备，后带循环物料、旁路及排放物流的复杂系统。循序渐进，以求实效。

为了熟练、准确地进行化学工程计算，不仅要深刻掌握有关的概念、公式和方法，而且更为关键的是要提高分析问题、解决

问题的能力。进行化学工程计算如同弹钢琴一样，重在多学多练，因此本书内容强调解题方法和计算技巧，强调运算及解题实践。除课堂讲授以外，还安排编程练习和上机操作。

本课程是在学生学习过高等数学、工程数学、化工原理、物理化学及化工工艺类课程，并具备FORTRAN算法语言知识的基础上讲授的。全书内容包括化工实验数据处理技术、物料衡算和热量衡算。书中编入较多的例题，比较简单的问题，仍保留手算，有助于启发学生们的思维，以加强基本功训练；对于较复杂的问题，则应用电子计算机解算，配有一定数量的算例。

书中选用的国外教科书中的电算程序，已在太原工业大学计算中心和化学工程系计算机室的WAX、IBM、ST等微机上通程及演算，陈娟、贺鸿老师为程序上机作了大量工作，本书在编写过程中得到太原工业大学及化学工程系领导的热情关心与支持，承蒙美国KANSAS STATE UNIVERSITY化学工程系教授L.T.FAN博士的热情支持与鼓励，借此机会向所有关心、支持并给予帮助的教授和工程师致以衷心感谢！

由于作者水平所限，难免疏漏，有不妥乃至错误之处，诚望批评匡正。

钟穗生

1991年7月

内 容 提 要

全书共分三章：化工实验数据处理技术、物料衡算及热量衡算。每章的前面部分着重介绍基本原理、基本公式和计算方法，然后剖析典型算例，比较简单的问题，仍保留手算，有助于启发学生的思维，以加强基本功的训练和培养；对于较复杂的问题，则应用电子计算机解算，着重培养学生应用数学语言模拟简单化工过程的能力，以及应用计算机解算模拟方程的能力。书末列有常用统计分析用表、常用理化及热力学数据。本书可供高等学校化工系有关专业作为《化学工程计算》课程的教材或参考书，对于从事化工科研、设计、生产的工程技术人员均有一定的参考价值。

目 录

前 言	(1)
第一章 数据处理技术	(1)
第一节 我国的法定计量单位	(2)
一、单位制	(3)
二、国际单位制	(3)
三、中国法定计量单位	(7)
四、单位换算	(12)
第二节 实验数据的可靠性	(18)
一、误差的种类及来源	(19)
二、数据的检验与分析	(22)
三、有效数字与数字修约规则	(37)
第三节 数学模型的建立	(39)
一、经验公式的选择	(39)
二、经验公式中常数的求法	
——经验公式的建立	(47)
三、回归方程的检验	(66)
第四节 插值法	(95)
习题	(107)
第二章 物料衡算	(116)
第一节 基本概念	(116)
一、物料平衡	(116)
二、物料衡算的步骤	(117)
第二节 无化学反应过程的物料衡算	(120)
一、直接解法的物料衡算	(120)
二、代数法求解的物料衡算	(124)
三、联系组分解法的物料衡算	(130)
四、电算法求解物料平衡方程	(136)

第三节 包括化学反应过程的物料衡算	(156)
一、一般化学反应过程的物料衡算	(156)
二、有平衡反应的物料衡算	(166)
第四节 再循环、旁路和排空的计算	(184)
一、带有物料再循环的平衡计算	(184)
二、带旁路的平衡计算	(200)
三、带排放的平衡计算	(203)
习题	(216)
第三章 热量衡算	(222)
第一节 基本概念	(222)
第二节 热力学数据	(223)
一、热容的计算	(223)
二、热焓的计算	(231)
三、反应热的计算	(243)
第三节 无化学反应过程的热量衡算	(257)
一、热量平衡及计算	(257)
二、焓浓图在液体蒸馏计算中的应用	(273)
第四节 化学反应过程的热量衡算	(283)
一、简单化学反应的热量衡算	(284)
二、平行反应、平衡反应的热量衡算	(296)
三、物料与热量平衡结合的计算	(308)
习题	(342)
主要参考文献	(345)
附录	
I. 几个常用统计分析用表	(346)
I-1 χ^2 分布表	(346)
I-2 F 分布表	(348)
I-3 相关系数检验表	(351)
II. 化工计算常用理化及热力学数据	(352)
II-1 某些常用气体的临界常数	(352)

