



中等专业学校教材

化工计算

上海市化工学校
李文原 主编

5

化学工业出版社

中等专业学校教材

化 工 计 算

上海市化工学校

李文原 主编

化学工业出版社

·北 京·

(京)新登字 039 号

图书在版编目 (CIP) 数据

化工计算/李文原主编. —北京: 化学工业出版社,
1999.1

中等专业学校教材

ISBN 7-5025-2336-7

I. 化… II. 李… III. 化工计算-专业学校-教材
IV. TQ015

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (98) 第 28807 号

中等专业学校教材

化 工 计 算

上海市化工学校

李文原 主编

· 责任编辑: 陈有华

· 责任校对: 顾淑云

封面设计: 田彦文

化学工业出版社出版发行

(北京市朝阳区惠新里 3 号 邮政编码 100029)

购书咨询: (010) 64982530

(010) 64918013

购书传真: (010) 64982630

<http://www.cip.com.cn>

*

新华书店北京发行所经销

北京永鑫印刷有限责任公司印刷

三河市东柳装订厂装订

开本 850mm×1168mm 1/32 印张 7½ 字数 202 千字

1999 年 2 月第 1 版 2005 年 7 月北京第 2 次印刷

ISBN 7-5025-2336-7/G·640

定 价: 11.00 元

版权所有 违者必究

该书如有缺页、倒页、脱页者, 本社发行部负责退换

前 言

.....

由于编者水平所限，书中难免错误及不当之处，欢迎读者和同行批评指正。

编 者

1998 年 7 月

目 录

绪论	1
一、化工计算的性质和内容	1
二、化工计算在化工生产中的作用	1
三、化工计算课程的学习方法	3
第一章 化工常用基础数据	5
第一节 常用基本物性数据	5
一、理想气体状态方程	5
二、临界常数	5
三、密度	7
四、蒸气压	8
五、粘度	10
六、热导率	11
第二节 常用热力学数据	12
一、热容	12
二、相变热	14
三、反应热	16
四、化学平衡常数	18
第三节 常用化工设计手册及有关资料	22
一、中文手册	22
二、英文手册	23
第四节 数据的计算机检索与处理	23
一、Internet 的化学化工资源	24
二、小型数据库及其使用方法	25
习题	27
第二章 化工过程参数	29
第一节 工艺技术经济指标	29
一、转化率	29

二、收率	31
三、选择性	33
四、消耗定额	35
五、生产能力和处理能力	36
第二节 工艺参数	37
习题	38
第三章 物料衡算	39
第一节 物料衡算的基本原理和方法	39
一、物料衡算式	39
二、物料衡算的基本方法	41
第二节 无化学反应过程的物料衡算	47
一、简单过程的物料衡算	48
二、多单元体系的物料衡算	53
第三节 化学反应过程的物料衡算	59
一、反应器的物料衡算	60
二、具有循环、排放及旁路过程的物料衡算	76
第四节 计算机在物料衡算中的应用	86
习题	92
第四章 能量衡算	101
第一节 能量衡算的基本原理和方法	101
一、基本概念	101
二、能量衡算式	104
三、机械能衡算	106
四、热量衡算	109
第二节 无化学反应过程的热量衡算	111
一、无相变过程的热量衡算	112
二、相变过程的热量衡算	116
三、溶解与混合过程的能量衡算	117
第三节 化学反应过程的热量衡算	119
一、基准的选取	120
二、反应器的热量衡算	124
习题	128
第五章 物料和能量联算	131

第一节 稳流过程的物料和能量衡算	131
一、方程组法	131
二、模块法	139
第二节 计算机在物料和能量联算中的应用实例	144
一、工艺流程	145
二、系统分析	146
三、建立各单元的数学模型	147
第三节 利用焓-浓图作物料和能量联算	158
一、焓-浓图	159
二、利用焓-浓图作物料和能量联算的方法	160
习题	166
第六章 计算机综合应用举例	169
第一节 计算机在化工系统优化中的应用	169
一、化工过程最优化基本概念	169
二、最优化问题分析实例	170
三、最优化问题的求解方法	173
四、最优化设计实例	181
第二节 化工过程 CAD 简介	184
一、化工过程模拟系统	184
二、化工系统优化软件	186
三、三维模型设计软件	186
四、计算机辅助教学软件	187
习题	187
附录	189
附录一 计算机程序及说明	189
通用模块一 解一元非线性方程的牛顿迭代法	189
通用模块二 解线性方程组的高斯消元法	190
通用模块三 系统分析的可达向量法	192
通用模块四 一维优化的黄金分割法	197
通用模块五 多维优化的单纯形法	198
附录二 计量单位换算表	204
附录三 常见物质的物性数据表	206
附录四 常压下气体的平均摩尔热容	212

