



计算机化学化工丛书

Computer, Chemistry and Chemical Engineering Series

计算机辅助化工设计

孙岳明 陈志明 肖国民 编著

科学出版社

计算机化学化工丛书

计算机辅助化工设计

孙岳明 陈志明 肖国民 编著

科学出版社

内 容 简 介

本书为《计算机化学化工丛书》之一。

本书全面地介绍了利用计算机进行化工过程的设计。全书共九章,主要内容包括各单元操作,如传质、传热、精馏、吸收与吸附分离等,以及化学反应器的计算与设计,为化工科技工作者开发计算机化工软件提供参考,也有助于为高等院校化工专业学生学习与应用计算机化工软件打下坚实基础。本书内容全面、新颖、实用。

本书可作为化学化工相关领域的科研人员及工程技术人员、相关专业师生的参考书和教材。

图书在版编目(CIP)数据

计算机辅助化工设计/孙岳明,陈志明,肖国民编著. —北京:科学出版社,2000

(计算机化学化工丛书/许志宏主编)

ISBN 7-03-008353-9

I. 计… II. 孙… III. 化工过程-计算机辅助设计 IV. TQ02-39

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2000)第 04267 号

科学出版社 出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码:100717

源海印刷厂 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2000 年 11 月第 一 版 开本:850×1168 1/32

2000 年 11 月第一次印刷 印张:8 3/8

印数:1—2 800 字数:209 000

定价:18.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换(北燕))

《计算机化学化工丛书》
编 委 会

主 编 许志宏

副主编 杨小霞

编 委 (以姓氏笔画为序)

马沛生	王淀佐	王 夔	许 禄
李 科	来鲁华	陈丙珍	陈冀胜
陈凯先	陈念贻	陈敏伯	陈维明
杨友麒	严新建	林少凡	郑崇直
周家驹	胡鑫尧	俞汝勤	郭传杰
郭 力	袁身刚	麻德贤	惠永正
潘忠孝			

《计算机化学化工丛书》序

化学化工是信息量特别大的一门学科。到 2000 年 4 月底,在 CAS 录的化学物质约 2400 万种,它们的各种性质加上多元体学的性质,可以说是一个无边无际的数据海洋。于是,化学数据库的建设就成为 20 世纪后 20 年国际上的一件大事。中国科学院从 1979 年开始建设化学数据库,迄今已经整整 20 年。其学院从 1979 年开始建设化学数据库,迄今已经整整 20 年。其间,多次得到国家和中国科学院的奖励。

长期以来,人们不仅希望能定性地掌握而且希望能定量地了解化学化工学科的规律,而计算机的能力及相关技术高速发展,正在帮助人们一步一步地实现着这个愿望。从理论化学的计算、谱图解析、化学计量学、化工过程模拟、热力学的复杂计算,都在计算机的帮助下得到了很大的发展。

上述基础工作作为化学化工领域的工作者增加了很大的自由度:可以用计算机帮助对化合物的谱图解析,帮助选择合成路线,帮助进行药物分子设计,可以进行新过程、新技术的开发,可以进行大型工业装置的设计,可以对工厂的生产过程进行优化,……等等。

在改革开放的 20 年里,我们的计算机化学从无到有,形居了一支生机勃勃的研究队伍,也形成了一个很大的用户和读者群体。到 21 世纪,这个群体更需要有能力利用计算机帮助自己的工作,所以本套丛书中也包含一些计算机化学化工的教材,以利于化学化工本科生和研究生的培养和工程人员自学。

所以,我们希望通过本套丛书介绍一些解决问题的方法,帮助读者在遇到问题时,知道如何去解决问题。为此,要求作者在自己的著作中,要给出软件、数据的出处、网络地址或光盘。时代发展

