

大專用書

化學工程 與計算機運用

*Introduction to
Chemical Engineering
and
Computer Calculations*

ALAN L. MYERS and WARREN D. SEIDER

*Department of Chemical and Biochemical Engineering
University of Pennsylvania*

馬俊雄譯著
復漢出版社印行

大專用書

化學工程 與計算機運用

*Introduction to
Chemical Engineering
and
Computer Calculations*

ALAN L. MYERS and WARREN D. SEIDER

*Department of Chemical and Biochemical Engineering
University of Pennsylvania*

馬俊雄譯著
復漢出版社印行

中華民國七十二年十二月出版

化學工程與計算機運用

原著者：ALAN L. MYERS and
WARREN D. SEIDER

譯著原：馬 俊 雄

出版者：復 漢 出 版 社

地址：台南市德光街六五一號

郵政劃撥三一五九一號

發行人：沈 岳 林

印刷者：國 發 印 刷 廠

打字者：速成打字印刷有限公司

地址：台南市逢甲路235巷3弄6號

版權 · 所有
翻印 · 必究

平裝 二角八分
精裝 三角二分

本社業經行政院新聞局核准登記局版台業字第〇四〇二號

序

處於石油價格暴漲的今天，化學工程師的任務更加艱鉅。今後唯有節省能源，以最低廉的成本，生產最精良的產品，才有希望突破層層的難關。這是一個理想，也是所有現任與未來的化學工程師們必須共同肩挑起重擔。

本書採用基本的化學程序來探討物質平衡與能量平衡的問題，不僅希望能藉此讓讀者概括地瞭解什麼是化學工程，更希望能使讀者獲致化學工程的基本知識，奠定為化工界致力的信心與能力。如果你曾經接觸過「化學工程」，那麼你必能體會，化學工業不僅是一種耗費能源的工業，而且在程序中所發生的問題多是十分棘手的。有鑑於此，本書乃以實際實驗操作為範例配合精要的理論，詳加解說，相信讀者不難瞭解其中的深意，且必可獲益不淺；他日若再遇上棘手的問題，必能化難為簡，迎刃而解。

其次是對於計算機的應用。在化學工程上常常會遇上無法用筆算來解的方程式，即使可用筆算來解，卻也多要浪費很多的時間，因此利用計算機來解方程式已成必然的趨勢。目前可以說幾乎各校的化學工程系都開有「計算機應用」的課程，但所談述的範圍僅止於解方程式所用的數值分析法上，很少談到計算機在化學工程上的應用，因此常常使同學們有著無法將計算機與化學工程結合起來的困惑，這實在是化工界的憾事。本書採用實際的操作程序為例，經過詳細的分析後，再配合題意來設計程式。程式所採用的語言是最普遍的FORTRAN程式語言；希望程式與例題分析的配合，能夠滿足讀者諸君的求知欲。

全書共分十三章，前四章概述化學工程的基本認識；第五章談論數據的處理程序；從第六章至第十章則論述各種物質平衡與能量平衡的問題；最後三章是介紹用來解線性或非線性方程式的數值分析法。理論與實例的配合、井然有序的內容與詳細解說的配合，希望能夠成為讀者諸君心目中的一本好書。

HW 670/10

符號說明表

1. 大寫

A	面積 原子量	N	方程式的個數
B	二次維勒係數 底流物的流量	N_p	儀器參數的個數
C_p	恒壓下的比熱	N_q	熱量項目的個數
D	蒸餾液的流量	N_r	物流的數目
ϵ	電動勢	N_s	變數的個數
E	能量	N_w	功的種類數目
F	流量，莫耳除以單位時間	P	壓力
F'	流量，質量除以單位時間	P_v	蒸氣壓
F	力	P_c	臨界壓力
G	Gibbs 自由能 ($H-TS$)	P_r	對比壓力 $= P/P_c$
H	焓 亨利常數	Q	熱量
I	電流	R	氣體常數 半徑 回流比
K	化學反應的平衡常數	S	熵
L	液體的流量	T	熱力溫度
M	分子量	T_b	正常沸點
$\bar{M}$	混合物的平均分子量	T_c	臨界溫度
N_A	亞佛加厥數	T_r	對比溫度 $= T/T_c$
N_c	組成物的個數	T_0	參考溫度
N_d	設計變數的個數	U	內能
		V	體積 蒸氣的流量