附录五	气体恒压热容表	213
附录六	25℃时生成、溶解及稀释的积分热	214
附录七	25℃时化合物的生成热和燃烧热	216
附录八	饱和水蒸气表 (一)	220
附录九	饱和水蒸气表 (二)	222
参考资料		224

绪 论

一、化工计算的性质和内容

化工生产具有产品繁杂、设备形状大小各异、影响因素众多、技术含量较高的特点。生产过程中要涉及到大量的数据和参量，它们是籍以进行化工过程开发和改造、生产装置设计以及实施生产组织和管理的 basic 要素。因此对于从事化工生产的人员来说，掌握这些数据和参量的基本概念，并能运用一定的计算手段掌握它们之间的内在联系和规律，是十分必要的。以往有关化工过程的计算一般都是结合单元操作过程和具体的工艺路线分析来进行的，随着化工生产技术和过程控制水平的提高，以及计算机技术在化工领域的应用，使得化工计算的内容和计算手段都发生了不同程度的变化，计算技能已经成为衡量现代工艺技术人员专业能力强弱的重要标准之一。

涉及到化工过程的计算问题很多，总体上可分为三大部分：对过程物料的流量及组成进行计算的物料衡算；对过程能量变化进行计算的能量衡算；对各种设备的结构和尺寸进行计算的设备计算。另外，围绕上述计算问题，需要查阅和处理大量的物性数据和热力学数据，对复杂的计算需采用相应的计算机应用技术。本书主要介绍物料衡算、能量衡算、化工常用基础数据处理的基本概念和方法，并对计算机技术在化工计算过程中的应用作了一定的讨论。有关设备计算的内容因其涉及的化工设备种类繁多，在一些相关设备的书籍中有专门的介绍，故本书未将其列入讨论的范围。

二、化工计算在化工生产中的作用

化工计算是解决化工生产中技术性问题的必要手段之一，其主要作用有以下几个方面。

1. 在化工过程开发中的作用 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。化工过程开发的主要

环节包括化学反应研究、化学工程研究、工艺过程与装置、机械设备及材料、调节控制技术以及技术经济评价等,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。以化工过程开发中工程“放大”问题为例,实验室研究的结果,为过程开发提供了必要的数据和资料,但还不足以用来设计一个生产装置,这是因为大装置和小装置之间存在着非线性的放大效应,所以通常是建立模型装置或中试装置对技术上的可能性和经济上的合理性进行考查,进一步积累资料,最后才能进入到对大型化生产装置的设计阶段。近年来电子计算机的广泛应用为过程开发提供了广阔的前景,运用可靠的数学模型进行模拟放大,可以实现高倍数放大,这就大大减少了从实验室到工业生产装置间的中间试验级数。

2. 在化工设计中的作用 化工设计工作在生产、科学实验与基本建设方面都起着重要的作用。一个新建的工厂或一套新建的装置需要进行全面的设计,某些小型试验、中间试验也都需要设计。可以说设计工作是由科研成果实现工业化的桥梁。化工设计包括的内容很广,它是由工艺、机械、自控、电气、运输、土建、采暖通风、给排水、三废处理及技术经济等许多专业紧密合作,协同配合的复杂工作,在这里化工工艺设计起着贯穿全过程,并组织协调各专业设计工作的作用。所以说工艺设计是化工设计的核心部分,是化工工艺专业人员必须具备的一种能力。

在工艺设计中,化工计算又是一个中心环节。在方案设计完成后,根据确定的生产方法及生产流程,依据设计任务书进行物料衡算、能量衡算、设备计算及设备选型等。在上述计算的基础上,绘制出带控制点的工艺流程图等必要的图纸,确定整个工艺流程中全部设备在平面和空间的具体位置,确定装置的全部管线、阀件和管件的位置。最后,工艺设计人员还必须根据工艺设计的结果向其他各类专业设计人员(土建、电气、自控、暖通、给排水等)提供设计条件,以满足工厂设计综合性指标的要求;编制设计文件,将设计成果汇总,作为装置施工、生产的依据;编制工程投资概算书,作为投资者对基本建设单位拨款的依据。总之,化工计算是化工工艺设计的核心,其他部分

与其有着直接的联系。

目前,计算机辅助设计(CAD)技术已全面地进入了化工设计的领域,利用计算机进行化工过程的系统模拟、系统优化及三维模型设计,可以解决以往人工设计中难以解决的问题,大大的缩短了设计周期,实现流程构型优化、过程优化和设备优化的目标。

3. 在技术革新和技术改造中的作用 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的引起生产能力和生产效益的下降,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。