II-2	某些化合物的正常沸点、汽化潜热、标准生成热、标准 燃烧热.....	(355)
II-3	某些无机酸、碱的溶解热和稀释热(25°C).....	(360)
II-4	水的饱和蒸气压(-20至100°C).....	(362)
II-5	饱和水蒸气表(以温度为准).....	(363)
II-6	饱和水蒸气表(以压力为准)(I).....	(365)
II-7	饱和水蒸气表(以压力为准)(II).....	(367)
II-8	水的物理性质.....	(369)
II-9	干空气的物理性质($P = 101.3\text{kPa}$).....	(371)

第一章 数据处理技术

众所周知，无论是开发一种新的化工产品，还是对现有产品进行技术改造，都必须建立在可靠的实验研究的基础上。而且往往需要经过多次放大，才能把实验室的研究成果，转化为生产力，形成工业生产规模。

化工产品种类繁多，生产工艺及生产方式各不相同。但就其过程而言，不外涉及物理过程、化学过程两大类。化工产品是化学反应的产物，组织化工生产，一般包括原料预处理、化学反应、产品的分离精制等三个主要组成部分。其中化学反应阶段是核心环节。况且，产品形成受很多因素的影响，这些因素又涉及到多个领域的问题：

化学反应机理、化学反应速度，属于化学动力学领域；

大型反应器内传热、传质及动量传递等物理传输现象，属于化学工程学领域；

流体的流动、混合、传热、传质等宏观动力学因素对反应结果的影响，属于反应工程学领域。

如此错综复杂的现象，及其在规模扩大后的各种效应，使得化工生产过程异乎寻常的复杂。为了实现优质、高产、低耗、安全、效益等综优目标，人们只好依靠比拟放大技术，谨慎小心地进行逐级放大。

随着现代科学技术的发展，数学模拟技术已开始用来解决这类复杂的问题。所谓数学模拟，就是把上述复杂的实际现象，运用数学语言加以描绘。为此得到的数学函数式，即称为数学模型或经验公式。

描述化工过程的数学模型，是一组复杂的代数方程或微分方程，难于应用常规的数学手段进行解算。然而，电子计算技术的拓展，为实现化工过程的数学模拟提供了条件。

数学模拟作为现代科学技术成就，在电子计算技术的辅佐下，已经成功地用于解决设计与生产中的许多问题。

1. 反应器及其他化工过程的放大设计。

2. 反应器及其他化工过程的最佳化。

3. 动态最宜化及稳定性分析。

4. 最宜系统的合成设计。

5. 探求现有生产过程的技术改造途径及方案。

本章作为数学模拟技术的初步基础，讨论如何将实验或试验获得的数据，整理成具有实际应用目的的经验方程（即数学模型）。

实验数据的处理，对从事科研实验和生产实践的科技人员，是一项十分重要的工作。可以想象，不掌握数据处理技术，或者忽略对数据误差的重视和分析，必然导致数据的准确程度变差，因而得出不完满的、甚至不正确的结论。功亏一篑，把实验时辛辛苦苦保持的准确度损失殆尽。

实验数据是通过数字和计量单位表达的。过去公制、市制、英制等单位并用，致使同一物理量出现多种不同的计量单位，使用、换算、国际交往都极不方便。最近我国已实行以国际单位制单位为基础的法定计量单位制，本书统一使用法定计量单位，因此在讨论数据处理技术以前，择要介绍我国的法定计量单位。

第一节 我国的法定计量单位

化学工程计算涉及多种物理量。人们表达一个物理量的量值，必须有数值和计量单位才能有确切的意义，例如，100kg 聚

氯乙烯，蒸馏塔总高度30m等。所以在工程计算中应该十分重视物理量的意义和它的计量单位。

一、单位制

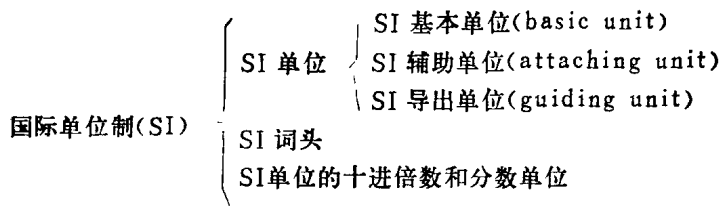
目前世界上使用的计量单位分为两大类，即国际单位制(SI)（过去称公制）和英制。每种单位制的建立，都是首先选择几个基本物理量及其计量单位，然后再根据有关物理定义或定律，推导出其它的物理量及其计量单位，称为导出单位。加上有关规则，即形成了一种单位制。

