



化学工人自学丛书

化工单元操作

# 化 工 计 算

中国化工学会科普工作委员会组织编写

于宏奇 冯善良 冯元鼎 编

化 学 工 业 出 版 社

81.16

108

化学工人自学丛书

化工单元操作

# 化 工 计 算

中国化工学会科普工作委员会组织编写  
于宏奇 冯善良 冯元鼎 编

三月二十一日

化 学 工 业 出 版 社

本书系供工人阅读的化学工人自学丛书化工单元操作中的一本，共七章。其中包括化工计算中运用的一些基本规律、常用的量度单位、气体及蒸气的有关计算、溶液及有关相平衡的计算、物料平衡及化学平衡计算、能量衡算等。本书通俗易懂便于工人自学。

本书由于宏奇、冯善良编写，冯元鼎对全书作了审阅，并对个别章节重新作了改写。

可供初中以上文化水平的化工类企业的工人阅读，也可供化工类企业以及科研、设计单位的管理干部阅读。

### 化学工人自学丛书

### 化工单元操作

### 化 工 计 算

中国化工学会科普工作委员会组织编写

于宏奇 冯善良 冯元鼎 编

责任编辑：谢丰毅

封面设计：任 辉

\*

化学工业出版社出版

(北京和平里七区十六号楼)

化学工业出版社印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行

\*

开本787×1092<sup>1/32</sup>印张6<sup>1</sup>/<sub>2</sub>插页1字数148千字印数1—4,970

1987年10月北京第1版 1987年10月北京第1次印刷

统一书号15063·3937 定价1.40元

## 《化学工人自学丛书》

### 出 版 说 明

为了普及化工生产技术知识及理论知识，提高我国化工企业广大工人的科学技术水平，以适应加速实现化学工业现代化的需要，特组织编写出版这套《化学工人自学丛书》。

这套丛书的内容包括化学、化工技术，基础理论以及化工生产工艺和设备，并反映当代新技术、新工艺、新设备、新材料。叙述力求深入浅出，理论联系化工生产实际，便于自学。根据化学工业多行业、多工种的特点，本丛书除分册出版无机化学、有机化学、化工生产原理等基础理论和基础技术读物外，还将陆续出版主要化工生产的工艺操作、主要化工设备机器的安装和检修，生产分析、化工仪表及自动化等方面的图书。

本丛书主要供化工企业具有初中以上文化程度的工人和其他有关人员自学。通过自学，达到或接近中等专业学校毕业的水平。也可作为各化工企业的技工学校教学参考书和考工评级的参考读物；还可供化工中等专科学校教师和学生学习参考。

## 前　　言

提高全国人民的科学文化水平是实现我国社会主义建设现代化的当务之急。化学工业及化工类型生产的操作工，在进行安全教育及熟悉工艺流程与反应条件，能按操作规程于本岗位进行熟练操作后，都必须进一步地具备化工单元操作知识。

化工单元操作是从各种化工生产过程中，将以物理变化为主的处理方法，概括出其共同特点的基本操作。其内容可归纳为：流体流动过程；传热过程；传质过程；机械过程等操作。目前这方面的书籍大都是各级教材，内容侧重于理论和计算。这套化学工人自学丛书中的《化工单元操作》则以具有初中水平的在职操作工为对象，使他们以多年实践经验，结合化工单元操作的理论学习，可提高生产操作水平，而且可应用本岗位的数据，验算设备能力，既能挖潜，又能避免超负荷运转，做到心中有数。

由于我们初次组织编写这类图书，缺点与不妥之处在所难免，希广大读者提出宝贵意见，以便今后再版时修订。

拟出版的这套《化工单元操作》书有：《化工计算》、《流体输送》、《传热及换热器》、《蒸馏和吸收》、《萃取》、《干燥》、《冷冻》。

# 目 录

<b>第一章 绪论</b> .....	1
第一节 化工计算中运用的一些基本规律 .....	2
第二节 根据分子式及化学方程式的计算 .....	5
第三节 工业条件下的化学计量计算 ——转化率、过量百分率、过程损耗 .....	12
<b>第二章 化工计算中常用的量度单位及单位换算</b> .....	18
第一节 量度单位制 .....	18
第二节 常用物理量的计算 .....	25
<b>第三章 气体及有关气体的计算</b> .....	35
第一节 气体的状态与状态方程 .....	35
第二节 气体混合物的计算 .....	42
第三节 真实气体状态方程及其计算 .....	49
<b>第四章 蒸气</b> .....	65
第一节 基本概念 .....	65
第二节 饱和蒸气压与温度的关系 .....	69
第三节 水蒸汽的比热、热容及焓 .....	78
第四节 水蒸汽表 .....	81
<b>第五章 溶液及有关相平衡的计算</b> .....	88
第一节 基本概念 .....	88
第二节 溶液及溶解度的计算 .....	89
第三节 气液相平衡的计算 .....	93
<b>第六章 物料衡算及化学平衡计算</b> .....	116
第一节 概述 .....	116

