



化工冶金应用技术专著

普通高等教育“十三五”规划教材

PUTONG GAODENG JIAOYU “13·5” GUIHUA JIAOCAI

北京大学工学院研究生教学参考书

Excel 解析 化学反应工程学

袁章福 张 涛 徐 聪 王 志 编著



冶金工业出版社
www.cnmip.com.cn



冶金工业应用技术专著

普通高等教育“十三五”规划教材

北京大学工学院研究生教学参考书

Excel 解析化学反应工程学

袁章福 张 涛 徐 聪 王 志 编著

北 京

冶金工业出版社

2016

内 容 提 要

结合北京大学工学院、北京科技大学和中国科学院大学的本科或研究生课程,如化学反应工程学、清洁生产过程原理和工业生态学等的教学经验,编著本书。本书的宗旨是有益于读者从理论基础开始,加深对冶金与化学反应工程学的理解。本书首先介绍 Excel 方法解析的基础方法,然后分别针对物料守恒、流动、传热、蒸馏与蒸发、吸收、萃取、吸附、搅拌、粉体与集尘、加湿与干燥等进行了 Excel 数值方法解析。最后结合作者实际应用研究结果的实例,分别论述了组合式流化床氯化制取 TiCl_4 和 TiCl_4 高温气相氧化法反应器制备 TiO_2 科研成果。

本书适合于能源与资源工程、冶金工程、化学工程与技术和材料化学等相关专业的本科生、研究生学习阅读,对于一般工程科学和生物工程技术等方面的科研工作者以及使用 Excel 软件的人员也具有参考价值。

图书在版编目(CIP)数据

Excel 解析化学反应工程学/袁章福等编著. —北京:
冶金工业出版社, 2016. 5

普通高等教育“十三五”规划教材

ISBN 978-7-5024-7229-0

I. ①E… II. ①袁… III. ①表处理软件—应用—
化学反应工程 IV. ①TQ03-39

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2016)第 105740 号

出 版 人 谭学余

地 址 北京市东城区嵩祝院北巷 39 号 邮编 100009 电话 (010)64027926

网 址 www.cnmp.com.cn 电子信箱 yjcbbs@cnmp.com.cn

责任编辑 刘小峰 李鑫雨 美术编辑 彭子赫 版式设计 杨 帆 孙跃红

责任校对 石 静 责任印制 牛晓波

ISBN 978-7-5024-7229-0

冶金工业出版社出版发行;各地新华书店经销;三河市双峰印刷装订有限公司印刷

2016 年 5 月第 1 版, 2016 年 5 月第 1 次印刷

787mm×1092mm 1/16; 18.5 印张; 447 千字; 286 页

39.00 元

冶金工业出版社 投稿电话 (010)64027932 投稿信箱 tougao@cnmp.com.cn

冶金工业出版社营销中心 电话 (010)64044283 传真 (010)64027893

冶金书店 地址 北京市东四西大街 46 号(100010) 电话 (010)65289081(兼传真)

冶金工业出版社天猫旗舰店 yjgycbs.tmall.com

(本书如有印装质量问题,本社营销中心负责退换)

前 言

科学技术研究都要收集记录数据、编辑加工数据、分析统计数据并以适当的形式表达数据,来解释某个科学现象或者论证某一理论。这些科研数据处理过程和工程放大设计,均可在 Microsoft Excel 软件中进行。Excel 进行数据计算、分析和统计的主要特点是:操作简单易行、模型简明直观、函数种类繁多、易生成图表,并且备有一系列数据分析工具,故智能程度高、数据处理能力强。Excel 的另一特点是通用性强,能与其他数学分析软件相互传递以及能直接输入现代仪器以 ASCII 语言记录的实验数据。本书不详解 Excel 的菜单和指令,而是重点介绍 Excel 在数值分析上的应用。鼓励读者尝试使用书中未介绍到的指令,开发 Excel 的函数功能,遇到困难可利用 Excel 的“帮助”菜单。本书也未介绍如何应用 Excel 强大的数据库管理功能分析、归纳、总结和存放浩瀚的文献资料和数据信息。

