

<<物性估算原理及计算机计算>>

图书基本信息

书名：<<物性估算原理及计算机计算>>

13位ISBN编号：9787502582487

10位ISBN编号：7502582487

出版时间：2006-4

出版时间：化学工业出版社

作者：董新法,方利国,陈砺/国别：中国大陆

页数：338

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>

<<物性估算原理及计算机计算>>

内容概要

本书回顾了物性估算的研究历史，系统阐述了流体物性估算的方法和原理，详细介绍了热力学、统计力学、对应状态原理、基团贡献法、分子拓扑和人工神经网络等在流体物性估算中的应用，讨论了这些估算方法实现计算机计算的可能性和方法，并提供了相关的应用程序。

本书还就物性估算中用到的数学及计算机知识，以及化工物性数据库系统软件开发的基本方法进行了简要介绍。

全书数据翔实，实例丰富，书写简练，注重实用，采用原理—方法—实例—编程计算的编写风格，力图给读者呈现化工物性估算的一揽子解决方案。

本书可作为研究生和高年级本科物性估算及原理教材，也可作为从事化工、轻工、材料和冶金等专业的科研和工程技术人员参考。

本书共分九章。

第1章绪论；第2章介绍物性数据与热力学关系；第3章介绍统计力学与流体的平衡性质和传递性质；第4章介绍对应状态原理及其应用；第5章介绍分子结构与宏观性质；第6章介绍UNIFAC法估算非电解质汽液平衡液相活度系数；第7章介绍分子拓扑与物性；第8章介绍人工神经网络与物性；第9章介绍物性数据查询系统的开发。