第二节 物料衡算的基本步骤 .....	120
第三节 稳定状态过程的物料衡算 .....	131
第四节 化学平衡及平衡转化率的计算 .....	137
<b>第七章 能量衡算 .....</b>	<b>150</b>
第一节 热力学第一定律 .....	150
第二节 热量衡算 .....	157
第三节 气体压缩过程理论功耗计算 .....	179
附录 I 干空气的物理性质 .....	184
附录 II 水的物理性质 .....	186
附录 III 几种常见物质的物理性质 .....	188
附录 IV 某些物质的热容 .....	191
附录 V 液体比热共线图 .....	194
附录 VI 气体比热共线图 .....	196
附录 VII 液体汽化潜热共线图 .....	198
附录 VIII 某些物质的焓 .....	200

## 第一章 緒論

化学工业是一个多行业、多品种的工业。例如各种无机、有机原料的生产，化学肥料、农药、炸药的生产，各种高分子材料、染料、涂料、颜料的生产等等。它在我国国民经济中占有重要地位。

努力掌握化工生产中的各种生产规律，从而达到生产中的稳产、高产、低消耗是促进化工生产发展的重要手段。因为，这些规律不但能定性地指导生产（如有的产品生产需要在高压下，有的产品生产需要在低温下等），而且也可以定量地指导生产（如生产需要在多大压力下、多少温度下操作最好，欲达到某一产品产量需要投放多少原料等）。对于后者需要通过计算才能达到。在化学工业中，这些量与量之间关系的计算，我们称它为化工计算。

化工计算所需要解决的问题很多，但归纳起来不外乎两大类：

（1）根据某产品的生产任务，计算出一定的产品产量所需消耗的原料量；计算出生产中所需消耗的能量。如水、电、汽及各种能源的消耗量；计算生产中适宜的操作条件及各种设备尺寸的大小。以上的计算一般称为设计计算。它是为了建立一个新的生产企业并根据一定的生产任务，通过计算来达到预期的生产目的的。

（2）针对已经投产的工厂，由生产实际中所测得的数据核算原料消耗、能量消耗、设备尺寸是否适应生产，校核操作

条件是否合理……等。这种计算称为查定计算（或生产核算），它可以作为改善生产操作条件和设备尺寸的依据，其计算结果也可作为新建工厂设计计算的参考数据。

对于在生产第一线的工作者来说，第二类计算更具有实际意义。无疑，掌握了化工计算的基本技能对于工厂的挖潜改造、节约能耗等都是十分重要的。

## 第一节 化工计算中运用的一些基本规律

化工计算中所依据的基本规律主要是：质量守恒、能量守恒、平衡关系和过程速率等。

### （一）质量守恒

质量守恒定律在化工计算中应用最为普遍。表现在具体应用上就是“物料衡算”。由于物料衡算是其他各种计算（热平衡计算、相平衡计算等）的基础，因而熟练掌握“物料衡算”是极为重要的。

“物料衡算”是指在一个化工过程中所有输入的物质的质量必须等于所有输出的物质的质量加上过程中积累的物质的质量。其计算公式可表示为

$$\text{输入物料量} = \text{输出物料量} + \text{过程中积累物料量}$$

在实际生产过程中，输出物料除了表现为产品之外，还有各种损失或副产品存在，因而要特别注意在计算中物料平衡关系是指所有的输入物料和所有的输出物料。

对于一般化工生产过程，正常生产时往往属连续稳定过程，此时，过程中无积累物料量，上式可以简化为：

$$\text{输入物料量} = \text{输出物料量}$$

需要提请注意的是，本处提及的物料衡算是按过程中物料的总量来计算的。它对过程中某一组分的物料衡算并不完全适

用，对某一组分的物料衡算关系将在第六章中予以讨论。

## （二）能量守恒

能量守恒定律在化工计算中的应用表现为“能量衡算”。其计算公式可表示为

$$\text{输入能量} = \text{输出能量} + \text{过程中能量的积累量}$$

即在连续稳定条件下，过程中无能量的积累，此时能量衡算可简化为

$$\text{输入能量} = \text{输出能量}$$

这里指的能量，主要指的是在化学反应中的热效应（如反应放出或吸收的热，稀释热等）和生产中发生的一切物理能量（包括热能、电能、动能等）。在具体计算中要考虑到各种能量的转换，并要统一到同一量度单位下计算（详见第七章）。

