

化学工程与计算机 计算导论

[美] A. L. 迈尔斯 W. D. 塞德尔 著

化学工业出版社

化学工程与计算机计算导论

〔美〕A.L.迈尔斯 W.D.塞德尔 著

王庆田 苗延秀 张立昂 等译

化学工业出版社

A.L.Myers and W.D.Seider

**INTRODUCTION TO CHEMICAL ENGINEERING
AND COMPUTER CALCULATIONS**

PRENTICE-HALL(Englewood Cliffs, New Jersey 1976)

化学工程与计算机计算导论

王庆田 苗延秀 张立昂 等译

*

化学工业出版社 出版

(北京和平里七区十六号楼)

北京印刷一厂印刷

新华书店北京发行所发行

*

开本 $850 \times 1168^{1/8}$ 印张 $17\frac{5}{8}$ 插页 2 字数501千字 印数1—5050

1982年 8 月北京第 1 版1982年 8 月北京第 1 次印刷

统一书号15063·3287 定价2.20元

本书是从A.L. Myers与W. D. Seider合著的“Introduction to Chemical Engineering and Computer Calculations”一书（1976年美国Prentice-Hall公司出版）译出的。

原书是为具有微积分、物理学和普通化学基础知识的大学生而编写的一本化工过程单元计算。全书共分十三章。前九章介绍化工过程单元计算的理论基础，以及如何运用这些理论推算物质的性质，并进一步作物料平衡和能量平衡计算。全书着重于用数字计算机解题方法。可作为大学二年级一个学期的教材。最后三章介绍一些对化工过程计算具有普遍意义的数学方法，作为前面各章解题需要时的补充和参考。

本书可供高等学校化工系专业教师与学生阅读，亦可供化学工厂工程技术人员参考。

参加翻译人员为：序及第一章，万学达；第二、三章，盛德美；第四、十章及附录，王庆田；第五、十一、十二、十三章，张立昂；第六章，金彰礼；第七、八、九章，苗延秀。全书审校：万学达，王庆田，许志宏。

37106

序

本书是为具有微积分、物理学及普通化学基础知识的大学生而编写的有关化学工程的导论。前九章可作为大学二年级一个学期的教材。

前三章介绍化学加工过程的术语，并讲述一些单独装置的操作，如反应器、换热器及蒸馏塔等。还定性地研究了海水脱盐和煤的气化这样一类过程，为第三章讨论过程的综合作准备，在该章中，说明原料和能量的有效利用、环境保护、以及经济问题对于化工过程设计的影响。

化工过程计算的理论基础是守恒原理、热力学及数值分析。本书试图以符合逻辑的和统一的方式来展开这些理论。第四章介绍物料性质以及从方程式和图表来计算这些性质的方法，从而在第五章内引入包括关联、内插和信息检索在内的数据处理方法。

第六章至第九章讨论物料平衡及能量平衡。在这几章中的安排是：先叙述物料平衡，然后介绍能量平衡；先是单个的过程单元，然后是具有循环的完整过程；先物理转化，后化学反应。着重于分析：列写方程式，选择设计变量和编制解题算法。在例题中也一起介绍了一些重要的新概念，借以说明解题的技巧。第八章介绍的模块法将过程分析简化为对各单元个别地进行分析，这对于具有再循环及逆流等复杂情况也是一个非常好的办法。写第九章能量平衡时假设读者还没有学过热力学。

第十章对物料平衡及能量平衡作了更加深入的叙述。在这些计算中所用的相平衡及化学平衡的方程式则汇总在附录Ⅳ中。对于具有物料平衡和能量平衡的联立方程组则引入温度作为剥离变量。演算的例题包括绝热化学反应、绝热闪蒸及蒸馏塔。

全书着重于计算机解算方法，而第五、八及十章则尤其如此。在使用计算机以前的时代里，化学工程师依靠图解法和近似法解算物料平衡及能量平衡。而现在，由于有了大容量的计算机，这些方法就不那么重要了。工程师们已不再被迫去作不切实际的假设以使问题简化；反而因为有了计算机，就可以改变一些关键参数来模拟真实过程并观察其效果。

第十一至十三章中编入一些对化工过程计算具有最大使用价值的数学方法。第十一章讨论单个方程的解法。第十二章介绍矩阵代数，化学计算法语言。最后，第十三章介绍用优先排序法、剥离法、求导数和不求导数的迭代法来解算联立非线性方程组。第十一至十三章是在前面各章解题需要时作为参考资料用的。读者最好对于FORTRAN程序语言具有一些知识。