本书的编写,融入了北京大学工学院、北京科技大学和中国科学院大学的本科或研究生课程,包括化学反应工程学、清洁生产过程原理和工业生态学等的教学经验,同时结合化工冶金领域的科研成果,展示了应用 Excel 数值处理和解析化工过程的实例,期望能够满足相关课程的教学与科研需求。

本书有益于读者加深对冶金与化学反应工程学基础理论的理解。书中的例题选取化学反应工程学(化学工学)教学和科研中的常见现象,着重介绍数值计算、方程求解、线性回归和非线性回归等的 Excel 使用方法和技巧。

本书第 1 章介绍 Excel 方法解析的基础方法,内容上力求浅显易懂、循序渐进,尽量用实例和图形说明操作步骤。第 2 章到第 11 章分别针对物料守恒、流动、传热、蒸馏与蒸发、吸收、萃取、吸附、搅拌、粉体与集尘、加湿与干燥进行 Excel 解析和数值处理。第 12 章和第 13 章为作者实际应用实例,分别论述了组合式流化床氯化制取 TiCl_4 和 TiCl_4 高温气相氧化法反应器制备 TiO_2 。这两章内容出自国家“863”高技术研究发展计划课题和中国科学院知识创新工程重点资助项目成果。

本书初稿第1~8章由张涛撰写,第9~11章由袁章福撰写,第12章由徐聪撰写,第13章由王志撰写,袁章福定稿。

袁章福博士为北京大学工学院教授,博士生导师,中国科学院研究生院教授,中国科学院过程工程研究所兼职研究员,北京科技大学教授,“百人计划”引进国外杰出人才,日本东京大学客员教授,承担“863”、自然科学基金和“985”等十余项国家科技项目以及与日本、韩国合作的国际科研项目。

张涛于2008年1月获得大连理工大学应用化学工学硕士学位后,直接赴日本富士精细化工株式会社工作两年,从事化学产品研发及生产工作,现任职于北京振东光明药物研究院。

徐聪博士1997年毕业于清华大学化工系,2002年获得清华大学化学工程工学博士学位,现为清华大学核能与新能源技术研究院副教授。先后主持过多项国家自然科学基金项目和工信部“三废”治理专项等科技项目,并获得工业和信息化部国防科技进步二等奖(2008,2009)和中国石油和化学工业协会科技进步一等奖(2007)等多项奖励。本书第12章内容是根据国家自然科学基金项目“复合式流化床氯化高钙镁原料制取 TiCl_4 的研究(20306030)”的研究成果撰写的。

王志博士2008年入选北京市科技新星计划,2014年获国家自然科学基金优秀青年基金资助,现为中国科学院过程工程研究所研究员。

本书的形成得益于作者在北京大学工学院、中国科学院大学化学学院和北京科技大学冶金系的教学经历。衷心感谢北京科技大学钢铁共性技术协同创新中心徐金梧、徐科、何安瑞、陈雨来、侯新梅教授和中国金属学会秘书长赵沛教授等。钢铁冶金新技术国家重点实验室薛庆国、杨天钧、郭占成、包燕平、李京社、胡晓军、焦树强教授和冶金与生态工程学院张立峰、邢献然、张建良、宋波、王福明、王静松、郭汉杰、徐安军教授等专家的支持帮助和宝贵意见,在此深表谢意。

第一作者指导的北京大学工学院研究生徐秉声、吴燕、张利娜、傅振祥、战亚鹏、王晨钰、周舟、江涌、吴湖、方艳、吴振华、邱腊松、娄元元、徐红艳、林路、王文静、陈军伟、徐致远,本科生朱元晴、顾佳欢、王启晨、韩琳、张翰宇、张海歌、陈嘉、郑裕贤、孔祥翔、戴城、韩鹏等,北京大学能源与资源工程系科研助理刘敬霞,对本书的编著进行了文献收集和书稿整理,在此表

示感谢。

本书的出版得到了国家高技术研究发展计划“863”课题（高镁钙钛矿资源新型氯化工艺关键技术研究 2008AA06Z107、冶金炉窑微孔陶瓷管膜除尘器研制 2013AA065105）和国家科技支撑项目（菱镁矿高效制备重烧氧化镁新技术 2012BAB06B02）的资助，衷心感谢国家科技部社会发展科技司和中国 21 世纪议程管理中心资源环境技术领域的王磊、裴志永、王顺兵和樊俊博士等。另外，得到国家自然科学基金项目（CO₂ 减渣护炉质能转换和炉渣润湿机理的研究 51174008 和烧结烟气净化过滤脱硫脱硝一体化集成技术 U1560101）的支持，在此特别感谢工程与材料学部朱旺喜博士。

