

## <<计算机化工辅助计算>>

### 图书基本信息

书名：<<计算机化工辅助计算>>

13位ISBN编号：9787562824428

10位ISBN编号：7562824428

出版时间：2008-10

出版时间：华东理工大学出版社

作者：浦伟光，曹正芳 编著

页数：172

字数：222000

版权说明：本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问：<http://www.tushu007.com>

## <<计算机化工辅助计算>>

### 内容概要

本书把化工知识、数值计算方法和计算机语言的编程能力三方面的内容紧密结合起来，以期提高读者的化工计算机应用所需的分析、建模、计算和编程的能力。

并通过C语言的应用示范例子和程序，使读者更容易掌握相关的知识，也可获得更多的练习机会。本书编写时考虑读者已有化工原理的知识，对单元操作的过程描述尽量简化，把重点放在过程的数学模型的建立、解题的计算步骤和程序的模块化设计及计算机运行的可靠性上。

本书共分八章，分别为化工物性数据和平衡数据、流体输送和管路计算、传热计算，精馏计算、其他单元操作的计算、化工优化计算、常用流程模拟软件简介、化工常用数值计算方法。

附录还给出了部分计算程序、常用化合物的物性计算常数和wilson模型参数。

本书的各章内容各自独立，所以作为教材使用可选择全部或部分内容，也可结合实际适当补充其他有关内容。

本书可作为化学、化工及相关专业的本科和研究生教材，也可作为相关研究人员的参考用书。

## &lt;&lt;计算机化工辅助计算&gt;&gt;

## 书籍目录

第1章 化工物性数据和平衡数据 1.1 化工物性数据库简介 1.2 化工物性子程序的建立 1.2.1 数据型数据子程序 1.2.2 公式计算数值型子程序 1.2.3 插值数值型数据子程序 1.2.4 估算数值型子程序 1.2.5 混合物的物性 1.2.6 物性的压力校正 1.3 气液平衡数据 1.3.1 气液平衡关系 1.3.2 活度系数的计算 1.3.3 逸度系数的计算 1.3.4 利用实验数据 1.4 液液平衡数据 1.4.1 液液平衡关系 1.4.2 利用实验数据 1.5 实验数据的拟合第2章 流体输送和管路计算 2.1 流体输送过程的数学模型和设计自由度分析 2.2 管路的摩擦系数计算 2.3 几种实际应用计算 2.3.1 简单管路的管径设计 2.3.2 简单管路的模拟计算 2.3.3 离心泵的工作点计算 2.4 复杂管路的计算 2.4.1 分支和汇合管路 2.4.2 并联管路 2.5 管路网络的计算和模拟 2.5.1 数学模型 2.5.2 编程要点 2.6 可压缩流体输送的计算 2.6.1 数学模型 2.6.2 可压缩气体的管路计算第3章 传热计算 3.1 列管换热器的设计 3.1.1 设计计算的数学模型 3.1.2 列管换热器设计步骤 3.2 列管式换热器的操作模拟 3.2.1 传热单元数和换热器效率 3.2.2 第一类命题换热器模拟计算的步骤 3.2.3 第二类命题换热器模拟计算的步骤 3.2.4 冷凝器的操作模拟 3.3 换热器系统的模拟 3.3.1 序贯换热器系统模拟 3.3.2 带分支的换热器系统 3.3.3 复杂换热器网络系统 3.4 传热物体内部的温度分布第4章 精馏计算 4.1 相平衡和泡露点的计算 4.1.1 泡露点的计算 4.1.2 理想物系的泡露点计算 4.1.3 非理想物系的泡露点计算 4.1.4 精馏塔操作压强的确定 4.2 闪蒸的计算 4.2.1 闪蒸过程的数学模型 4.2.2 等温闪蒸 4.2.3 绝热闪蒸 4.3 二元精馏的计算 4.3.1 二元精馏的数学模型 4.3.2 精馏塔理论塔板的逐板计算 4.4 多元精馏的简捷计算 4.4.1 全回流条件下的最少理论板数 4.4.2 非关键组分的分布 4.4.3 多元精馏分离的最小回流比 4.4.4 理论板数的计算 4.4.5 多元精馏简捷计算的计算步骤 4.5 多元精馏的严格计算 4.5.1 通用的数学模型 4.5.2 常规精馏塔的求解 4.5.3 泡点法求解MESH方程组 4.5.4 流量加和法求解MESH方程组第5章 其他单元操作的计算 5.1 流体与颗粒的相对运动 5.1.1 流体绕过颗粒的数学模型 5.1.2 流体带出最大颗粒直径的计算 5.1.3 颗粒的沉降速度 5.1.4 计算颗粒由静止开始的加速运动 5.1.5 过滤常数的测定计算 5.2 吸收计算 5.2.1 填料吸收塔的计算 5.2.2 多组分板式吸收塔的模拟计算 5.3 萃取计算 5.3.1 单级萃取计算 5.3.2 多级逆流萃取理论级数的计算第6章 化工优化计算 6.1 技术经济数据 6.1.1 设备费用 6.1.2 操作费用 6.2 几个化工单元操作优化实例 6.2.1 最佳管径的设计 6.2.2 换热器冷却水出口温度的优化 6.2.3 精馏塔最佳回流比的确定 6.3 过程系统的优化 6.3.1 温焓图和复合曲线 6.3.2 夹点和换热系统的集成 6.3.3 系统热集成的目标函数第7章 常用流程模拟软件简介 7.1 PRO / 软件简介 7.1.1 软件的物性数据库 7.1.2 热力学方法 7.1.3 主要单元操作模型 7.1.4 附加模块 7.1.5 图形界面 7.1.6 应用工业领域 7.2 Aspen Plus 软件简介 7.2.1 完备的数据库 7.2.2 Aspen Plus具有很强的集成能力 7.2.3 提供丰富的单元操作模块 7.2.4 具有模型 / 流程分析功能 7.3 ChemCAD软件简介 7.3.1 i高度集成、界面友好和较为详尽的帮助系统 7.3.2 丰富的物性选择 7.3.3 完整的单元操作单元以及强大的计算和分析功能 7.3.4 集成的设备标定模块和附带工具模块 7.3.5 支持动态模拟第8章 化工常用数值计算方法 8.1 插值 8.1.1 线性插值 8.1.2 二次插值 (拉格朗日三点插值) 8.2 一元非线性方程的迭代求解 8.2.1 直接迭代 8.2.2 韦斯顿迭代 8.2.3 牛顿迭代 8.3 方程组求解 8.3.1 解三对角线性方程组 8.3.2 优先排序解非线性方程组 8.4 方程的拟合 8.4.1 线性方程的拟合 8.4.2 非线性函数的线性化 8.5 一阶常微分方程的数值解 8.5.1 欧拉法 8.5.2 四阶龙格库塔法 8.6 数值积分 8.6.1 梯形法 8.6.2 辛普森法参考文献附录1 部分C语言计算程序附录2 一些常用化合物物性公式的计算常数附录3 wilson模型参数