化工过程计算如同弹钢琴一样主要是靠实际练习。本书各章都有一些做好了例题，以帮助学生随着经验的积累而增强信心并提高计算的准确性。

A. L. 迈尔斯

W. D. 塞德尔

符 号 表

1. 大写英文字母

A	面积 原子量
B	第二维里系数 塔底物流流量
C_p	定压热容
D	馏出物流流量
$\mathcal{E}$	电动势
E	能量
F	流量, 单位时间内的分子数
F'	流量, 单位时间内的质量
F	力
G	吉布斯(Gibbs)自由能 ($H - TS$)
H	热焓 亨利常数
I	电流
K	化学反应平衡常数
L	液体物流流量
M	分子量
$\bar{M}$	混合物平均分子量
N_A	阿弗加德罗数
N_C	组分数
N_d	设计变量数
N_e	方程式个数
N_p	设备参数个数
N_d	热量项数
N_s	物流数
N_v	变量个数

N_w 功项数
 P 压力
 P^s 蒸气压力
 P_c 临界压力
 P_r 对比压力 $= P/P_c$
 Q 热量
 R 气体常数
 半径
 回流比
 S 熵
 T 热力学温度
 T_b 正常沸点
 T_c 临界温度
 T_r 对比温度 $= T/T_c$
 T_o 参考温度
 U 内能
 V 体积
 汽相物流流量
 W 功
 Z 电荷量

2. 小写英文字母

a 加速度
 c_p 定压分子热容
 c_v 定容分子热容
 d 微分算子
 e 自然对数底
 f 逸度
 f_{ij} 物流 i 中组分 j 的逸度
 g 分子吉布斯自由能
 g_c 式(1.2)中的常数
 g 重力加速度
 h 分子热焓

h'	单位质量的热焓
k	汽-液平衡常数 液-液平衡常数 波茨曼常数 反应速度常数
m	质量
m_{jk}	组分 j 中元素 k 的原子数
n	分子数
q	每分子的热量
q'	单位质量的热量
r	化学反应速度
s	分子熵
s'	每单位质量的熵
t	时间
u	分子内能
u'	每单位质量的内能
v	分子体积
v'	比容 (单位质量的体积)
v_c	临界分子体积
v	速度
w	每分子的功
w'	每单位质量的功
x	通用分子分率 液相分子分率 距离
x'	通用质量分率
x_{ij}	物流 i 中组分 j 的分子分率
y	气相分子分率
z	压缩因子 ($z = Pv/RT$) 高度 蒸馏塔混合 (即液相与汽相) 进料的分子分率
z_c	临界压缩因子

3. 希腊字母

- Γ 分子间的位能
- γ 比热的比值 $= c_p/c_v$
液相活度系数
反应物料转化为产品的转化率
- Δ 有限差分
- ε 收敛误差限
- θ 角位移, 弧度
- λ 液体蒸发潜热
- ν 化学计算系数
- π 圆周率
- ρ 密度, 单位体积的质量
- τ 转矩
时间
- ω 偏心因子
角速度, 单位时间 (转过) 的弧度

4. 下标

- c 指临界状态
- i 指物流号
- j 指组分号
- m 指混合物
- r 指对比性质

5. 上标

- e 热力学超额量
- f 指由元素生成化合物
- m 指等温混合过程
- 0 指零压, 气体为理想状态
指参考状态
- $'$ 指单变量函数的一阶导数
指以质量为准 (相对于以分子为准)
- $\bullet$ 指未知数的初估值

6. 缩写字母及惯用的符号

{ } 括号内包括函数的变元, 例如 $f\{x\}$

— 符号上加短横表示为分子平均值

(g), (l), (s) 指化学反应中物质的状态 (气态、液态、固态)

atm 大气压

Btu 英热单位

°C 摄氏度

cal 卡

cm 厘米

°F 华氏度

ft 英尺

g 克

hp 马力

hr 小时

in 英寸

J 焦耳

°K 凯氏度

K.E. 动能

kg 公斤

kw-hr 度 (千瓦小时)

lb 磅质量

lb_f 磅力

ln 自然对数

log₁₀ 常用对数 (以10为底的对数)

m 米

min 分 (钟)

mm 毫米

mol 衡分子

N 牛顿

P.E. 位能

psi 每平方英寸磅力

°R 兰氏度

rpm 每分钟转数

sec 秒 (钟)

V 伏

W 瓦

目 录

符号表

第 一 章 绪论.....	(1)
1.1 化学工程专业	(1)
1.2 过程单元, 化工过程的基本单元	(1)
1.3 物料平衡及能量平衡	(7)
1.4 过程单元设计	(7)
1.5 化工过程: 由过程单元组成的系统	(8)
1.6 化工经济	(10)
1.7 化工过程控制	(10)
1.8 资源及环境	(12)
1.9 单位制	(13)
习题.....	(28)
第 二 章 化工过程.....	(30)
2.1 化学加工的历史	(30)
2.2 用石油或煤合成天然气(甲烷)	(31)
2.3 海水脱盐	(40)
第 三 章 过程综合.....	(60)
3.1 过程操作	(60)
3.2 化学状态	(62)
3.3 过程综合	(63)
3.4 过程综合举例: 氯乙烯的制造	(64)
第 四 章 物质的物理和化学性质.....	(77)
4.1 纯流体的体积性质	(77)
4.2 科技文献中的数据来源	(127)
4.3 纯物质的常数	(129)
4.4 表、方程式及平滑数据曲线图	(132)
4.5 混合物的性质	(152)
习题.....	(157)