## （三）平衡关系

当两种物质之间存在有温度差、压力差、浓度差以及其他如电位差、化学位差……等等时，两种物质之间就存在着交换过程，这种交换过程必然是由高到低的方向进行，如由温度高的物质向温度低的物质传递热量，直至两物质的温度相等了，我们说它们之间达到了平衡。除非外界条件引起这种平衡关系发生了改变（如某一物质由于外界原因温度发生了改变），这种关系将保持下去。因此，对任何过程要想确定其能否进行以及进行的方向和进行后的最终状态，必须借助于平衡关系。在以后的相平衡、化学平衡……等的计算中都要利用物质间相应的平衡关系。利用各种平衡关系进行计算，就可以找出生产中物料、能量利用的极限，作为生产技术改革的奋斗目标。

## （四）过程速率关系

平衡关系只解决了过程能否进行及其进行的方向和限度，而没有解决过程进行的速度问题。例如两种物质进行热交换

时，需多少时间就会达到平衡，这显然是一个速度问题。

在化工生产中，往往根据已知的过程速率（如某化学反应的反应速度）用来最终计算出设备尺寸的大小。它的一般化计算关系为

$$\text{过程速率} \propto \frac{\text{过程推动力}}{\text{过程阻力}}$$

例如，一个水冷器，其冷却水与热物流的传热速度决定于水与物流之间的温度差（推动力），也决定于选用冷却设备的结构、尺寸和材质（阻力）。显然，推动力越大过程速率越大，阻力越大过程速率越小。

对某一反应器来说，在选择了适宜的操作条件后（如温度、压力、原料比），由于反应速度加快，因而反应器设计的容器可以减小，或者在一定的反应器容积下可缩短反应周期。

利用过程速率关系，通过一定的计算可以在化工生产中采取有利措施来提高过程速率。例如：增大过程的推动力（流体流动过程中加大压力差；传热过程中加大温度差；吸收过程中降低吸收剂中被吸收物质的浓度；在化学反应过程中增加原料浓度或降低产品浓度等）。减少过程的阻力（流体流动过程中加大管径或尽量减少管件；对换热器经常清洗以减少污垢；化学反应器中采用高效催化剂等）。化工计算中常常要利用过程速率的关系定量地解决上述问题。

应当指出，对有些化工过程的计算是困难的，对有些计算其准确性也不一定绝对可靠。这是因为象诸如化学反应的热效应，某过程的平衡关系，某化学反应的反应速度等，在目前条件下还不能一一揭示得很清楚，另外计算过程中所选取的数据，由于某些测试手段准确性不高而影响了其可靠性。因此，化工计算所能解决的问题，有的是可靠的（如一般的物料衡算），

有的则存在一定范围的误差，有的则只能计算出大致结果。

## 第二节 根据分子式及化学方程式的计算

化学计算除了要遵循质量守恒定律外，还要遵循定组成定律。

定组成定律可以叙述为：任何纯净的化合物在质的方面和量的方面都有固定的组成，无论它是用什么方法制取的。这里讲的“质的方面”是指组成这一化合物元素的种类，如 $\text{SO}_2$ 和 $\text{CO}_2$ 在质的方面不同，因而它不是同一种物质。这里讲的“量的方面”是指组成这一化合物的元素之间的质量关系（原子个数比和元素重量比），如 $\text{CH}_4$ 和 $\text{C}_2\text{H}_4$ 在质的方面相同，但在量的方面不同，因而它们也不是同一种物质。需要提出的是，定组成定律的逆定律是不对的，即在质和量方面均相同的物质并不一定是同一化合物，这是因为有同分异构体存在的缘故，例如，正丁烷和异丁烷是两种不同物质，但它们在质与量方面是相同的。

### 一、根据分子式进行的化学计算

运用物质的定组成定律，就可以根据分子式求得某化合物里某元素的百分含量，或是某一定质量的化合物中某元素的质量，或是由某元素的质量求含有这种元素的化合物的质量。在计算中均可用下述式子表示

$$\frac{\text{元素的质量}}{\text{化合物的质量}} = \frac{\text{元素原子个数} \times \text{原子量}}{\text{化合物的分子量}} \quad (1-1)$$