得很快,仅做到这一点显然还是不够的。我们特别注意到近年来,Internet 网络的高速发展已经给我们的时代带来了巨大变化。到1999年7月,Internet 已经是一个连接5600多万个节点的一个网络系统,它上面的文本信息已经超过600亿字节。这些信息一个最大的长处是时间的滞后最少,易于通过计算机获取。

如果能将科学数据库在网上的功能,由数据的存取扩大到运算、绘图、模拟等多方面,必将极大地推动科学数据库工作的发展和广泛使用。在21世纪,将逐步可以做到,人们在用户端将数据从库中取出,在服务器端程序系统上计算,结果以图形或多媒体方式输出到用户端。据了解,我们有些作者在自己的工作中已经能够在网上实现数据查询、计算、绘图、三维图形显示等。

进入21世纪,Internet 网络系统的应用将更加普及,Internet 网络的客户/服务器的应用将进入千家万户,进入教室和办公室的各个角落。所以,如果能将科学数据库和计算程序库在网络服务器上实现,那么它的普及应用,将会随着计算机网络的推广而推广。

如果有的作者,目前仅能给出单机版本的软件,也欢迎他们能再作一点工作,很快能达到上网服务的目的。相信进入21世纪不久,在放户上人们就有可能逐步享受到多种媒体的全方位的科学信息的服务。

这套丛书是我国多位化学化工学科的专家、教授、学者多年辛勤劳动的成果,也是科学出版社、国家自然科学基金委员会优秀研究成果专著出版基金和中国科学院科学出版社基金大力支持的产物,希望它的出版能促进我国21世纪计算机化学化工学科的发展,并有助于相关学科发展。

《计算机化学化工丛书》编委会

2000年5月

出版说明

书籍是人类进步的阶梯。教材是教师教学成果的结晶。一本好的教材,哺育和影响一代乃至几代人。东南大学一贯重视教材建设工作。近一个世纪以来,一批一批的优秀教师写出了一批批优秀教材。据不完全统计,数十年以来,东南大学编写、出版了近千种教材,并且在从1989年开始的三届全国优秀教材评选中,共有82种教材获奖,获奖数居全国高校前列。这一成果也是使得东南大学成为全国首批本科教学工作优秀学校的一个重要支撑条件。

面对即将到来的21世纪,东南大学将更加重视人才培养,重视本科生和研究生教学,重视教材建设。2002年,东南大学将迎来建校100周年的盛大庆典。为了以实际行动迎接这一节日的到来,学校决定,到2002年出版100本高水平教材,并且在政策上给予大力扶持。经过慎重的讨论和评审,规划工作已经完成,正在逐年落实出版。从今年起,将有一批面向21世纪、体现东南大学教学改革成果的教材陆续面世。我们高兴地看到,我校高等教育的教材园地将更加绚烂多彩。

东南大学教学委员会

1998年8月

前 言

随着计算机在化学工程学科中的应用日趋广泛,利用计算机进行化工设计、化工模拟、化工过程控制变得越来越重要,工程师们可以从更深层次的理论角度建立过程模型,采用数学方法对过程进行较为详尽的描述,并将由此建立的过程模型开发计算机应用软件。化工生产过程十分复杂,但复杂过程总可以分解成若干个单元操作。通过各单元操作的模型建立的计算机程序模块,可以组装成复杂的计算机应用软件。

作者在多年的“计算机辅助化工设计”课程的教学实践中,对课程的内容和形式进行了多次修改,编写了以各单元操作的数学模型建模方法为框架的“计算机辅助化工设计”讲义,帮助学生提高对化工过程物理描述、数学建模、编制和调试计算机程序的能力,为学生将来应用或开发计算机化工软件打下坚实基础。本书也可供广大化工工作者开发计算机化工软件时参考。

本书编写时考虑到读者已有化工原理基础,对过程的物理描述尽可能简化,而把注意力放在过程数学模型的建立及其计算机求解的可行性、可靠性和可维护性上。为加强学生计算机编程和调试能力的培养,各单元操作的计算机程序没有编入本书中。