本书在编写过程中得到了日本东京大学月桥文孝教授、松浦宏行副教授和日本九州工业大学向井楠宏教授的指导和极大关照，在此一并深表诚挚的感谢和崇高的敬意。

化学反应工程学、材料与冶金物理化学、化学动力学等相关化学工学的研究生或课程目前都是采用书籍来进行教学。在电脑飞速发展、软件日新月异的今天，这些教学内容完全可以发挥计算机技术的优势来开展教学。本书尝试以 Excel 软件为方法解析化学冶金过程，期待能为 Excel 解析其他课程起到抛砖引玉的作用。

由于作者水平和经验所限，书中难免有疏漏和不妥之处，敬请各位读者和专家给予批评指正。

袁章福

2015 年 12 月于北京大学电教楼

目 录

1 化工冶金学用 Excel 解题所需的基础知识	1
1.1 算式和函数	1
1.2 数据的处理和图表表示	9
1.3 量纲分析和单位	12
1.4 VBA 和数据计算法	17
习题	22
参考文献	24
2 物料守恒	25
2.1 物理过程	25
2.2 反应过程	32
2.3 能量守恒	36
习题	39
参考文献	39
3 流动	40
3.1 流体的运动	40
3.2 流体的质量守恒	44
3.3 摩擦损失	46
3.4 管件内的流体	53
习题	59
参考文献	60
4 传热	61
4.1 热传导	61
4.2 对流传热	65
4.3 热交换器	70
4.4 传热膜系数的变化	77
4.5 辐射传热	79
习题	82
参考文献	82

5 蒸馏和蒸发	83
5.1 沸点升高和蒸发	83
5.2 气液平衡和拉乌尔定律	87
5.3 闪速蒸馏和水蒸气蒸馏	93
5.4 两组分体系的连续精馏	102
习题	107
参考文献	107
6 吸收	108
6.1 气体的溶解度	108
6.2 吸收平衡	110
6.3 单组分吸收	111
6.4 吸收塔的构造和设计	116
习题	120
参考文献	120
7 萃取	121
7.1 液液平衡	121
7.2 单级萃取	123
7.3 多级萃取	126
7.4 固液萃取	133
习题	135
参考文献	136
8 吸附	137
8.1 吸附平衡	137
8.2 吸附操作的解析和设计	141
8.3 固定床吸附中的透过曲线	144
习题	147
参考文献	147
9 搅拌	148
9.1 搅拌槽	148
9.2 循环流量准数	150
9.3 搅拌槽的放大	151
习题	152
参考文献	153

10 粉体和集尘	154
10.1 粉粒体的物理性质	154
10.2 沉降分离	159
10.3 集尘	163
10.4 固液分离	166
习题	167
参考文献	167
11 加湿和干燥	168
11.1 空气的湿度	168
11.2 水蒸气压和湿度	169
11.3 湿度图表	172
11.4 调湿操作	174
11.5 干燥	180
习题	184
参考文献	185
12 组合式流化床氯化制取 TiCl_4	186
12.1 TiCl_4 生产与核心地位	186
12.2 组合式流化床反应器	190
12.3 高钙镁原料抗黏结氯化工艺热态试验	191
12.4 反应器模拟	205
12.5 中试示范线试验	220
12.6 结论	230
符号表	231
参考文献	235
13 TiCl_4 高温气相氧化反应器制备 TiO_2	239
13.1 氯化法钛白氧化反应器研究背景	239
13.2 氯化法钛白氧化过程相关热力学计算	245
13.3 TiCl_4 高温气相氧化过程的动力学研究	251
13.4 反应条件对钛白粉粒度、形貌及晶型影响的研究	259
13.5 氯化法钛白氧化反应器结疤物微观结构及结疤机理	274
13.6 结论	281
符号表	282
参考文献	283