W 功

Z 荷電量

2. 小寫

a 加速度

c_p 恒壓下的莫耳比熱

c_v 定容下的莫耳比熱

d 差值的運算符號

e 自然對數的底

f 揮散力

f_{ij} 在 i 管流中所含 j 成份的揮散力

g 莫耳 Gibbs 自由能

g_c (1-2) 式中的常數

g 重力加速度

h 莫耳焓

h' 單位質量的焓

k 液 - 氣平衡常數

液 - 液平衡 = T/T_c

波茲曼常數

反應速率常數

m 質量

m_{jk} 在 j 成份中所含元素 k 的原子數

n 莫耳數

q 每莫耳的熱量

q' 每單位質量的熱量

r 化學反應速率

s 莫耳熵

s' 每單位質量的熵

t 時間

u 莫耳內能

u' 每單位質量的內能

v 莫耳容積

v' 比容 (每單位質量所佔有的體積)

v_c 臨界點的莫耳容積

v 速率

w 功除以莫耳數

w' 功除以單位質量

x 莫耳分率

液相中的莫耳分率
距離

x' 質量分率

x_{ij} 在 i 管流中所含 j 成份的莫耳分率

y 氣相的莫耳分率

z 壓縮因子 ($z = Pv/RT$)
高度
在輸入蒸餾塔的混合進料中 (如液體與蒸氣) 所含的莫耳分率

z_c 臨界點的壓縮因子

3. 希臘字母

Γ 分子間的位能

γ 比熱之比 = c_p/c_v
液相中的活性係數
轉化率

Δ 有限的差值

ϵ 收斂的容許誤差

- θ 角位移 (徑度量)
 λ 液體的蒸發熱
 ν 化學計量係數 (或稱化學反應係數)
 π 周長與半徑的比值
 ρ 密度, (質量除以體積)
 τ 轉矩
 時間
 ω 角速度, 徑度量
 除以單位時間

4. 下標符號

- c 代表臨界狀態
 i 代表管流號碼
 j 代表組成物的代號
 m 代表混合物
 r 代表對比性質

5. 上標符號

- e 熱力的過量性質
 f 代表化合物的生成
 m 代表恒溫的混合程序
 o 具有零壓力 (即理想氣體) 的條件限制
 代表參考狀態
 代表函數 (單一變數) 的一次微分
 代表以質量為基量
 (與莫耳基量正好相反)
 * 未知數的猜測值

6. 縮寫與特殊的協定

{ } 大括號代表函數, 如 $f\{x\}$

○ 設計變數 (已知值)
 以此圓圈起來

— 劃在符號的上方,
 代表莫耳平均值

(g), (l), (s) 代表在化學反應中的物質狀態 (氣相、液相或固相)

atm 大氣壓

Btu 英制的熱單位

°C 攝氏溫度

cal 卡路里

cm 公分

°F 華氏溫度

ft 英尺

g 公克

hp 馬力

hr 小時

in. 英吋

J 焦耳

°K 凱氏溫度

K.E. 動能

kg 仟克

kw-hr 仟瓦-小時

lb 磅質量

lb_f 磅力

ln 自然對數

符號說明表

$\log_{10}$	以 10 爲底的對數	psi	磅力除以平方英吋
m	公尺	° R	瑞氏溫度
min	分	rpm	每分鐘所轉的周數
mm	毫米	sec	秒
mole	克—莫耳	V	伏特
N	牛頓	w	瓦特
P.E.	位能		

化學工程與計算機應用/目次

第一章 簡 介 (Introduction) 1

1-1	化學工程	1
1-2	化學程序的程序單元	1
1-3	物質與能量平衡	7
1-4	程序裝置的設計	8
1-5	化學程序：程序單元的系統	8
1-6	經濟學	10
1-7	化學程序的控制	10
1-8	能源與周遭環境	13
1-9	單位系統	14
問 題		30

第二章 化學程序 (Chemical Process) 33

2-1	化學程序的演進	33
2-2	由石油或煤製配天然氣(甲烷)	34
2-3	海水淡化	42

第三章 程序的綜合 (Process Synthesis) 63

3-1	程序操作	63
3-2	化學狀態	66
3-3	程序的綜合	66
3-4	程序綜合的例子：氯乙炔的製造程序	67

第四章 物質的物性與化性

(Physical and Chemical Properties of Substances)..... 80

4 - 1	純質流體的測定體積性質	80
4 - 2	科學文獻的數據來源	126
4 - 3	純物質的常數	128
4 - 4	平滑數據的表格、方程式與圖形	130
4 - 5	混合物的性質	145
問 題		153