**例 1-1** 试计算硫酸铵、硝酸铵、碳酸氢铵、尿素等氮肥中的有效成分百分含量。

**解** 可以应用(1-1)式分别计算

(1) 硫酸铵分子式为 $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ ，其有效成分N的百分

含量为

$$\begin{aligned} N\% &= \frac{N\text{元素的质量}}{(NH_4)_2SO_4\text{的质量}} \times 100\% \\ &= \frac{2\text{个N原子} \times N\text{的原子量}}{(NH_4)_2SO_4\text{的分子量}} \times 100\% \\ &= \frac{2 \times 14}{132} \times 100\% = 21.21\% \end{aligned}$$

(2) 硝酸铵分子式为  $NH_4NO_3$ , 其有效成分N的百分含量为

$$N\% = \frac{2 \times N}{NH_4NO_3} \times 100\% = \frac{2 \times 14}{80} \times 100\% = 35\%$$

(3) 碳酸氢铵分子式为  $NH_4HCO_3$ , 其有效成分N的百分含量为

$$N\% = \frac{1 \times N}{NH_4HCO_3} \times 100\% = \frac{14}{79} \times 100\% = 17.72\%$$

(4) 尿素分子式为  $CO(NH_2)_2$ , 其有效成分N的百分含量为

$$N\% = \frac{2 \times N}{CO(NH_2)_2} \times 100\% = \frac{2 \times 14}{60} \times 100\% = 46.67\%$$

答：硫酸铵含N为21.21%；硝酸铵含N为35%；碳酸氢铵含N为17.72%；尿素含N为46.67%。

例 1-2 取800[毫升]苯( $C_6H_6$ )和500[毫升]甲苯( $C_6H_5CH_3$ )混合, 已知苯的密度为0.88[克/毫升], 甲苯的密度为0.87[克/毫升], 求混合物中各成分的重量百分含量。

(忽略苯和甲苯混合时的体积变化), 并计算各元素在混合物中的百分含量及各自的质量。

解 首先将体积化为质量

$$C_6H_6 = 800 \times 0.88 = 704 \text{[克]}$$

$$C_6H_5CH_3 = 500 \times 0.87 = 435 \text{[克]}$$

### (1) 苯与甲苯的百分含量

$$C_6H_6\% = \frac{704}{704 + 435} \times 100\% = 61.8\%$$

$$C_6H_5CH_3\% = \frac{435}{704 + 435} \times 100\% = 38.2\%$$

### (2) 各元素的百分含量

$$C\% = \left[ \left( 704 \times \frac{6C}{C_6H_6} \right) + \left( 435 \times \frac{7C}{C_6H_5CH_3} \right) \right] \times \frac{100\%}{704 + 435}$$

$$= \left[ \left( 704 \times \frac{6 \times 12}{78} \right) + \left( 435 \times \frac{7 \times 12}{92} \right) \right] \times \frac{100\%}{1139}$$

$$= 91.92\%$$

$$H\% = \left[ \left( 704 \times \frac{6 \times 1}{78} \right) + \left( 435 \times \frac{8 \times 1}{92} \right) \right] \times \frac{100\%}{1139}$$

$$= 8.08\%$$

### (3) 各元素的质量

计算一定质量的混合物中某元素的质量，只要将混合物总的质量乘以元素在该混合物中的百分含量即可

$$C \text{ 的质量} = 1139 \times 91.92\% = 1047 \text{[克]}$$

$$H \text{ 的质量} = 1139 \times 8.08\% = 92 \text{[克]}$$

答：(1) 苯的含量为61.8%，甲苯的含量为38.2%。

(2) 碳的含量为91.92%，氢的含量为8.08%。

(3) 碳的质量为1047[克]，氢的质量为92[克]。

**例 1-3** 试计算需要多少吨的碳酸氢铵才能与100吨尿素

的含氮量相等。

解 1 可以运用 (1-1) 式, 因两种氮肥要求含氮量相等, 所以等式右边相等。

设  $x$  为碳酸氢铵的质量, 则

$$\begin{aligned} 100 \times \frac{2N}{CO(NH_2)_2} &= x \times \frac{N}{NH_4HCO_3} \\ \therefore x &= 100 \times \frac{2N}{CO(NH_2)_2} \times \frac{NH_4HCO_3}{N} \\ &= 100 \times \frac{2 \times 79}{60} = 263.33[\text{吨}] \end{aligned}$$

解 2 由例1-1中已知,  $NH_4HCO_3$  的含氮量为 17.72%,  $CO(NH_2)_2$  的含氮量为 46.67%。由上述含氮量的比值可直接求得  $NH_4HCO_3$  的质量。

设  $x$  为碳酸氢铵的质量, 则

$$x = 100 \times \frac{46.67}{17.72} = 263.37[\text{吨}]$$

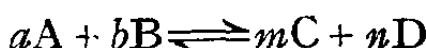
(解 1 与解 2 计算结果有误差是由于运算上的误差)