1

化工冶金学用 Excel 解题所需的基础知识

化工冶金学是化学工程与技术和冶金工程领域中重要的以计算为中心的边缘学科，它通过专业设备装置捕捉化学现象的具体数据进行计算，然后再模拟设计出一些设备装置^[1]。基于上述原因，利用 Excel 工作表（worksheet）为工具进行设计和计算具有非常重要的意义。

另外，日常工作中，通过利用作图来预测数据的方法也经常使用，Excel 具备数据展示和处理的功能，是非常实用的工具。通过本书的学习，可以熟练掌握 Excel 的功能，并以此为基础来进行化工操作方面的计算。

1.1 算式和函数

构建数学模型来研究化工方面的问题，既直观又简洁，是解决化学工程问题最重要的手段^[2]。Excel 的工作表中有很多的运算公式可以使用，是解决化工问题最常用的工具之一。另外，Excel 工作表中还配备了多种函数和统计分析工具，作为研究化工冶金领域的研究者，非常有必要熟练掌握使用 Excel 进行各种运算的能力。

Excel 伴随着 Windows 操作系统的发展，其操作版本也在逐年更新，其功能也在更新，现在比较普遍使用的是 Excel 2003 版。图 1-1 是 Excel 2003 版插入函数的窗口视图。本书也是按照这个版本编写教材。然而，2002 版和 2007 版也被大家广泛使用。Excel 2007 版（如图 1-2 所示）工作表的设计和文件管理有所变化，但软件本身的功能并没有发生太大变化，完全可以根据本书进行学习。