本书共九章,每章均以单元操作为主,具有相对的独立性,读者可根据需要自由地选读部分内容,教师也可根据教学要求及学时数的不同选择部分章节进行重点讲解,建议上课学时数为 30~40,上机学时数为 30~40。

本书承蒙南京大学张志炳教授、浙江大学吕德伟教授详细审阅并提出了宝贵的修改意见,东南大学教学委员会对本书的编写、出版给予了大力支持,在此一并表示衷心感谢。

由于作者水平所限,书中难免有错误和不当之处,欢迎读者批评指正。

孙岳明

1999年4月于南京

目 录

《计算机化学化工丛书》序	(iii)
出版说明	(v)
前言	(vii)
第一章 物性数据	(1)
1.1 化工数据库建立简介	(1)
1.1.1 数据型	(1)
1.1.2 数值型	(3)
1.2 插值法计算物性数据	(11)
1.3 $p-V-T$ 计算	(12)
1.3.1 临界性质	(12)
1.3.2 偏心因子、势能常数	(16)
1.3.3 气体的状态方程	(17)
1.3.4 逸度计算	(19)
习题	(19)
第二章 流体流动计算	(27)
2.1 阻力和管路计算	(29)
2.1.1 管路阻力计算	(29)
2.1.2 局部阻力的计算	(31)
2.2 简单管路计算	(34)
2.2.1 不可压缩流体	(34)
2.2.2 气体的流动	(36)
2.2.3 低压下的气体流动	(39)
2.3 管路网络操作模拟	(42)
2.3.1 数学模型	(42)
2.3.2 程序结构要点	(43)

2.4 非稳态操作模拟·····	(44)
2.5 固体颗粒在流体中的相对运动·····	(45)
2.5.1 匀速降速度·····	(45)
2.5.2 流体带出最大颗粒计算·····	(46)
习题·····	(47)
第三章 传热计算 ·····	(49)
3.1 翅片传热·····	(49)
3.2 套管换热器·····	(55)
3.2.1 逆流的数学模型·····	(55)
3.2.2 换热器设计·····	(58)
3.2.3 模拟操作·····	(59)
3.2.4 分段法设计·····	(60)
3.3 管壳式换热器·····	(61)
3.3.1 换热器设计·····	(62)
3.3.2 换热器模拟操作·····	(68)
3.4 冷凝器操作模拟·····	(72)
3.4.1 冷凝给热准数方程·····	(72)
习题·····	(74)
第四章 分离过程 ·····	(76)
4.1 分离操作在化工生产中的重要性·····	(76)
4.2 传质分离过程的分类和特征·····	(77)
4.3 传质分离过程的近况·····	(78)
第五章 多组分精馏 ·····	(80)
5.1 相平衡·····	(80)
5.1.1 热力学方程概述·····	(81)
5.1.2 活度系数法计算汽液平衡常数·····	(82)
5.2 多组分物系的泡点和露点计算·····	(91)
5.3 闪蒸过程的计算·····	(96)
5.3.1 等温闪蒸计算·····	(98)
5.3.2 绝热闪蒸计算·····	(100)

5.4 多组分精馏的简捷计算	(102)
5.4.1 关键组分	(103)
5.4.2 最少理论板数	(103)
5.4.3 最小回流比	(105)
5.4.4 理论板数的计算	(106)
5.4.5 进料板位置	(107)
5.4.6 组分分布的预测	(108)
5.5 多组分精馏的逐板计算	(113)
5.5.1 基本原理	(114)
5.5.2 比流量法	(116)
5.6 复杂精馏塔的计算	(125)
5.6.1 精馏计算严格法求解	(126)
5.6.2 通用数学模型	(126)
5.6.3 常规精馏塔的数学模型	(128)
习题	(131)
第六章 吸收过程	(134)
6.1 多组分物理吸收	(134)
6.1.1 板式塔简捷算法之一——Kremser 方程	(135)
6.1.2 板式塔简捷算法之二——Horton 方程	(141)
6.1.3 填料吸收塔数学模型	(144)
6.1.4 逐板算法	(151)
6.2 解吸过程的计算	(152)
习题	(155)
第七章 吸附分离	(156)
7.1 吸附速率及传质系数	(157)
7.1.1 吸附机理	(158)
7.1.2 吸附的传质速率方程	(158)
7.2 固定床吸附过程及计算	(160)
7.2.1 固定床吸附器的操作特性	(161)
7.2.2 固定床吸附过程的数学模型	(163)

