

به نام خدا

محاسبات مهندسی شیمی

نوشته‌ی:

بروس آ فینلیسون

Bruce A Finlayson

ترجمه‌ی:

امیر حسین شهبازی

سارا مقصودی

دکتر جعفر توفیقی



۱۳۸۹

سرشناسه: فینلیسون، بروس ا.

Finlayson, Bruce A

عنوان و نام پدیدآور

محاسبات مهندسی شیمی / نوشته‌ی بروس آ فینلیسون : ترجمه‌ی امیر حسین شهبازی، سارا مقصودی، جعفر توفیقی.

مشخصات نشر: تهران: اندیشه سرا، ۱۳۸۸.

مشخصات ظاهری: ۳۰۴ ص: مصور، جدول، نمودار: ۲۲×۲۹ س.م.

شابک 978-600-5716-13-9

وضعیت فهرست نویسی: فیبا

یادداشت: عنوان اصلی: **Introduction to chemical engineering computing, 2006.**

موضوع: مهندسی شیمی -- داده پردازش

شناسه افزوده: شهبازی، امیر حسین، ۱۳۶۱- مترجم

شناسه افزوده: مقصودی، سارا، ۱۳۶۰- مترجم

شناسه افزوده: توفیقی، جعفر، ۱۳۳۴- مترجم

رده بندی کنگره: ۱۳۸۸ ۹۴۱/۸۴ TP

رده بندی دیویی: ۶۶۰/۰۲۸۵

شماره کتابشناسی ملی: ۱۹۳۸۹۴۶



انتشارات اندیشه سرا

محاسبات مهندسی شیمی

نوشته‌ی: بروس آ فینلیسون ترجمه‌ی: امیر حسین شهبازی، سارا مقصودی، دکتر جعفر توفیقی

چاپ اول، ۱۳۸۹، شمارگان ۱۵۰۰، ۱۰۵۰۰ تومان

شابک ۹۷۸-۶۰۰-۵۷۱۶-۱۳-۹ ISBN 978-600-5716-13-9

حق چاپ و نشر محفوظ و هرگونه استفاده از محتوای این کتاب به داشتن اجازه‌ی کتبی از ناشر نیازمند است.

انتشارات اندیشه‌سرا از انتشار کتاب‌های ارزشمند حمایت می‌کند: ۰۹۱۲۳۱۶۱۶۸۷

www.andishehsara.org

فهرست مطالب

پیش‌گفتار مؤلف

۱۱

پیش‌گفتار مترجمان

۱۴

۱۵

۱ مقدمه

۱۶

فصول و ضمایم

۱۷

معادلات جبری

۱۷

شبیه‌سازی فرایند

۱۷

معادلات دیفرانسیل

۱۸

ضمایم

۱۹

۲ معادلات حالت

۱۹

معادلات حالت - فرمول‌بندی ریاضی

۲۱

حل معادلات حالت با Excel (یک معادله و یک مجهول)

۲۱

حل با استفاده از Goal Seek

۲۲

حل با استفاده از Solver

۲۲

مثالی از حل یک مسأله‌ی مهندسی شیمی با به کارگیری Goal Seek

۲۳

حل معادلات حالت با MATLAB (یک معادله یک مجهول)

۲۴

مثالی از حل یک مسأله‌ی مهندسی شیمی با MATLAB

۲۶

حل مثالی دیگر از مسائل مهندسی شیمی با MATLAB

۲۷

معادلات حالت در Aspen Plus

۲۷

مثال

۲۹

حجم ویژه‌ی مخلوط

۳۳

خلاصه‌ی فصل

۳۳

مسائل

۳۵

۳ تأخیر ناگهانی

۳۵

تأخیر ناگهانی و جداسازی فازها

۳۶

تأخیر ناگهانی هم‌دما - دستیابی به معادلات

۳۷

حل مثالی با Excel

۳۸

پارامترهای ترمودینامیکی

۴۰

حل مثال با MATLAB

۴۰

حل مثال با Aspen Plus

۴۳

مایعات غیر ایده‌آل - بررسی کارایی مدل ترمودینامیکی

۴۶

خلاصه‌ی فصل

۴۶

مسائل

۴۹

۴ تعادل شیمیایی

۴۹

تعادل شیمیایی

۵۰

مثال: تولید هیدروژن برای مصرف در پیل سوختی

۵۱	حل با Excel
۵۲	حل با MATLAB
۵۴	تبادل شیمیایی با دو معادله یا بیشتر
۵۴	حل چند معادله چند مجهول با MATLAB
۵۵	روش ۱- استفاده از دستور 'fsolve'
۵۵	روش ۲- استفاده از تابع 'fminsearch'
۵۶	تنظیمات در MATLAB
۵۷	تبادلات شیمیایی با به کارگیری Aspen Plus
۵۷	خلاصه‌ی فصل
۵۹	مسائل