第五章 數據處理 (Data Processing)..... 158

5 - 1	修正、近似值與內插法	158
5 - 2	圖解法	160
5 - 3	最小平方法	172
5 - 4	數值內插法	180
5 - 5	性質資料系統	184
問 題		196

第六章 程序裝置的平衡

(Material Balances for Process Units) 202

6 - 1	質量守恒的原理	202
6 - 2	程序的種類：分批式與連續式	203
6 - 3	物質平衡方程式	205
6 - 4	多組成物的物流	206
6 - 5	一個例題說明	207
6 - 6	物質平衡的一般分析	209
6 - 7	在指定設計變數時的一般誤差	220
6 - 8	在寫物質平衡方程式時的通病	222

6-9	分離的程序	222
6-10	利用電子計算機來解物質平衡的問題	245
問 題		251

第七章 化學反應器的物質平衡

(Material Balances for Chemical Reactors).....		258
7 - 1	化學反應	258
7 - 2	化學反應器的物質平衡方程式	263
7 - 3	多反應的物質平衡	272
7 - 4	非平衡反應的轉化率	277
7 - 5	物質平衡的視察	284
7 - 6	簡化的化學反應器模型：CSTR 反應器.....	286
7 - 7	利用計算機解反應器的物質平衡方程式	294
問 題		300

第八章 程序裝置系統的物質平衡

(Material Balances for Systems of Process Units)		312
8 — 1	回流	312
8 — 2	排棄	322
8 — 3	化學程序的物質平衡	328
8 — 4	modular 近似法	330
8 — 5	利用電子計算機的modular 近似法	342
問 題		351

第九章 能量平衡之概述

(Introduction to Energy Balances)	363
---	-----

9 - 1	熱力學第一定律	363
9 - 2	焓與熱	379
9 - 3	無參與反應的物質之焓值計算	381
9 - 4	參與反應的物質之焓值計算	389
9 - 5	非恒溫狀態的能量平衡	397
問 題		410

第 十 章 物質與能量平衡

(Material and Energy Balances)..... 419

10 - 1	物質平衡方程式的複習	419
10 - 2	能量平衡的複習	420
10 - 3	問題的分析	422
10 - 4	物質與能量平衡的聯立	446
問 題		500

第十一章 單一方程式之解

(Solution of Single Equations)..... 506

11 - 1	圖解法	506
11 - 2	連續取代法	509
11 - 3	Wegstein 法	516
11 - 4	牛頓法	520
11 - 5	半區間法	526
問 題		528

第十二章 線性方程式的聯立

(Simultaneous Linear Equations)..... 531

12 - 1	獨立方程式	531
12 - 2	Gauss - Jordan 消去法	532

12 - 3 解綫性方程組的計算機程式	536
問 題	540

第十三章 非綫性方程式的聯立

(Simultaneous Nonlinear Equations) ... 542

13 - 1 Precedence - Ordering 法	543
13 - 2 Tearing 法	548
13 - 3 不需偏微分的反覆計算法	550
13 - 4 需要偏微分的反覆計算法	556
問 題	566

附錄 I 解化學反應器的物質平衡方程式

附錄 II 元素週期表

附錄 III 之 1 FORTRAN 的衍生語言

附錄 III 之 2 電子計算機的種類

附錄 IV 相的與化學的平衡

第一章 簡 介

Introduction

1—1 化學工程

(The chemical Engineering profession)

從事工程工作的目標乃是設法將科學知識應用於改善生活品質的具體行為上。

程序的操作實乃所有化學反應所必須的操作，而化學工程則是程序設計、組織與操作的總稱。

你可曾想到“西元 2000 年時，化學工程師的工作是要處理那些問題”？也許並沒有一個人能夠真正瞭解，但有一些可能的事項是值得一提的，即旅行於太陽系間的生命維繫系統，在地球上建立可再利用廢物以保存天然能源的化學工程，以及開發新的物質能源等等。未來的化學程序務必遵循化學與物理的天然法則；本書的目的就是在介紹這些法則、原理、技巧與實習，使得化學工程的從事者實得其名。