7.2.3 固定床吸附模型的求解	(166)
习题	(167)
第八章 化学反应器设计计算	(168)
8.1 均相理想间歇反应器	(168)
8.1.1 数学模型方程的建立	(168)
8.1.2 数学模型方程的求解	(172)
8.1.3 设计与模拟举例	(172)
8.2 均相理想活塞流反应器	(177)
8.2.1 数学模型方程的建立	(177)
8.2.2 数学模型方程的求解	(180)
8.2.3 设计与模拟举例	(181)
8.3 均相理想全混釜反应器	(185)
8.3.1 数学模型方程的建立	(185)
8.3.2 数学模型的求解	(186)
8.3.3 设计与模拟举例	(186)
8.4 均相非理想反应器模拟分析	(189)
8.4.1 模型方程的建立与求解	(189)
8.4.2 实际流动反应器的计算举例	(192)
8.5 乳液聚合反应器设计与模拟	(195)
8.5.1 模型的物理概念	(195)
8.5.2 模型的机理步骤	(197)
8.5.3 数学模型	(200)
习题	(216)
第九章 化工过程系统集成与优化	(219)
9.1 化工过程系统集成与优化	(219)
9.1.1 化工过程模拟与优化	(219)
9.1.2 分子模拟	(220)
9.1.3 单元过程的模拟	(221)
9.1.4 化工过程模拟	(223)
9.1.5 化工过程的优化	(226)

9.2 神经网络专家系统	(230)
9.2.1 人工神经网络概述	(231)
9.2.2 应用	(232)
9.3 化工过程的模拟培训系统	(236)
9.3.1 模拟培训系统及其作用	(236)
9.3.2 模拟培训系统的结构及功能	(238)
9.3.3 培训系统的模型算法	(241)
9.4 CAD 在化工过程设计中的应用	(243)
9.4.1 计算机辅助化工过程设计	(243)
9.4.2 计算机辅助装置设计	(244)
参考文献	(247)

第一章 物性数据

化工生产过程中共性本质规律是通过一些共性的基本量(物性数据)及这些基本量的相互关系来体现的。物性数据是化工过程计算不可缺少的。物性数据数量巨大,本章主要介绍一些化工数据库的建立方法,及一些重要物性数据的数值计算。

化工数据可以分为两类:一类与状态(温度或压力)无关,称作数据型,如临界温度、临界压力、标准态热力学性质等;另一类与状态(温度或压力)有关,称作数值型,如非标准态热力学性质、传递性质等。前一类数据,只需知道物质的种类就可查到其对应的物性数据;而后一类则需知道物体的状态(温度或压力或组成)才能通过数值计算得到相应的物性数据。这里就此两类数据的数据库建立方法及第二类数据的数值计算方法作一简单介绍,并介绍几种常用的物性数据的计算。

1.1 化工数据库建立简介

化工数据库是将化工过程计算中的一些重要的数据以一定的结构存放在计算机中,以供计算过程中随时调用。数据库的结构是复杂的,为了简化起见,我们在这里介绍一种常用的、以化合物的名称及物性种类来组织的数据库。首先介绍数据型数据库的建立。

1.1.1 数据型

这类数据库较简单,只要知道物质的名称就可以检查所要的物性数据。例如,要知道乙醇的标准生成焓的数据,先检索乙醇在数据库中的编号(No.102),再查找标准生成焓对应编号的数值。