۵ موازنه‌ی جرم به همراه جریان‌های برگشتی

۶۱	فرمول‌بندی ریاضی
۶۳	مثال بدون جریان برگشتی
۶۵	مثال همراه با جریان برگشتی؛ مقایسه روش حل همزمان و متوالی
۶۷	مثالی از شبیه‌سازی فرایند با Excel برای موازنه‌های جرم ساده
۶۸	مثالی از شبیه‌سازی فرایند با Excel همراه با تبادل واکنش شیمیایی
۶۹	مثالی از شبیه‌سازی فرایند با Excel همراه با تبادل فازی
۷۱	آیا تکرارها به جواب رسید؟
۷۱	نکات الحاقی
۷۱	خلاصه‌ی فصل
۷۲	تمرین کلاس
۷۲	بحث کلاسی
۷۲	مسائل

۶ شبیه‌سازی تجهیزات انتقال جرم

۷۷	ترمودینامیک
۷۹	مثال: تقطیر چند جزئی با روش‌های میان‌بر
۸۰	تعیین روابط ریاضی
۸۴	تقطیر چند جزئی با روش‌های دقیقی سینی به سینی
۸۶	مثال: جذب در بستر پر شده
۸۷	مثال: جداسازی محصول واحد گاز
۸۹	خلاصه‌ی فصل
۹۰	تمرین کلاسی
۹۰	مسائل

۷ شبیه‌سازی فرآیند

۹۳	کتابخانه‌ی مدل
۹۴	مثال: فرایند آمونیاک
۱۰۳	هزینه‌های یوتیلیتی
۱۰۵	نکاتی درباره همگرایی
۱۰۶	بهینه‌سازی

۱۰۹	خلاصه‌ی فصل
۱۰۹	تمرین کلاسی
۱۰۹	مسائل

۸ راکتورهای شیمیایی

۱۱۲	فرمول‌بندی ریاضی راکتورها
۱۱۲	مثال: راکتور جریان پلاگ و راکتور ناپیوسته
۱۱۳	مثال: راکتور مخزنی بهم زده پیوسته
۱۱۴	کاربرد MATLAB برای حل معادلات دیفرانسیل معمولی
۱۱۴	مثالی ساده
۱۱۵	استفاده از دستور 'Global'
۱۱۶	ارسال پارامترها
۱۱۷	مثال: راکتور جریان پلاگ هم‌دما
۱۱۹	مثال: راکتور جریان پلاگ غیر هم‌دما
۱۲۱	به‌کارگیری FEMLAB برای حل معادلات دیفرانسیل معمولی
۱۲۱	مثالی ساده
۱۲۳	مثال: راکتور جریان پلاگ هم‌دما
۱۲۴	مثال: راکتور جریان پلاگ غیر هم‌دما
۱۲۷	مسائل راکتور با تغییرات مول و چگالی متغیر
۱۲۸	راکتورهای شیمیایی با محدودیت‌های انتقال جرم
۱۳۱	راکتورهای مخزنی بهم زده پیوسته
۱۳۱	حل با Excel
۱۳۲	حل با MATLAB
۱۳۲	CSTR با چندین جواب
۱۳۲	حل معادلات چندگانه با MATLAB
۱۳۳	راکتورهای مخزنی به هم زده پیوسته گذرا
۱۳۷	خلاصه‌ی فصل
۱۳۷	مسائل