我国政府十分重视单位制的建立，国务院曾发布《关于统一计量制度的命令》（1959年），确定米制为我国的基本计量制度，同时改革市制、限制英制、废除杂旧制。1977年国务院又颁布了《中华人民共和国计量管理条例（试行）》，明确规定“要逐步采取国际单位制”。1981年国务院批准中国国际单位制推广委员会公布的《中华人民共和国计量单位名称与符号方案（试行）》，规定“以国际单位制为基础，同时沿用某些非国际单位制单位”。尽管如此，统一使用单位的工作没有得到有效的实施，形成了米制、市制、国际单位制、英制同时并用的局面，致使同一物理量出现多种不同的计量单位，使用、换算、国际交往都很不方便。为了彻底解决单位制使用混乱现象，1984年国务院发布了《关于在我国统一实行法定计量单位的命令》，规定我国计量单位一律采用《中华人民共和国法定计量单位》。

我国的法定计量单位是以国际单位制单位(SI)为基础，并结合我国的实际情况制定的，所以下面着重介绍SI，然后对我国的法定单位作一些补充说明。

二、国际单位制

国际单位制由SI单位、SI词头、SI单位的十进倍数和分数单位所构成：



SI 包括 7 个基本单位和 2 个辅助单位，据此，依物理定义或定律关系，由基本单位相乘或相除导出的单位中有 19 个具有专门名称。表(1-1)~表(1-5)为 SI 的基本单位、辅助单位、导出单位、SI 词头、SI 单位的十进倍数和分数单位。

SI 导出单位是借助于乘或除的数学符号，通过代数式用基本单位和（或）辅助单位表示的单位。例如，速度的定义为单位时间物体的位移，故其单位用 SI 基本单位表示为 m/s 或 $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ 。

导出单位可分为四类：（1）用 SI 基本单位表示的 SI 导出单位；（2）具有专门名称的 SI 导出单位；（3）用具有专门名称的 SI 导出单位表示的 SI 导出单位；（4）用 SI 辅助单位表示的 SI 导出单位。化学工程计算中常用的 SI 导出单位列于表 1-8 中。该表所列的单位中，有的导出单位是直接使用 SI 基本单位表示的，如 m/s 、 mol/m^3 等；有的导出单位具有专门名称和符号，如 N 、 J 、 Pa 等；另一些导出单位则是用具有专门名称的导出单位表示的，如 $\text{Pa}\cdot\text{S}$ 、 J/K 、 $\text{W}/(\text{m}^2\cdot\text{K})$ 等。使用这些具有专门名称的导出单位，以及用它们表示的其它导出单位，往往更为简便、明确。例如，能、功、热量的单位都是 J （焦耳），这个单位比用 SI 基本单位表示的单位即 $\text{kg}\cdot\text{m}^2/\text{s}^2$ 要简便得多，而且意义更为明确。

SI 词头和 SI 单位的十进倍数和分数单位（参见表 1-5）在使用时必须注意规定的用法。SI 词头用于构成大小不同的 SI 单位的倍数单位和分数单位，以适应不同学科或不同场合的需要。例如，将词头 k （千）加在 m （米）之前，构成 km （千米），它代表米的 1000 倍，即米的一个倍数单位。若将词头 n （纳， 10^{-9} ）加在

m 之前,就构成米的一个分数单位即 nm (纳米,十亿分之一米)。各种 SI 单位的十进倍数和分数单位都可以由 SI 词头和 SI 单位构成,唯有 kg 是例外,因为它本身就是由 g (克)和词头 k 构成的,而词头不可重叠使用。故质量的倍数和分数单位,不可用 kg 加词头构成,而应由 g 加词头构成。例如,kg 的 10^3 倍应表示为 Mg (兆克),不可用 kkg 表示。又如,过去常使用 $\text{m}\mu\text{m}$ (毫微米)这个单位,其中第一个 m 是词头毫的符号, μ 是词头微的符号,最后一个 m 是米的符号。米前面出现两个词头,违背词头不重叠使用的原则,故 $\text{m}\mu\text{m}$ 这个单位现在不应使用,应改为 nm (纳米)。

词头符号所表示的因数大于或等于 10^6 时,用大写正体,如 E、T、M 等;所表示的因数小于或等于 10^3 时,用小写正体,如 k、p 等。

计量单位和 SI 词头使用方法要点

(1) 计量单位和词头的名称,一般用于叙述性文字中,在公式、图表等场合使用它们的国际符号。单位的符号一般用小写正体,如 m、mol、 kg/m^3 等;若单位名称来源于人名,则其符号的第一个字母用大写正体,如 A、K、Pa 等。

(2) 单位的名称或符号必须作为一个整体使用,不可拆开。组合单位的中文名称与其国际符号表示的顺序一致。符号中的乘号无对应的名称,除号的对应名称为“每”字。在同一单位中每字只出现一次。例如,导热系数的国际符号为 $\text{W}/(\text{m}\cdot\text{K})$,单位名称为瓦〔特〕每米开〔尔文〕,不可称为“瓦〔特〕每米每开〔尔文〕”或“每米开〔尔文〕瓦〔特〕”。由此例可知,单位的中文名称不加任何表示乘、除或其它符号。