目前，計算機已取代計算尺，而成爲今日工程計算所必需的工具。計算機語言的巧妙設計，可幫助工程師更細心的測試工程上的基本原理。在這本書中，我們也考慮計算機的限制與能力，儘可能的應用於化學工程上。

1—2 化學程序的程序單元 (Process Units, the Building Blocks of chemical processes)

一套完整的製造程序，在化學工程師設計之初，可分成若干個單元操作來設計。這些單元操作包括流體的流動、熱傳、冷凝與蒸沸、化學

反應、結晶、氣體擴散、沈澱 (sedimentation)、過濾 (filtration)、吸收 (absorption)、吸附 (adsorption)、萃取 (extraction) 與乾燥 (drying) 等等。

所謂程序單元 (process unit) 乃指一種儀器，或是在物質上已發生變化 (物理、化學或兩者都具有的變化) 的化學程序之一部份。大部份的程序單元比任一單元操作易於完成。

圖 1-1 所示者乃一典型管狀反應器的程序裝置。此反應器乃是為放熱且需固體催化劑的氣體反應而設計的。進料氣體的流速穩定，且被

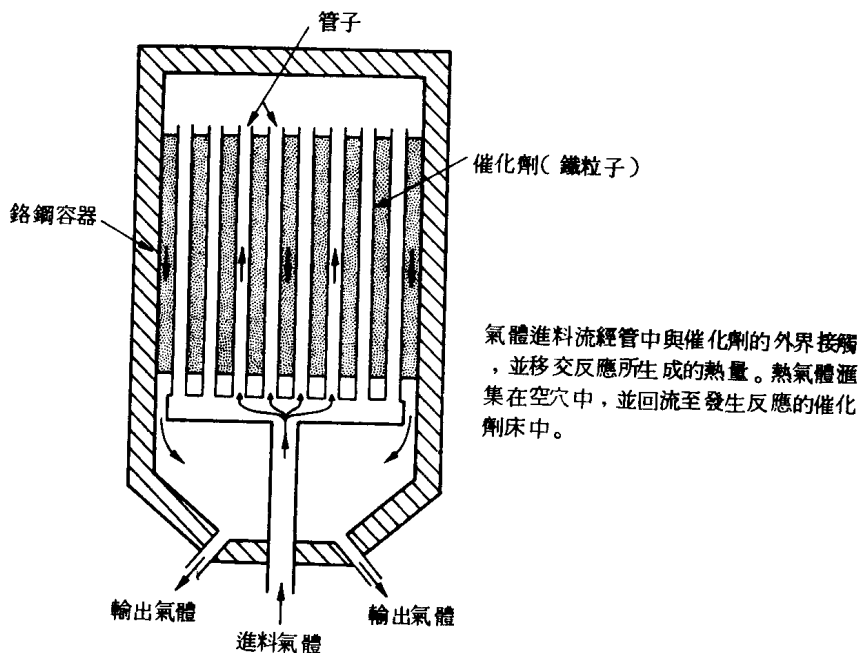


圖 1-1 管式反應器

加熱至反應的溫度；熱的氣體混合物馬上與催化劑接觸，反應所放出的熱量被用來增加進料的溫度。反應完成後，氣體產物由反應器流出，其流速依然保持穩定。總之，此管狀反應器一定包含了三個單元操作，即熱傳、流體的流動與化學反應。