۹ فرآیندهای انتقال در رنگ پخت

۱۴۴	کاربردها در مهندسی شیمی - فرمول‌بندی ریاضی
۱۴۴	انتقال حرارت
۱۴۴	نفوذ و واکنش
۱۴۵	جریان سیال
۱۴۶	انتقال حرارت ناپایا
۱۴۷	مثال: مسأله‌ی انتقال حرارت در یک تیغه
۱۴۸	مثال: واکنش و نفوذ
۱۵۰	حل پارامتری
۱۵۲	مثال: جریان سیال نیوتونی درون لوله
۱۵۳	مثال: جریان سیال غیر نیوتونی در لوله
۱۵۶	مثال: انتقال حرارت گذرا
۱۵۸	مثال: جذب سطحی خطی

۱۶۰	مثال: کروماتوگرافی
۱۶۲	خلاصه‌ی فصل
۱۶۲	مسائل

۱۶۷	۱۵ فصل: سینتیک در فاز مایع
۱۶۸	مبانی ریاضی جریان سیال
۱۶۸	معادله‌ی ناویر-استوکس
۱۶۹	سیال غیر نیوتونی
۱۷۱	مثال: جریان ورودی به لوله
۱۷۶	مثال: جریان ورودی یک سیال غیر نیوتونی
۱۷۷	مثال: جریان در ابزارهای ریز سیالی
۱۸۰	مثال: جریان آشفته درون لوله
۱۸۲	مثال: شروع جریان در یک لوله
۱۸۴	مثال: جریان از میان روزنه
۱۸۸	مثال: جریان درون اختلاطگر مارپیچ
۱۸۹	شرایط مرزی
۱۹۰	بی‌بعد سازی
۱۹۲	خلاصه‌ی فصل
۱۹۳	مسائل

۱۹۵	۱۶ فصل: سینتیک در فاز جامد
۱۹۶	معادله‌ی نفوذ همرفتی
۱۹۶	معادلات بی‌بعد
۱۹۷	شرایط مرزی
۱۹۷	مثال: انتقال حرارت در دو بعد
۲۰۰	مثال: رسانش حرارت در حضور حفره
۲۰۱	مثال: پخش در دستگاه‌های ریز سیالی
۲۰۲	اثر عدد پکلت
۲۰۵	مثال: گرانش روی تابع غلظت
۲۰۵	مثال: اتلاف لزج
۲۰۷	مثال: راکتور شیمیایی
۲۰۷	مثال: واکنش‌های روی دیواره
۲۰۸	مثال: آمیختگی در اختلاطگر مارپیچ
۲۰۹	خلاصه‌ی فصل
۲۰۹	مسائل

۲۱۵	۱۷ فصل: مکانیک در دستگاه‌های مایع
۲۱۵	سازماندهی سل‌ها
۲۱۵	محتویات سل‌ها
۲۱۶	قالب‌بندی
۲۱۶	توضیحات
۲۱۶	شکل‌ها، معادلات و لینک‌های وب

۲۱۶	انتخاب ستون‌ها برای نمودار، رگرسیون و چاپ
۲۱۶	کپی فرمول‌ها در عرض و ستون صفحه گسترده
۲۱۷	افزودن سطرها و ستون‌ها
۲۱۷	تقسیم/ تثبیت
۲۱۸	فعال کردن تکرار، رواداشت
۲۱۹	الصاق
۲۱۹	نمودار - Scatter، x، ویرایش، نمودارهای چندگانه و نمودارهای سطح
۲۲۱	بازآرایی صفحه گسترده
۲۲۱	صدور و وارد کردن فایل‌های متنی، هر بار یک ستون
۲۲۱	صدور و وارد کردن فایل‌های متنی، چندین ستون
۲۲۲	صدور یک فایل متنی
۲۲۲	ابزارها
۲۲۲	توابع
۲۲۲	ماتریس‌ها
۲۲۳	راهنمای Excel
۲۲۳	موارد به کارگیری Excel