## &lt;&lt;计算机化工辅助计算&gt;&gt;

## 章节摘录

第1章 化工物性数据和平衡数据 化工物性和平衡关系的定量描述是化工过程计算必不可少的基础。

在实际的化工计算中化合物物性数据和平衡数据的计算占有相当大的比例，有时化合物物性的计算甚至成为整个计算过程的关键。

由于物性数据量和平衡数据量非常巨大，对于一个具体的化工过程计算需要建立能满足该物系和过程的物性数据计算子程序库（又称为化工数据库），在计算机计算过程中根据需求进行调用。

本章主要介绍这类化工数据库或物性计算子程序的建立方法，以及重要物性数据和平衡数据的计算方法。

化工纯物性数据可以分成两类：一类与状态温度或压力无关，如临界温度、临界压力、标准态沸点、偏心因子等，称作数据型数据；另一类与温度或压力有关，如密度、黏度、导热系数、表面张力等，称作数值型数据。

第一类数据只要知道物质的名称就可查得；而第二类数据必须知道系统的温度、压力或组成再通过计算（对函数关系式）或插值（对列表函数）才能得到。

混合物的物性数据则需在纯物性数据的基础上由合适的混合规则计算得到。

化工平衡数据也可分成两类：一类为实验数据，经过上百年的积累，已经有了相当数量的气液、液液平衡的实验数据，一般都以列表函数的形式存在，由于物性繁多特别是多元的平衡关系，其使用范围比较有限；另一类为通过状态方程进行计算，但各种状态方程对物系类型有一定的要求，也有一定的局限性。

在进行设备计算时还需要设备的系列尺寸数据，而进行过程优化时还需要设备、材料和能源价格的经济数据。

1.1 化工物性数据库简介 伴随着信息时代的到来以及计算机软件管理系统水平的不断提高，近年来化工物性数据库不断得到完善和发展。

国内外众多的数据库在提供化工物性数据检索咨询服务、进行物性推算、数据深度加工等方面，已经成为化工科技人员从事过程设计与开发、指导生产与管理的有力工具。

化工物性数据库的研制成功是化工科技进步的重要标志之一。

.....

## <<计算机化工辅助计算>>

### 编辑推荐

《计算机化工辅助计算》可作为化学、化工及相关专业的本科和研究生教材，也可作为相关研究人员的参考用书。

<<计算机化工辅助计算>>

版权说明

本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问:<http://www.tushu007.com>