答: 100吨尿素的含氮量可折合为 263.33 (或 263.37) 吨的碳酸氢铵。

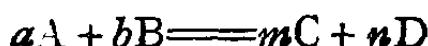
## 二、根据化学计量式进行计算

利用化学计量式进行计算是化学计算中最为普遍的方法, 它也是化工计算的基础, 因而应当熟练地掌握它。

在利用化学计量式进行计算时, 首先要正确地写出化学反应方程式, 化学反应方程式的一般形式为:



该反应的化学计量式的形式为:



化学计量式与化学反应方程式不同，它并不表示反应进行的方向，而只表示参加反应的各组分的数量关系，所以在化学计量式中采用等号代替化学反应方程式中表示反应方向的箭头。习惯上，规定化学计量式等号左边的组分为反应物，等号右边的组分为产物。

式中A、B、C、D分别是反应物组分及产物组分； $a$ 、 $b$ 、 $m$ 、 $n$ 分别是组分A、B、C、D的化学计量系数。

化学计量式表明了：①参加反应的物质所发生质的变化（即产生了什么新物质）。②反应前后物质间（反应物和生成物）量的关系。总的说来，它反映了质量守恒定律。因此，在列出化学计量式时，一定要注意等号两边各元素的原子个数应相等。

通常进行化学计算时，大体有以下步骤。

(1) 正确地写出该过程的化学计量式。

(2) 将已知物质的摩尔数❶和所求物质的量（用未知数 $x$ 代表）分别写在化学计量式中有关分子式的上方。

(3) 计算出已知物质和所求物质的摩尔质量❷，将物质的摩尔质量与其在化学计量式中的计量系数相乘，所得的积分别写在该分子式的下方。

(4) 在化学计量式中的各个物质，其分子式上方的数据与分子式下方数据之比恒为定值。藉此关系可以求出未知量 $x$ 的值（摩尔数）。

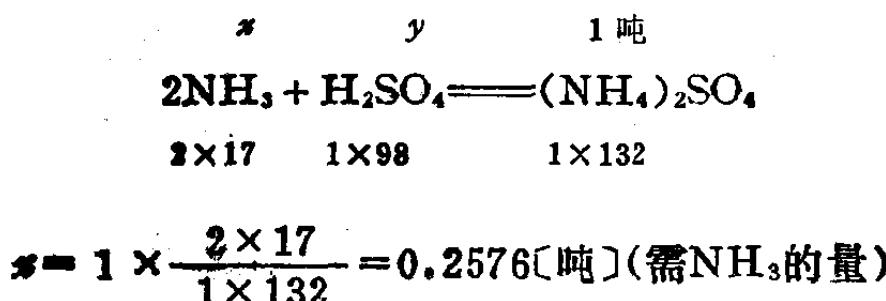
**例 1-4 将氨通入硫酸中制造硫酸铵，问每制造 1 吨硫酸**

❶ 摩尔的定义请见第二章。

❷ 摩尔质量：1 摩尔物质具有的质量。由于不同物质的分子量不同，1 摩尔分子的质量（摩尔质量）也就不同。物质的摩尔质量在数值上等于该物质的分子量，单位是[克/摩尔]。

铵理论上需要氨与100%硫酸各是多少?

解 写出化学反应方程式并标出量的关系

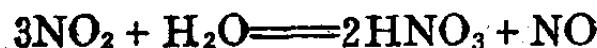
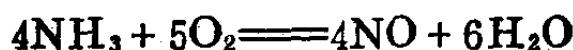


$$y = 1 \times \frac{1 \times 98}{1 \times 132} = 0.7424 \text{[吨]} \text{(需100\% H}_2\text{SO}_4\text{的量)}$$

答：生产1[吨]硫酸铵理论上需用氨0.2576[吨]，需用100%  $\text{H}_2\text{SO}_4$  0.7424[吨]。

例 1-5 用氨氧化制硝酸，假定制造过程中氨没有损耗，求制造1吨硝酸需要多少氨？

解 (1) 先写出平衡反应方程式



(2) 由上述反应式一步步地计算则较为复杂，若根据摩尔数计算就方便得多。从上述三个阶段反应可推出，恰是1摩尔的  $\text{NH}_3$  可生成1摩尔的  $\text{HNO}_3$ 。(1/3摩尔的NO可转化为1/3摩尔的  $\text{HNO}_3$ )

写成简式为



由于1/3摩尔的NO可生成1/3摩尔的  $\text{HNO}_3$ ，所以实际上理论上是1摩尔  $\text{NH}_3$  生成了1摩尔  $\text{HNO}_3$ 。

(3) 根据简化式计算