ضمیمه‌های پیوسته در آید: MATLAB

۲۲۵	ویژگی‌های کلی
۲۲۵	شروع برنامه
۲۲۶	چیدمان صفحه
۲۲۶	توقف/ بستن برنامه
۲۲۶	m-file ها
۲۲۶	فضای کاری و انتقال اطلاعات
۲۲۷	دستور 'Global'
۲۲۷	ابزارهای نمایش
۲۲۸	یافتن خطاها در MATLAB
۲۲۸	اشکال‌زدایی برنامه
۲۲۹	ورود/ خروج
۲۳۰	حلقه‌ها
۲۳۰	عبارات شرطی
۲۳۱	محاسبه‌ی زمان
۲۳۱	ماتریس‌ها
۲۳۱	ضرب ماتریس
۲۳۲	محاسبات درایه به درایه
۲۳۲	مقادیر ویژه یک ماتریس
۲۳۲	محاسبه انتگرال
۲۳۳	حل معادلات جبری با 'fsolve'
۲۳۳	حل معادلات جبری با 'fzero' یا 'fminsearch'
۲۳۳	حل معادلات دیفرانسیل معمولی از نوع مسائل مقدار اولیه
۲۳۵	فهرست تطبیقی برای استفاده از ode45 و سایر توابع انتگرال‌گیری
۲۳۵	درون‌یابی اسپلاین

۲۳۶	درون‌یابی داده‌ها، تعیین مقدار چند جمله‌ای و رسم نتایج
۲۳۶	ترسیم
۲۳۶	ترسیم نتایج حاصل از حل معادلات دیفرانسیل جزئی با استفاده از روش خطوط
۲۳۷	نمودارهای ساده
۲۳۷	افزودن داده به نمودار موجود
۲۳۷	تغییر شکل نمودار
۲۳۸	نمودار چندگانه
۲۳۸	نمودارهای سه بعدی
۲۳۹	نمودارهای پیچیده‌تر
۲۳۹	استفاده از حروف و علائم یونانی در متن
۲۳۹	راهنمای MATLAB
۲۴۰	موارد به کارگیری MATLAB

فصل بیست و یک: تکنیکی در استفاده از Aspen Plus

۲۴۱	معرفی اجمالی
۲۴۱	شروع
۲۴۲	Setup
۲۴۳	کتابخانه‌ی مدل
۲۴۳	قرار دادن واحدها در فلو شیت
۲۴۳	اتصال واحدها با جریان‌ها
۲۴۴	ورود داده‌ها
۲۴۴	تعیین اجزاء
۲۴۴	تعیین خواص
۲۴۵	تعیین جریان‌های ورودی
۲۴۵	تعیین پارامترهای بلوک
۲۴۵	اجرای مسأله
۲۴۷	بررسی جدول جریان‌ها
۲۴۷	بررسی نتایج
۲۴۸	انتقال فلو شیت و موازنه‌ی جرم و انرژی به یک برنامه‌ی ویرایشگر متن
۲۴۸	تغییر شرایط
۲۴۸	آماده سازی گزارش
۲۴۹	ذخیره‌ی نتایج
۲۴۹	راهنمای Aspen Plus
۲۴۹	موارد به کارگیری Aspen Plus

فصل بیست و دو: تکنیکی در استفاده از FEMLAB

۲۵۱	تکنیک‌های اصلی در FEMLAB
۲۵۱	پنجره‌ی آغازین
۲۵۲	معادلات
۲۵۳	ترسیم
۲۵۳	مش
۲۵۵	تنظیمات زیردامنه

۲۵۵	تنظیمات مرزی
۲۵۷	حل
۲۵۸	متوی Postprocessing
۲۵۸	نمودارهای سطح
۲۵۸	نمودارهای هم‌تراز
۲۵۹	نمودارهای سطح مقطع
۲۶۰	نمودارهای مرزی
۲۶۲	انتگرال‌ها
۲۶۳	امکانات پیشرفته
۲۶۳	Model Navigator
۲۶۳	مرزهای داخلی
۲۶۶	عبارات
۲۶۶	متغیرهای اتصال‌دهنده و هندسه‌های افزوده
۲۶۹	موارد به کارگیری FEMLAB

۳۷۱

ضمیمه‌ی ۳: انتخابی پیکان‌نویسی

۲۷۱	فرمول‌بندی ریاضی
۲۷۲	خط مستقیم
۲۷۲	برازش خط مستقیم با Excel
۲۷۳	رسم خط روند
۲۷۳	برازش خط مستقیم با MATLAB
۲۷۴	رگرسیون چندجمله‌ای
۲۷۵	برازش چند جمله‌ای با Excel
۲۷۵	رگرسیون چندجمله‌ای با MATLAB
۲۷۶	رگرسیون چندگانه با Excel
۲۸۰	رگرسیون غیر خطی
۲۸۱	رگرسیون غیر خطی با Excel
۲۸۲	رگرسیون غیر خطی با MATLAB