本书介绍的数据估算法力求准确、可靠，注重工程实用，突出其原理和具体方法，并提供各种源代码

。

<<物性估算原理及计算机计算>>

书籍目录

第1章 绪论1.1 概述1.2 物性估算的意义及方法1.3 物性估算方法的基本要求1.4 物性估算中的数学及计算机知识1.4.1 物性估算中有关参数拟合的方法1.4.2 物性估算中有关非线性方程求解1.4.3 物性估算中有关线性代数知识1.5 物性估算的发展趋势参考文献第2章 热力学关系与物性2.1 纯物质蒸气压的计算2.1.1 Clapeyron方程2.1.2 纯物质蒸气压方程2.1.3 纯物质蒸气压估算实例2.2 纯物质汽化热的计算2.2.1 任意温度下汽化热的计算2.2.2 正常沸点下汽化热的求算2.2.3 汽化热随温度的变化2.2.4 汽化热估算实例2.3 偏心因子的求算2.4 液体摩尔比热容的求算2.4.1 液体的摩尔比热容2.4.2 Watson热力学循环求液体摩尔比热容2.4.3 Watson热力学循环求液体摩尔比热容实例2.5 计算机编程计算示例参考文献第3章 流体的平衡性质和传递性质3.1 玻尔兹曼分布定律3.1.1 名词简介3.1.2 玻尔兹曼分布定律3.2 热力学函数与配分函数3.2.1 内能3.2.2 焓3.2.3 焓3.2.4 自由能3.2.5 自由焓3.2.6 配分函数的析因子3.3 运动形式对热力学函数的贡献3.3.1 平动对热力学函数的贡献3.3.2 振动对热力学函数的贡献3.3.3 转动对热力学函数的贡献3.4 统计力学法计算理想气体平衡性质3.4.1 双原子分子3.4.2 多原子分子3.4.3 统计力学法计算理想气体平衡性质实例3.5 体分子运动的平均速度和自由程3.5.1 气体分子运动的速度分布3.5.2 气体分子运动的平均速度3.5.3 气体分子运动的平均自由程3.6 气体的传递性质3.6.1 黏度3.6.2 热导率3.6.3 扩散系数3.6.4 气体传递性质估算实例3.7 液体的传递性质3.7.1 液体黏度的估算3.7.2 液体热导率的估算3.7.3 液体扩散系数的估算3.7.4 液体传递性质估算实例3.8 计算机编程实例参考文献第4章 对应状态原理及其应用4.1 分子间的位能4.1.1 分子间的吸引能4.1.2 分子间的排斥能4.1.3 位能函数4.2 则系综和正则配分函数4.3 实际气体及其统计处理4.3.1 实际气体的正则配分函数4.3.2 构型积分及其简化处理法4.3.3 用于几种分子模型的结果4.4 对应状态原理4.5 纯物质蒸气压和汽化热4.5.1 对应状态法计算蒸气压4.5.2 对应状态法计算汽化热4.5.3 对应状态法计算蒸气压和汽化热实例4.6 饱和液体密度和液体比热容的估算4.6.1 饱和液体密度的估算4.6.2 液体比热容的估算4.6.3 对应状态法计算饱和液体密度和液体比热容实例4.7 流体黏度的估算4.7.1 气体黏度的估算4.7.2 液体黏度的估算4.7.3 流体黏度的估算实例4.8 编程计算参考文献第5章 基团贡献法及其应用5.1 分子性质的加和性5.1.1 分子中的键长与键角5.1.2 分子内原子的作用距离5.1.3 结构单元的选择与加和性规则的近似程度5.2 基团贡献法5.2.1 基团的划分5.2.2 分子性质与基团元贡献值的关联5.2.3 基团贡献法中的修正项5.3 基团贡献法估算纯组分的基本性质5.3.1 纯物质临界性质估算5.3.2 纯物质正常沸点的估算5.3.3 纯物质熔点的估算5.3.4 基团贡献法估算纯组分的基本性质实例5.4 基团法计算纯物质的蒸气压和汽化热5.4.1 纯物质的蒸气压的估算5.4.2 纯物质的汽化热的估算5.4.3 基团法计算纯物质的蒸气压和汽化热实例5.5 基团贡献法估算理想气体的标准生成热、标准熵和比热容5.5.1 Benson法5.5.2 ABWY法估算5.5.3 Thinh—Duran—Bamalho法5.5.4 键贡献法5.5.5 C—G法5.5.6 Verma—Doraiswamy法和Franklin法5.5.7 Rihani—Doraiswamy法5.5.8 Joback法5.5.9 Souders法5.5.10 基团贡献法估算理想气体的标准生成热、标准熵和比热容实例5.6 基团贡献法估算饱和液体密度和液体比热容5.6.1 基团贡献法估算饱和液体密度5.6.2 基团贡献法估算液体比热容5.6.3 基团贡献法估算饱和液体密度和液体比热容实例5.7 基团贡献法估算流体的传递性质5.7.1 基团贡献法估算低压气体黏度5.7.2 基团贡献法估算气体的热导率5.7.3 基团贡献法估算计算液体的黏度5.7.4 液体热导率的计算5.7.5 基团贡献法估算流体的传递性质实例5.8 基团贡献法估算表面张力5.8.1 Macleod—Sugden法5.8.2 CSGC法5.8.3 基团贡献法估算表面张力实例5.9 基团贡献法计算机编程示例参考文献第6章 UNIFAC法的理论基础及其应用6.1 似晶格模型溶液理论及其对无热溶液的处理6.1.1 液体的似晶格模型6.1.2 无热溶液6.1.3 无热溶液的混合自由焓和过剩自由焓6.2 UNIFAC方程式6.3 UNIFAC法估算活度系数6.4 UNIFAC法估算活度系数实例及计算机程序参考文献第7章 分子拓扑与物性7.1 分子拓扑与拓扑指数7.2 饱和链烃类化合物的距离矩阵7.3 几种拓扑指数与物性的关联7.3.1 拓扑指数 Y_2 与物性的关联7.3.2 拓扑指数 F 与物性的关联7.3.3 拓扑指数 A_{m1} 、 A_{m2} 和 A_{m3} 与物性的关联7.3.4 拓扑指数参考文献第8章 人工神经网络在物性估算中的应用8.1 神经网络理论的发展及沿革8.1.1 生物神经网络和人工神经网络8.1.2 人工神经网络的发展

<<物性估算原理及计算机计算>>

历史8.1.3 人工神经网络物性估算中的应用及未来发展趋势8.2 神经网络的基本原理8.2.1 神经元的基本生物特性8.2.2 神经元的基本数学表达8.2.3 神经网络的基本结构类型及学习规则8.2.4 神经网络解决物性估算问题的基本策略8.3 几种典型的人工神经网络的基本原理及应用策略8.3.1 BP网络8.3.2 Hopfield神经网络8.4 神经网络物性估算应用策略及应用实例8.4.1 应用策略8.4.2 常压沸点下蒸发潜热计算8.4.3 常压沸点计算及临界压缩因子的计算8.4.4 人工神经网络的优越性及存在的问题参考文献第9章 化工物性数据库系统软件开发9.1 化工物性数据库软件开发的目的是意义9.1.1 数据库知识简介9.1.2 化工物性数据库开发目的及意义9.1.3 化工物性数据库发展趋势9.2 化工物性数据库软件开发方案的确定9.2.1 软件需求及服务对象分析9.2.2 软件所需资源分析9.2.3 软件开发平台确定9.2.4 软件功能及逻辑结构确定9.3 化工物性数据库软件具体功能代码编写9.3.1 数据库的建立及连接9.3.2 数据绑定及窗体开发9.3.3 常规数据查询9.3.4 数据计算、记录及打印9.4 软件的维护及进一步改进参考文献

<<物性估算原理及计算机计算>>

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>