数据库可用数据块来实现,在 FORTRAN 程序中可用有名数据块或数据外部文件实现数据的存放。数据存放采用有序结构(可以采用有格式,也可采用无格式)。一般采用表 1-1 的形式。

表 1-1 数据结构的有序结构形式

No.	名称	分子式	分子量	熔点/℃	沸点/℃
1	ARGON	AR	39.948	83.8	87.3
2	BORON TRICHLORIDE	BC ₃	117.169	165.9	285.7
3	BORON TRIFLUORIDE	BF ₃	67.805	146.5	173.3
⋮					
⋮					
101	DIMETHYL ETHER	C ₂ H ₆ O	46.069	131.7	248.3
102	ETHANOL	C ₂ H ₆ O	46.069	159.1	351.5
103	ETHYLENE GLYCOL	C ₂ H ₆ O ₂	62.134	125.3	308.2
⋮					
⋮					

No.	T _c	p _c atm ¹⁾	V _c (续)	Z _c	W	H _{vap} cal ²⁾ /mol	H _f ^o kcal/mol	G _f ^o kcal/mol
1	150.8	48.1	74.9	0.291	-0.004	1560	0.0	0.0
2	452.0	38.2	—	—	0.150	—	—	—
3	260.8	49.2	—	—	0.420	7210	—	—
⋮								
⋮								
101	400.0	53.0	178	0.192	5140	-43.99	-26.99	
102	516.2	63.0	167	0.248	0.635	9260	-56.12	-40.22
103	645	76	186	0.27	—	12550	-93.05	-72.77
⋮								
⋮								

1)atm(大气压),非法定计量单位,1atm=101325Pa。

2)cal(卡),非法定计量单位,1cal=4.184J。

数据存放还可以采用分块式,即如下形式:

名称块 NAME(NO)	分子式块 FZ(NO)	分子量块 FM(NO)	物性名称块 SPN	物性数据块 SPD	SPD2	
-----------------	----------------	----------------	--------------	--------------	------	-------

数据块可以用有名数据块与计算程序连接,但大量物质用此形式是不适宜的,一般采用外部文件形式连接,通过文件通道号实现连接。如用通道 1(unit=1)连接物质名称,分子式,分子标准号,分子量等等;用通道 2(unit=2)连接物性名称块;用通道 3 实现简单数据型数据的连接,通道 4 实现数值型数据的连接。这样就可以方便地由计算机查找到数据型数据,在本章后面将详细介绍查找方法。

1.1.2 数值型

数值型数据必须通过计算才能得到相应的数据,化工过程中有大量物性数据与环境有关。常用的数据有密度、黏度、折光率、热容、生成热、生成吉布斯能、蒸气压、活度等,这些物性数据必须知道环境数据(如温度、压力,组成等)以及物性与环境的关系才能计算,数据库主要提供这些物性计算中所需要的经验参数,下面将简单讨论热力学性质及有关物性与环境的关系:

(1)恒压热容

热容数据一般与温度相关,常用的理想气体经验公式有:

$$C_p = a_1 + a_2 \exp\left(\frac{-a_3}{T^{a_4}}\right) \quad (1.1)$$

$$C_p = b_1 + b_2 T + b_3 T^2 + b_4 T^3 \quad (1.2)$$

$$C_p = c_1 + c_2 T + c_3 \ln T + c_4 / T \quad (1.3)$$

式中, a_i, b_i, c_i 为经验参数; T 为绝对温度;参数数目为 4。

计算非理想气体和液体热容的经验公式常采用多项式:

$$C_p = a_1 + a_2 T + a_3 T^2 + a_4 T^4 + a_5 T^5 \quad (1.4)$$

参数数目为 3~5,常用参数为 4。

(2)焓变

反应焓可以用生成焓来计算,因此只需知道各生成焓的数值