۳۸۵

ضمیمه‌ی ۴: روش‌های عددی و تحلیلی

۲۸۵	معادلات جبری
۲۸۵	جانشینی متوالی
۲۸۵	نیوتون-رافسون
۲۸۷	معادلات دیفرانسیل معمولی به صورت مسائل مقدار اولیه
۲۸۷	روش اولر
۲۸۸	روش‌های رانگ کاتا
۲۸۹	معادلات دیفرانسیل معمولی به صورت مسائل مقدار مرزی
۲۹۰	روش تفاضل محدود
۲۹۱	روش المان محدود
۲۹۳	روش‌های مقدار اولیه
۲۹۳	روش تفاضل محدود در Excel
۲۹۴	معادلات دیفرانسیل پارامی وابسته به زمان و تک بعدی
۲۹۶	معادلات دیفرانسیلی پارامی در دو بعد فضایی

روش تفاضل محدود برای معادلات بیضوی
خلاصه

۲۹۷

۲۹۸

مراجع

۲۹۹

پیش‌گفتار مؤلف:

مسائلی که حل آن‌ها از دانشجویان مهندسی شیمی و مهندسان شیمی انتظار می‌رود و در پالایشگاه‌ها، پیل‌های سوختی، ریزراکتورها یا کارخانه‌های داروسازی کاربرد دارند، در حال پیچیده‌تر شدن می‌باشند. سال‌ها پیش، دانشجویان برنامه‌های خود را با زبان برنامه‌نویسی FORTRAN می‌نوشتند و سپس به زبانی مثل MATLAB رو آوردند. اما با توسعه‌ی رایانه‌های شخصی، نرم‌افزارهایی نوشته شد که بسیاری از مسائل را برای دانشجویان حل می‌کند ولی با این شرط که از برنامه به درستی استفاده گردد. بنابراین افراد کمی که علاقمند به نوشتن برنامه‌های خودشان بودند به دانشجویان کثیری بدل گردیدند که از برنامه‌ها استفاده می‌کنند، اما به نوشتن آن‌ها مبادرت نمی‌ورزند. من در طول ۳۸ سال تدریس در دانشگاه واشنگتن به آن گروه از دانشجویان کم تعداد آموختم که چگونه از آنالیز عددی برای حل مسائل پیچیده استفاده کنند. در حال حاضر من به همه‌ی دانشجویانم می‌آموزم که چگونه به درستی از رایانه استفاده کنند. فقط تعداد قلیلی از دانشجویانم علاقمند به آنالیز عددی هستند (متأسفانه!) اما همه‌ی دانشجویان آگاهند که باید قادر به حل مسائل سخت باشند و برای انجام آن‌ها مجبور به استفاده از رایانه هستند.

اهداف این کتاب تبیین این موارد است: (الف) مسائلی که مهندسان شیمی باید حل کنند، (ب) نوع برنامه‌ی رایانه‌ای که برای حل آن‌ها به کار می‌رود و (ج) چگونه مهندسان صحت حل مسائل را بررسی می‌کنند. این کار با توجه به این موضوع که یادگیری دانشجویان امروزی بر مبنای خواندن کم، آموختن درست به موقع و استفاده زیاد از رایانه می‌باشد صورت گرفته است. برنامه‌های شرح داده شده در این کتاب شامل Excel، MATLAB، Aspen Plus و FEMLAB می‌باشند.

در طی نوشتن این کتاب، فرضم بر این بود که خوانندگان افراد مبتدی نیستند. دانشجویان مهندسی شیمی سال سوم و چهارم، تجربه‌ی کار با برنامه‌های صفحه گسترده مانند Excel را دارند و می‌توان این برنامه‌ها را در صورت وجود راهنمایی و بیان نکات کلیدی به راحتی در کنار رایانه فراگرفت. در حقیقت، خیلی از دانشجویان فهم بیشتری از رایانه نسبت به استادان خویش دارند، اما یک دانشجوی مبتدی مهندس شیمی ممکن است برنامه‌ی کاربردی را خیلی خوب نداند و به درک عمیقی از پدیده‌های فیزیکی که در پس یک مسأله نهفته است، نرسیده باشد. بنابراین باید توضیح داد که چرا دانشجویان باید برخی مسائل را حل کنند، من از تجربه‌ی خود برای روشن‌تر کردن مسائل این کتاب بهره گرفته‌ام.