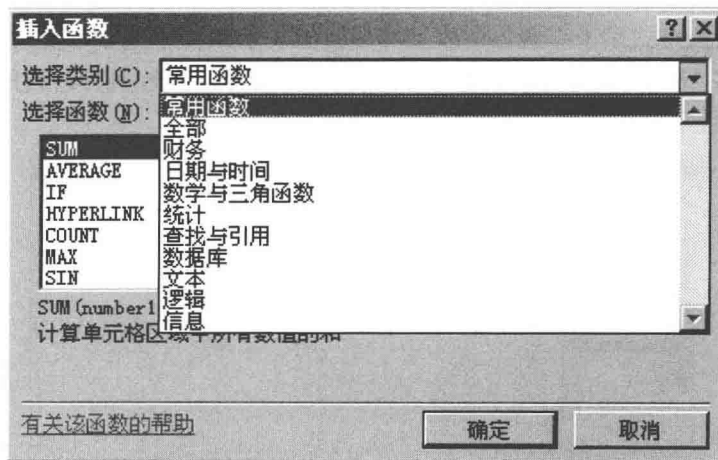


图 1-1 插入函数的窗口视图（Excel 2003 版）

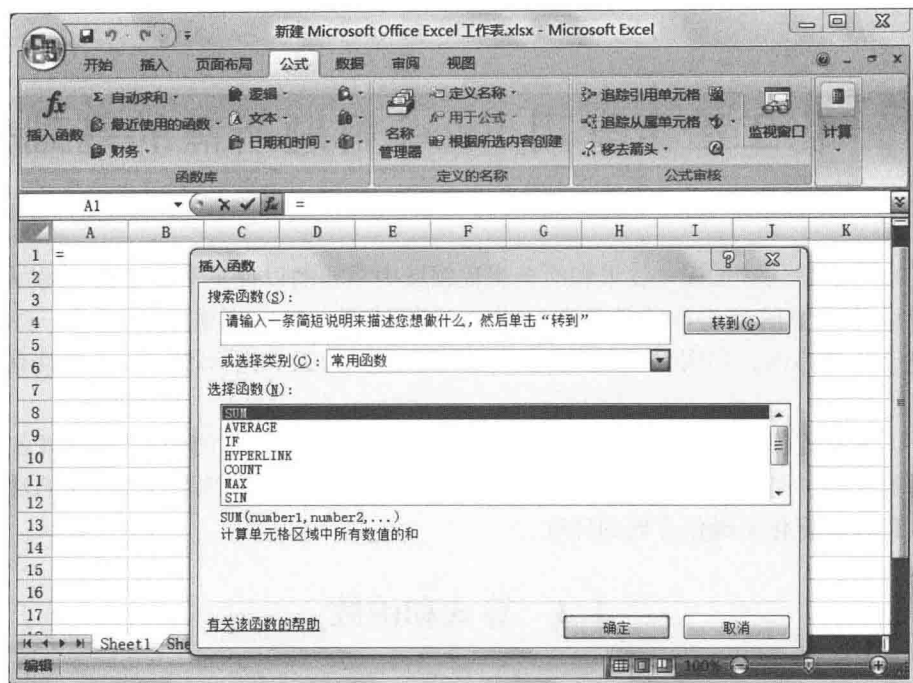


图 1-2 插入函数的窗口视图 (Excel 2007 版)

1.1.1 输入常量和公式

在 Excel 工作表中选定单元格或区域后,即可在所选的工作区输入常量和公式。常量是直接键入到单元格的数据,这些数据可以是文字和数值。常量的值不能改变,除非选定常量所在的单元格,在编辑框中进行修改。

常用的数字输入格式有“常规”、“数值”和“科学记数”,默认格式是“常规”。常规的格式不包含任何特定数字格式,将数字显示为整数、小数,或者在数字长度超出单元格宽度时,以科学记数形式表示。科学记数是用 E 表示的指数格式:1.029E-04 表示 1.029×10^{-4} 。数值格式用于一般数字表示。数值的表示和科学记数都要设置小数点位置,默认值是 2。化学问题常要考虑有效数字,小数点设置可保证数据有适当的有效数字,使数据排列规整。数字设置窗口,如图 1-3 所示。

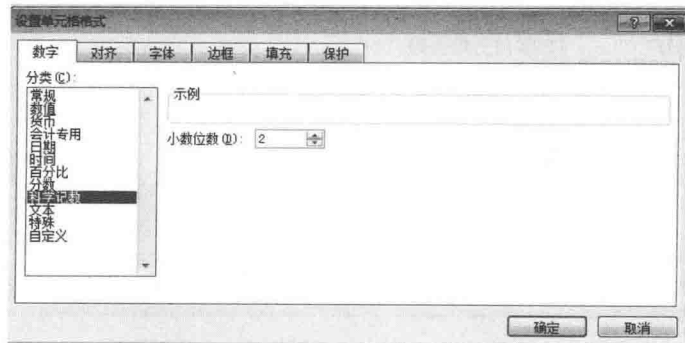


图 1-3 单元格中的数字设置窗口

公式是由常量、单元格引用、名称、函数或操作符组成的一串序列，它以等号“=”开始输入。利用公式可以从工作表中已有的值产生所需新值。它们的运算顺序同于一般算数运算规则。后续例题中，我们录入公式时，将使用到下面的算数计算符号。

算数计算符号有：

+ - * / ^
加 减 乘 除 乘幂

自动填充功能是 Excel 表格计算的特有功能，可以利用行和列关联自动控制拷贝编辑。如图 1-4 所示，将鼠标的位置放到单元格的右下角，会出现一个黑色的“+”字，然后可以对相应的行和列进行拖拽。如果单元格使用“\$”符号进行固定，将被作为一个固定的数值使用。