在技术革新和技术改造中,首先要对现有生产装置进行工艺核查,用实际测得的工艺参数和指标通过化工计算找出整套装置或某一设备中存在的薄弱环节。然后按照系统优化的原则,设计出经济合理的技术改造方案,对现有装置在工艺上或设备上进行调整后使其发挥更大的生产能力,进一步降低各项物料消耗和能量消耗,从而尽量保持技术的先进性和较强的竞争能力。

4. 在化工生产的组织和管理中的作用 化工生产的组织和管理涉及到操作岗位的划分、操作人员的配置、操作规程的制订、事故处理的措施、原材料和各种辅料的供应、公用工程的保障、原料和产品的质量监控、各项工艺技术指标的控制、原料及水电、煤、汽等辅料的消耗指标考核、生产设备的维护保养、生产计划的合理调度等众多方面,它们中间包含着大量的数据指标,有些可以按照装置的设计要求直接制定,而另一些则需根据装置运转的实际情况通过计算而不断加以修订。对这些指标的考核和评价,总体上可以反映出生产的组织和管理水平,而这些考核和评价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来进行。作为化工生产的中等专业技术人员,其工作内容往往与生产的组织和管理工作的有直接的联系,因此掌握这方面的知识和技能就显得尤为重要。

三、化工计算课程的学习方法

化工计算是借助许多基础学科的理论和方法来解决工艺过程实际

问题的一种手段。化学和物理提供了物质变化和运动的内在规律；物理化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过程的设备结构和工作原理；而数学和计算机应用技术则提供了解题的方法和手段。如何将这些理论和方法应用到实际的工程计算中去，是学习化工计算的根本任务。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，应当注意以下几个问题。

1. 正确理解题意 要运用工艺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。

2. 掌握收集和处理有关数据资料的方法 计算过程中往往有许多基础物性数据和热力学数据的获得需要通过查阅有关的手册和资料，要学会各类图表的使用，注意取用数据的适用条件。有条件的还应掌握利用计算机检索数据的方法。

3. 合理运用计算方法 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。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、运行时间短及占用内存小的计算方法。

4. 注意理论联系实际，多做练习 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，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。

5. 培养严谨、细致的工作作风 计算过程中有大量的数据，要注意单位的统一，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，要注意有效数字的保留。而对计算结果要进行校核，以保证计算的正确性。

第一章 化工常用基础数据

物性数据和热力学数据是化工计算的基础数据。获得准确、可靠的数据是进行物料衡算、能量衡算以及化工过程计算必须的准备工作。物性数据和热力学数据的主要来源是实验测定和经验估算。本章介绍化工计算中常用的物性及热力学数据的查取、计算、估算和计算机检索及处理等方面的基本方法。

第一节 常用基本物性数据

物质的基本性质数据及传递性质数据是化工计算中常用的基础数据。常用的有：临界常数、密度、蒸气压、粘度及热导率等。本节介绍各基本物性数据的物理意义、物理单位及计算或估算方法。

一、理想气体状态方程

对于气体物质而言，压力、温度和体积是三个最基本的性质，它们决定了气体的状态。低压气体都服从同一个状态方程，即理想气体状态方程。

$$pV = nRT \quad (1-1)$$

式中 p —— 压力，Pa；

V —— 体积， m^3 ；

T —— 温度，K；

n —— 气体物质的量，mol；

R —— 理想气体常数， $8.314 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ 。

理想气体状态方程适用于低压气体，对高压气体误差较大，不能应用。

二、临界常数

临界常数是重要的物性数据，它不仅表示本身的物理意义，而且也是用以计算其他物性的主要数据。

气体可以液化的最高温度称为临界温度(记作 T_c)，临界温度下气体液化所需的最低压力称为临界压力(记作 p_c)，在临界温度及临界压力下 1 mol 气体所占的体积称为临界体积(记作 V_c)。它们通称为临界常数。

常用元素、无机物及有机物的临界常数可由手册直接查得。也可根据有关手册介绍的用物质基团贡献法，按物质的基本结构进行估算。

在缺少物性数据时，通常使用临界常数估算常用物性数据(如密度、蒸气压、粘度、热导率等)和一些经验公式的参数。这里，以临界常数估算范德华常数为例，说明其方法。

范德华方程为：

$$\left(p + \frac{a}{V_m^2}\right)(V_m - b) = RT \quad (1-2)$$

式中 a 、 b ——范德华常数。

范德华常数可用气体的临界常数计算：

$$a = 3p_c V_c^2 = \frac{27R^2 T_c^2}{64p_c} \quad (1-2a)$$

$$b = \frac{1}{3}V_c = \frac{RT_c}{8p_c} \quad (1-2b)$$

R 值可用下式计算：

$$R = \frac{8p_c V_c}{3T_c} \quad (1-2c)$$

式中 p_c ——临界压力，Pa；

V_c ——临界体积， $\text{m}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$ ；

T_c ——临界温度，K。

例 1-1 用理想气体状态方程和范德华方程式分别计算 320K、4.052MPa 下， CO_2 的摩尔体积，并和实测值 $5.4 \times 10^{-4} \text{m}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$ 比较。