第五章 数据处理	(161)
5.1 关联、逼近和插值	(161)
5.2 图解法	(163)
5.3 最小二乘方法	(175)
5.4 插值法	(182)
5.5 性质信息系统	(186)
习题.....	(199)
第六章 过程单元的物质平衡	(203)
6.1 质量守恒原理	(203)
6.2 过程的类型: 间歇型和连续型	(204)
6.3 物质平衡方程式	(206)
6.4 多组分物流	(207)
6.5 例题	(208)
6.6 物质平衡的一般分析	(210)
6.7 规定设计变量时的常见错误	(220)
6.8 列写物质平衡方程时的常见错误	(221)
6.9 分离过程	(221)
6.10 用计算机解算物质平衡	(244)
习题.....	(249)
第七章 化学反应器的物质平衡	(255)
7.1 化学反应	(255)
7.2 化学反应器的物质平衡方程式	(260)
7.3 平行反应的物质平衡	(268)
7.4 非平衡反应的转化率	(272)
7.5 用观察法算物质平衡	(278)
7.6 一种化学反应器的简化模型: CSTR(连续搅拌反应罐)	(280)
7.7 用计算机解算反应器的物质平衡	(287)
习题.....	(293)
第八章 过程单元系统的物质平衡	(303)
8.1 循环物流	(303)
8.2 排放	(312)
8.3 化工过程的物质平衡	(316)

8.4 单元模块法	(317)
8.5 使用数字计算机的单元模块法	(329)
习题	(337)
第九章 能量平衡导论	(347)
9.1 热力学第一定律	(347)
9.2 热焓与热量	(361)
9.3 无反应物质的热焓计算	(362)
9.4 反应物质的热焓计算	(370)
9.5 不等温条件下的能量平衡	(376)
习题	(387)
第十章 物料和能量平衡	(395)
10.1 物料平衡方程的复习	(395)
10.2 能量平衡方程的复习	(395)
10.3 问题分析	(398)
10.4 联立物料及能量平衡	(421)
习题	(473)
第十一章 单个方程式的解法	(479)
11.1 图解法	(479)
11.2 逐次代换法	(482)
11.3 韦格斯坦法	(490)
11.4 牛顿法	(493)
11.5 对分区间法	(500)
习题	(502)
第十二章 线性方程组	(504)
12.1 独立的方程组	(504)
12.2 高斯-约当消去法	(505)
12.3 解线性方程组的计算机程序	(508)
习题	(513)
第十三章 非线性方程组	(515)
13.1 优先排序法	(516)
13.2 剥离法	(520)
13.3 不求偏导数的迭代法	(522)

13.4 求偏导数的迭代法	(527)
习题	(539)
附录	(541)
I. 解算化学反应器的物料平衡方程组	(541)
II. 元素周期表	(插页)
III. FORTRAN 语言的一个分支	(545)
IV. 相平衡与化学平衡	(545)

第一章 绪 论

1.1 化学工程专业

工程技术的目的在于应用科学知识来提高现实生活水平。

化学工程是指主要操作是一些化学反应的过程的设计、建设和操作。

到2000年时,化学工程师将要解决哪些问题?并没有人确切知道,但可列出一些可能的问题,如星际旅行的生活保障系统、在地球上将消费物品进行循环从而保存自然资源的化工厂、制造目前尚未发明的物质的加工过程。将来的化工过程,不管它们会是怎样,但都必须遵循自然界的物理和化学定律。本书的目的就是要讨论有关化学工程专业的那些定律、原理、技巧和实践经验。

计算机现已取代计算尺用来作工程计算。计算机程序设计语言精确,这就使得工程师们要更加仔细考察工程的基本原理。本书将试图以不带偏向的观点来介绍计算机的能力与局限性

1.2 过程单元,化工过程的基本单元

化学工程师将整个制造过程分为一些可独立研究其操作特性的单元操作。这些单元操作包括流体流动、传热、冷凝与煮沸、化学反应、结晶、气体扩散、沉淀、过滤、固体的粉碎与分选、吸收、吸附、萃取和干燥。

过程单元是一个设备或某个化工过程的一个部分,当物料通过其中时完成某种物理变化或化学变化,或同时完成这两类变化。大多数过程单元完成几项单元操作。

图1-1所示为一典型的过程单元——管式反应器。此反应器是为气体放热化学反应而设计的,它需用固体催化剂。进料气体以某一稳定的流量进入,当其通过周围是热的催化剂颗粒的管子时,被加热