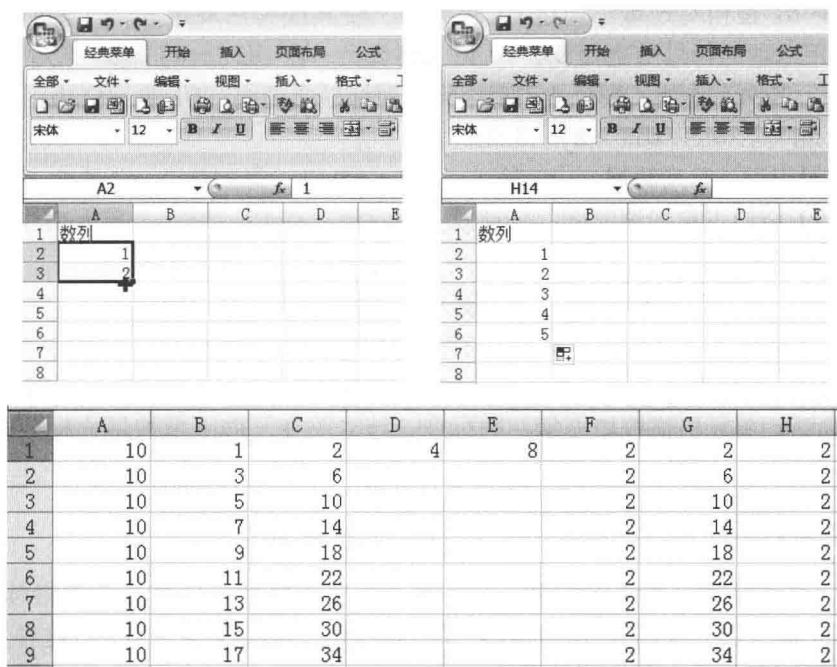


图 1-4 Excel 中的自动填充功能

Excel 通过地址和名字引用单元格或区域中的数据。在电子表格处理数据的过程中，单元格地址是系统运行的基本要素，借助它许多功能才可以正确执行。若被引用单元格的地址改变了，则被引用的公式中它的地址也随之改变；若被引用单元格的值改变了，则引用它的单元格也随之改变。

引用单元格的地址分为绝对地址、相对地址和混合引用地址^[3]。相对地址的形式等同于普通单元格地址，即仅用列标和行号标示单元格。相对单元格是以活动单元格为基准，其他单元格地址相对此单元格的相对位置变化。绝对地址是 Excel 被引用单元在工作表的确切位置，不以任何单元格为基准。绝对地址的列标和行号前均加符号“\$”，例如绝对地址 \$E\$2。混合引用地址只在行号或列标其中一个前面加符号“\$”，表示对该行或该列绝对引用。例如 \$E2 表示引用过程中列标不变，行号 2 随活动单元格改变而改变。E\$2 表明列标 E 随活动单元格而变，行号 2 不变。

在介绍活动单元格及相对引用和绝对引用等概念之前，先介绍下 Excel 的自动填充功

能,可以方便地输入有变化规律(如以固定值递增或递减)的一系列数据。这一功能可用鼠标拖拽填充柄,或用“编辑”菜单的“填充”指令完成。

现以图 1-4 为例介绍用拖拽填充柄自动填充过程:

(1) 复制功能(A 列数据)。在 A1 单元格输入 10 后,选定 A1,鼠标指向填充柄,这时鼠标由空心十字(+)变为实心十字(+),按住左键不放,拖拽到 A9 单元格,所有单元格均填入 10。

(2) 扩展序列(B 列数据)。B1 单元格输入 1, B2 单元格输入 3。选定 B1 和 B2 单元格,鼠标指针指向填充柄,将实心十字拖拽到 B9 单元格。Excel 根据 B1 和 B2 的递增量 2,继续填充下面的单元格,于是得: 5, 7, 9...

(3) 相对引用(C 列数据)。在 C1 单元格输入公式: $=2 * B1$, 单击 Enter, C1 的值为 2。公式中 B1 是相对地址。选定 C1 单元格,使其成为活动单元格。若向下拖拽填充柄,公式引用地址的行号随之而变, C2 单元格为: $=2 * B2 (=6)$; C3 单元格为: $=2 * B3 (=10)$...。若向右拖拽,则公式引用地址的列标随之而变, D1 单元格为: $=2 * C1 (=4)$; E1 单元格为: $=2 * D1 (=8)$ 。

(4) 绝对引用(F 列数据)。F1 输入: $=2 * \$B\1 , 得到值 2。公式中 $\$B\1 是绝对引用,选中 F1 后向下拖拽填充柄,自动填充同一值。在 F2, F3...单元格中的公式均为 $2 * \$B\1 , 引用地址未变。

(5) 混合引用(G 列和 H 列)。G1 输入公式: $=2 * \$B1$, 得到值 2。 $\$B1$ 是混合引用地址, G1 为活动单元格后向下拖拽填充柄,列标不变,行号变。因此向下拖拽效果等同于向下拖拽相对引用公式(C 列)。H1 输入公式: $=2B\$1$, 得到值 2。 $B\$1$ 是混合引用地址, H1 为活动单元格拖拽填充柄,列标变,行号不变,向下拖拽填充柄效果等同于绝对引用(F 列)。