解：用理想气体状态方程计算

$$V_m = \frac{8.314 \times 320}{4.052 \times 10^6} = 6.57 \times 10^{-4} \text{m}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$$

用范德华方程计算，将范德华方程写为

$$pV_m^3 - (bp + RT)V_m^2 + aV_m - ab = 0$$

将已知数据代入上式得

$$4.052 \times 10^6 V_m^3 - (4.28 \times 10^{-5} \times 4.052 \times 10^6 + 8.314 \times 320) V_m^2 \\ + 0.3647 V_m - 0.3647 \times 4.28 \times 10^{-5} = 0$$

上式用牛顿迭代法解得

$$V_m = 5.48 \times 10^{-4} \text{ m}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$$

理想气体状态方程计算值与实测值偏差为

$$\frac{6.57 \times 10^{-4} - 5.4 \times 10^{-4}}{5.4 \times 10^{-4}} \times 100\% = 21.7\%$$

范德华方程计算值与实测值偏差为

$$\frac{5.48 \times 10^{-4} - 5.4 \times 10^{-4}}{5.4 \times 10^{-4}} \times 100\% = 1.5\%$$

牛顿迭代方法是一元非线性方程求根的常用且有效的方法。牛顿迭代公式为

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} \quad (k=0, 1, 2, \dots) \quad (1-3)$$

式中 x_k ——第 k 次迭代时的变量；

$f(x_k)$ ——第 k 次迭代时的函数值；

$f'(x_k)$ ——第 k 次迭代时的 $f(x_k)$ 的一阶导数值。

若在 (a, b) 内存在方程 $f(x) = 0$ 的单根 x^* ，且 $f(x)$ 的二阶导数在 (a, b) 内连续。则牛顿迭代法在 x^* 附近具有局部收敛性。

当 $f'(x)$ 不易计算时，可用根附近某点的一阶导数值代替，并作为一常量 L 处理。这时称为简化牛顿法。

牛顿迭代法的源程序详见附录一——计算机程序及说明中的通用模块一。

三、密度

物质具有的质量与其所占体积之比称为密度。密度的定义式为

$$\rho = \frac{m}{V} \quad (1-4)$$

式中 ρ ——密度， $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ ；

m ——物质的质量， kg ；

V ——物质占有的体积, m^3 。

气体和液体的密度一般可在有关手册中查得。本书附录三中也列出某些常见物质的液体密度。

气体的密度随压力和温度的不同有较大的变化, 因此气体的密度必须标明其状态。当查不到某温度和压力条件下的气体密度数值时, 可用气体状态方程计算, 在一般温度和压力下, 可近似用理想气体状态方程式计算, 即

$$\rho = \frac{pM}{RT} \quad (1-5)$$

式中 M ——气体的摩尔质量, $\text{kg} \cdot \text{kmol}^{-1}$ 。

非理想气体的密度需用非理想状态方程式(如范德华方程)计算。

饱和液体密度可用廷-卡莱斯(Tyn-Calus)法计算

$$V_b = 0.285 V_c^{1.048} \quad (1-6)$$

式中 V_b ——正常沸点下的体积, $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$;

V_c ——临界体积, $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$ 。

上式除低沸点液体和极性化合物外, 一般误差在3%以内。

液体混合物的密度可由下式计算

$$\frac{1}{\rho_m} = \frac{x_{w1}}{\rho_1} + \frac{x_{w2}}{\rho_2} + \dots + \frac{x_{wn}}{\rho_n} \quad (1-7)$$

式中 $\rho_1, \rho_2 \dots \rho_n$ ——液体混合物中各组分的密度, $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$;

$x_{w1}, x_{w2} \dots x_{wn}$ ——液体混合物中各组分的质量分数。

气体混合物的密度可由下式计算

$$\rho_m = \rho_1 x_{v1} + \rho_2 x_{v2} + \dots + \rho_n x_{vn} \quad (1-8)$$

式中 $\rho_1, \rho_2 \dots \rho_n$ ——气体混合物中各组分的密度, $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$;

$x_{v1}, x_{v2} \dots x_{vn}$ ——气体混合物中各组分的体积分数。

四、蒸气压

由于液体蒸发, 使液体上方具有一定的蒸气压。在一定条件下, 气液两相成平衡状态, 此状态称为饱和状态, 其蒸气为饱和蒸气, 其压力为饱和蒸气压。

蒸气压的单位与压力的单位相同, 为帕(Pa)。