圖 1-2 所示者，乃一吸收器。這個程序裝置是將一種可液化的氣體（如氨）從氣體流（如空氣）藉由液體流（如水）的吸收功能而分離

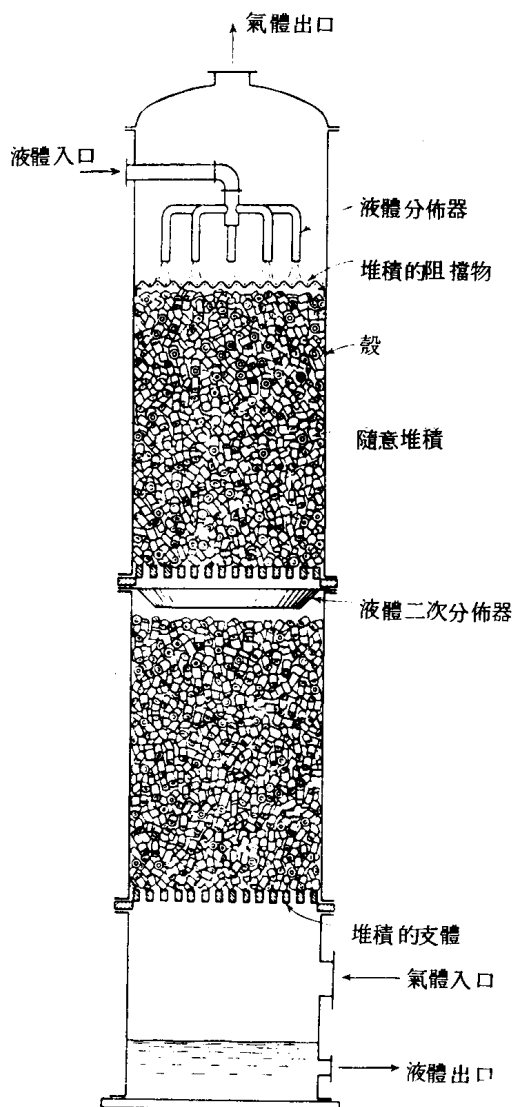


圖1-2 氣體吸收器

出來。利用泵將氣體由下往上打，經過細小且中空之陶製的圓柱體，則氣體與液體始可充分接觸，以便達成吸收的目的。由吸收器底部通入的氣體中含有高量的可液化蒸氣，而同一時間由吸收器頂端流出的氣體，其中的可液化蒸氣已被液體流所吸收了。

圖 1 — 3 (a)所示者乃一蒸餾塔。此一裝置的功能乃在將低沸點的物

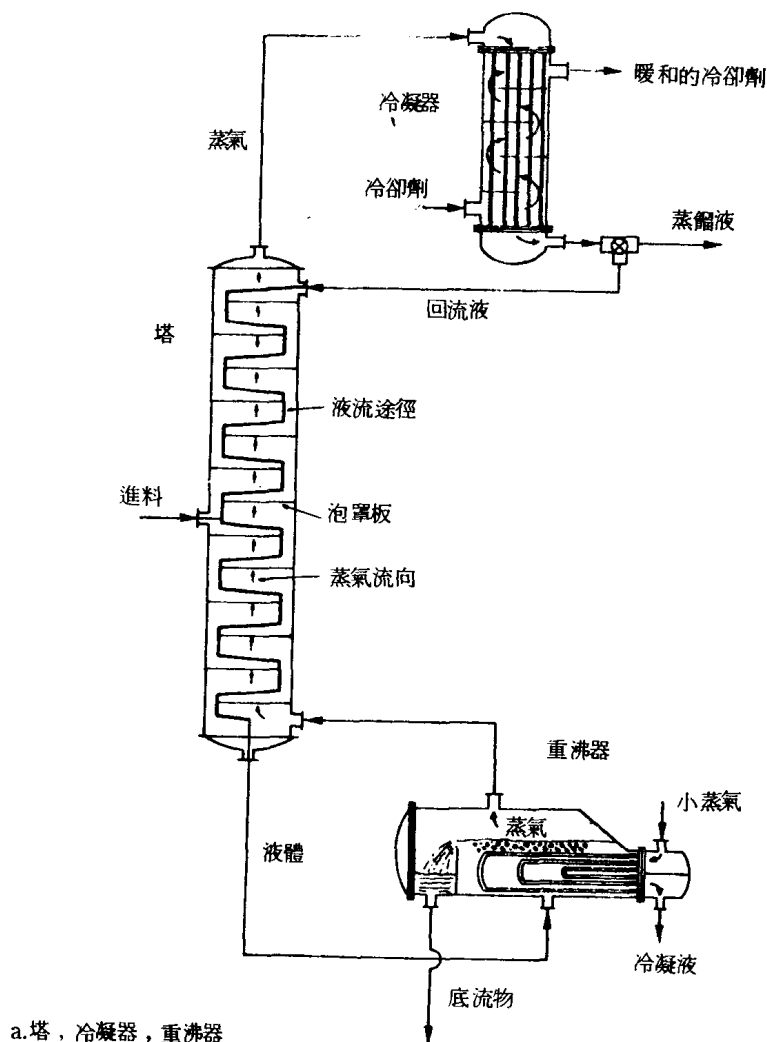


圖 1 — 3 蒸餾塔