1.1.2 单变量求解

使用 Excel 进行数据预测方法中,有一种通过单元格就可以尽快得到最佳解的方法,叫做单变量求解(为得出特定结果而进行单变量求解, Goal Seek 方法)。这种方法对于预测与设定条件一致的单元格的数据有效。

例题 01

利用单变量求解二次方程 $x^2 + 5x + 1 = 0$ 。

如图 1-5 所示,在工作表上设定好数据,为了运行单变量求解,需要预先设定好公式输入单元格、目标单元格和可变单元格三个单元格。

TREND					
					$=B4*D6^2+B5*D6+B6$
	A	B	C	D	E
1	二次方程式				
2	$x^2 + 5x + 1 = 0$				
3	Goal Seek				
4	a=	1	公式输入单元格	$=B4*D6^2+B5*D6+B6$	
5	b=	5	目标单元格	0	
6	c=	1	可变单元格	-4.791288174	
7					

图 1-5 以二次方程的解法为例说明单元格的设定(初始值 $x_0 = 1$)

在 D4 单元格中输入二次方程。由于能够变化的单元格是方程式的解，应设定好初始值。

单元格的设定

单元格 D4 = $B4 * D6^2 + B5 * D6 + B6$

单元格 D5 设定为 0

单元格 D6 初始值设定为 1

由于单变量求解计算只可以得到一个解，应该注意二次方程也会出现两个实根的情况。

为了判定二次方程有几个解，使用散点图中的图表确认也很重要。

具体如图 1-6 所示，画出 $y = x^2 + 5x + 1$ 的图表，与 x 轴的交点在 0 附近和 -5 的附近。

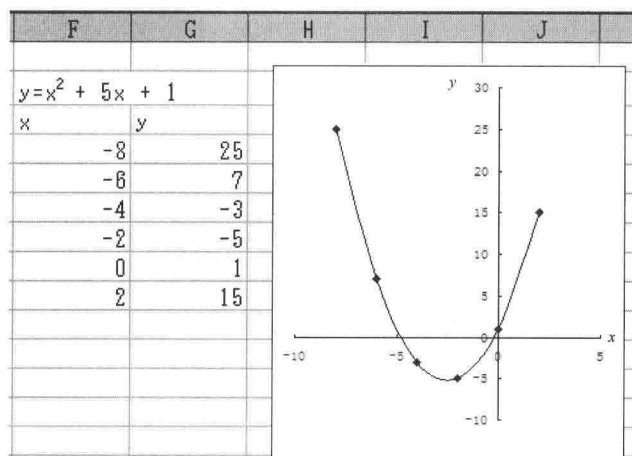


图 1-6 图表显示方程有两个根

通过菜单栏中的“工具”选择“单变量求解”。按照图 1-7 进行单变量求解的设定，执行命令后会变成像图 1-8 一样的结果，仅可以得到一个解 -0.2087。这个方程式还有一个解，有必要求出。得到的根 -0.2087 是可变单元格的数值为 1 时求得的，必须理解为得到的是接近于 1 的解。这个方程式接近 -5 时也有解，单元格 D6 中输入 -5 以后再计算，如图 1-9 所示。

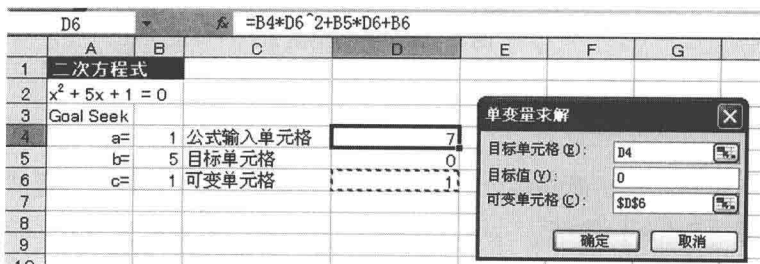
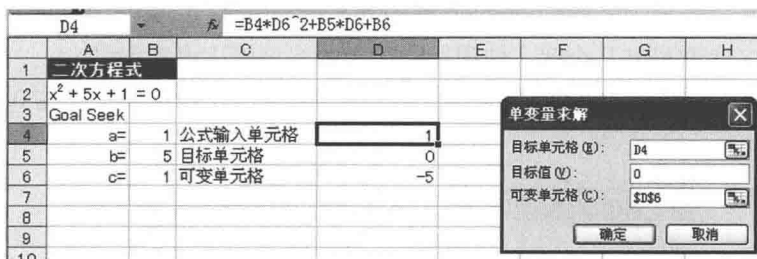