乘方形式的单位名称,应是指数名称在前,单位名称在后。例如, m^5 称为五次方米。若长度的二次和三次幂分别指面积和体积时,则指数名称分别为平方和立方,如 m^3 称为立方米,不必

称为三次方米。

(3)由两个以上单位相乘构成的组合单位,其符号有两种表示形式,如帕[斯卡]秒的符号可以用 $\text{Pa}\cdot\text{s}$,也可以用 Pas 。但当组合单位中某单位的符号与词头符号相同时,应将这个单位的符号置于右侧,以免与词头相混淆。例如,牛顿米的符号为 Nm ,不可写成 mN ,因为 m 既是米的符号,又是词头毫的符号, mN 代表毫牛顿,意义完全不同。

(4)由两个以上单位相除构成的组合单位,其符号有三种形式,如摩尔每立方米的符号为 mol/m^3 或 $\text{mol}\cdot\text{m}^{-3}$ 或 mol m^{-3} 。当可能发生误解时,应使用前两种形式,本书一般使用第一种形式。此种形式书写时,应将分子、分母与斜线处于同一行内,不应上下错位。例如,扩散系数的单位平方米每秒为 m^2/s ,不应写成 m^2/s 。若分母中有两个以上单位符号时,为避免混淆,可加圆括号,不应使用另一条斜线。如传热系数的单位符号为 $\text{W}/(\text{m}^2\cdot\text{K})$,不可写成 $\text{W}/\text{m}^2/\text{K}$ 。斜线在算式中可改为水平线。

(5)通过相乘或相除或通过乘和除构成的组合单位使用 SI 词头时,词头应加在整个单位之前,分母一般不用词头。例如,摩尔内能的单位 kJ/mol ,不使用 J/mmol 。如果分母是 kg ,则 k 可不作词头看待,仍可使用。当组合单位的分母是长度、面积和体积时,分母可用词头构成倍数或分数单位。例如,密度的单位可以使用 g/cm^3 。

(6)选用 SI 单位的倍数单位和分数单位,一般应使量的数值处于 $0.1\sim 1000$ 范围内。例如, 0.000578m ,应写成 0.578mm ; 28465Pa ,应写成 28.465kPa ; $1.5\times 10^5\text{W}$,可写成 150kW ; $2.5\times 10^{-8}\text{s}$,应写成 25ns 等等。但某些场合可以不受此限制,如机械制图可用毫米,不必使用其它长度单位。

(7)乘方形式的倍数或分数单位的指数,属于包括词头在内的整个单位,不可割裂开来,例如,

$$1\text{cm}^2 = 1(10^{-2}\text{m})^2 = 1 \times 10^{-4}\text{m}^2$$

$$1\mu\text{s}^{-1} = 1(10^{-6}\text{s})^{-1} = 1 \times 10^6\text{s}^{-1}$$

$$10\text{km}^3 = 10(10^3\text{m})^3 = 10 \times 10^9\text{m}^3 = 10^{10}\text{m}^3$$

(8) 10^4 称为万, 10^8 称为亿, 10^{12} 称为万亿。这类数词的使用不受词头名称的影响, 但不应与词头混淆。

(9) 公里是千米的俗称, 符号为 km。

(10) 除了表 1-6 所列之时间的保留单位外, 周、月、年 (年的符号为 a), 也是一般常用的时间单位。

此外, 还有经国际计量局批准保留下来与 SI 并用的单位, 如表 1-6 所示, 以及暂时与 SI 并用的单位, 如表 1-7 所列之单位。表 1-6 所列单位由于应用广泛, 而且十分重要, 所以保留下来与 SI 单位并用。但要注意, 这些单位只在某些已经习惯的情况下, 才与 SI 单位构成组合单位, 如千瓦小时 ($\text{kW} \cdot \text{h}$)。断不可随意组合, 以免失去 SI 单位的一贯性, 造成单位使用的混乱局面。

三、中国法定计量单位

前已提及, 1984 年国务院发布了《关于在我国统一实行法定

中华人民共和国法定计量单位表

表 1-1 国际单位制的基本单位

量的名称	单位名称		单位符号
	中文	英文	
长度	米	metre	m
质量	千克 (公斤)	kilogram	kg
时间	秒	second	s
电流	安[培]	ampere	A
热力学温度	开[尔文]	kelvin	K
物质的量	摩[尔]	mole	mol
发光强度	坎[德拉]	candela	cd

〔注〕 圆括号中的名称与前面名称是同义词。去掉方括号后为全称, 方括号前的字为简称。