图 1-7 单变量求解的对话框中进行单元格的设定



图 1-8 解的结果 1

图 1-9 再次计算 (初始值 $x_0 = -5$)

单元格的设定

单元格 D4 = $B4 * D6^2 + B5 * D6 + B6$ 算式输入单元格(单变量求解)

单元格 D5 0 目标值

单元格 D6 最适解 可变单元格

单变量求解的初始设定值是 -5 时, 就会得到如图 1-10 一样的结果, 得到的另一个解为 -4.79。

需要注意的是, 只有在知道存在几个解的情况下, 才可以运用单变量求解计算。



图 1-10 解的结果 2

1.1.3 规划求解

当方程式不单是一个, 而是多个方程式存在的情况, 也就是联立方程式求解时, 可以利用规划求解器 (Solver) 求解。

例题 01

将下述三元联立方程用规划求解器计算求解。

$$\begin{cases} 3x + y + z = 2 \\ x + 3y + z = 0 \\ x + y + 3z = 5 \end{cases}$$

如图 1-11 所示,按照三元联立方程式于工作表中对单元格进行设定。

在规划求解器中输入算式,需要设定好目标单元格。由于有三个方程式,要设定三个目标单元格。目标值是方程式的结果值,同单变量求解一样进行设定。可变单元格也是为了求解,设定好初始值。

TREND X ✓ fx = 3*E2+E3+E4					
	A	B	C	D	E
1	求解器 (solver)	目标值	目标单元格		可变单元格
2	$3x + y + z = 2$	2	$=3*E2+E3+E4$		1
3	$x + 3y + z = 0$	0	5	y=	1
4	$x + y + 3z = 5$	5	5	z=	1
5					

图 1-11 算式参数的设定

单元格的设定

单元格 C2 $= 3 * E2 + E3 + E4$

单元格 C3 $= E2 + 3 * E3 + E4$

单元格 C4 $= E2 + E3 + 3 * E4$

设定好目标单元格及其他单元格的数值。

从菜单栏的“工具”中选择“规划求解”,点击窗口“约束”中的“添加”,就会显示成如图 1-12 所示的添加约束条件的窗口。约束条件通过目标值设定后,显示结果如图 1-13 所示。设定好可变单元格,添加下面两个联立方程式的限制条件后,点击“求解”,就会变成如图 1-14 所示的结果。

B3 X ✓ fx = 3*E2+E3+E4					
	A	B	C	D	E
1	求解器 (solver)	目标值	目标单元格		可变单元格
2	$3x + y + z = 2$	2	5	x=	1
3	$x + 3y + z = 0$	0	5	y=	1
4	$x + y + 3z = 5$	5	5	z=	1
5					
6					
7					
8					
9					
10					
11					
12					

添加约束

单元格引用位置: = 约束值 (C):

确定 取消 添加 (A) 帮助 (H)

图 1-12 添加约束条件的单元格设定



图 1-13 追加三个约束条件的设定



图 1-14 最适解的结果 (规划求解结果)

单元格的设定

单元格 C2	= 3 * E2 + E3 + E4	目标单元格 1 (Solver)
单元格 C3	= E2 + 3 * E3 + E4	目标单元格 2 (Solver)
单元格 C4	= E2 + E3 + 3 * E4	目标单元格 3 (Solver)
单元格 B2	2	目标值 1
单元格 B3	0	目标值 2
单元格 B4	5	目标值 3
单元格 E2	x 最适解	可变单元格 1
单元格 E3	y 最适解	可变单元格 2
单元格 E4	z 最适解	可变单元格 3

从结果可以看出求得的解为 $x=0.3$, $y=-0.7$, $z=1.8$ 。

确认如图 1-14 所示报告栏的解答后, 解答报告可以用其他工作表进行显示。上述操作即是利用 Excel 中的“规划求解”(Solver)进行运算。