فلسفه‌ی تدریس من بدین قرار است که مسائلی که امروزه مهندسان با آن روبرو هستند، معمولاً با روش‌های تحلیلی قابل حل نیستند، اما با استفاده از نرم‌افزارهای حرفه‌ای که امروزه در دسترسند می‌توان به حل آن‌ها مبادرت ورزید. بنابراین هر مهندس مسأله‌ای را حل خواهد کرد که هیچ کس جواب آن را نمی‌داند و این وظیفه مهندس است که از بیان صحیح مسأله بر روی کاغذ و در رایانه و حل صحیح آن اطمینان حاصل کند. دانشجویان مهندسی باید با تعیین درستی کار انجام شده توسط رایانه چگونگی اطمینان از حل صحیح مسأله را بدانند. اگر آن‌ها بتوانند این کار را انجام دهند، می‌توانند استاد و یا رئیس آینده خود را متقاعد کنند که جوابی در اختیار دارند که تقریباً مثل حل تحلیلی موثق است با اینکه به شکل تحلیلی نیست و جواب مسأله‌ای می‌باشد که به صورت تحلیلی قابل حل نخواهد بود.

چگونگی به کارگیری این کتاب در تدریس

این کتاب ثمره‌ی واحدی است که در دانشگاه واشنگتن ابتدا در زمستان ۲۰۰۳ ارائه نمودم. نظر خواهی دانشکده از دانشجویان روشن ساخت که آنان به کمک بیشتری در هنگام کار با رایانه برای حل تکالیف مهندسی شیمی نیازمندند. گرچه دانشجویان واحدی در ارتباط با علوم رایانه‌ای اخذ می‌کردند، اما معتقد بودند با دروس مهندسی آن‌ها ارتباط ندارد. درسی اختیاری برای دانشجویان سال سوم ارائه کردم که آن‌ها را با برنامه‌های رایانه‌ای که در تحصیل خود مورد استفاده قرار می‌دهند آشنا کند. نام این درس "مهارت‌های رایانه‌ای مهندسی شیمی" است و به همراه درس در کلاس، کار عملی در مرکز رایانه نیز مورد نیاز می‌باشد. هر سال نام‌نویسی بیشتر شد و در سال ۲۰۰۵ هفتاد درصد از دانشجویان سال سوم این درس را اخذ کردند.

روش تدریس بدین گونه بوده است که در کلاس به تشریح مسأله و تبیین حل آن با استفاده از برنامه‌های رایانه‌ای می‌پردازم و سپس به مرکز رایانه رفته و هر دو دانشجو با حضور افراد کمک کننده به حل همان مسأله تشریح شده می‌پردازند. در نهایت دانشجویان به تنهایی به حل مسأله‌ای سخت‌تر با استفاده از روش‌های مشابه مبادرت می‌ورزند که به عنوان نمره‌ی تکلیف خانه محسوب می‌گردد. همه تکالیف خانگی باید صحیح باشند، در غیر این صورت فقط یک بار اجازه‌ی تصحیح وجود خواهد داشت. درس حاضر به صورت "نمره/عدم نمره" تدریس می‌شود و نمره در صورت تکمیل صحیح هشتاد درصد تکالیف داده خواهد شد. فقط ده جلسه پنجاه دقیقه‌ای در کلاس و ده جلسه در مرکز رایانه در یک ترم ده هفته‌ای مورد نیاز می‌باشد. از آنجایی که مطالب موجود اغلب موضوعات مهندسی شیمی را در برمی‌گیرند، به شوخی در کلاس می‌گویم: "من همه‌ی رشته مهندسی شیمی را در بیست ساعت به شما درس می‌دهم."

این کتاب را در دوره‌ی آموزشی طولانی‌تری نیز می‌توان تدریس کرد. پس از حل مسائل ساده توسط دانشجویان، به سادگی می‌توان مسائل را با دخیل کردن دروس دیگر و تغییراتی که مورد تأکید استاد می‌باشد پیچیده‌تر کرد. نمونه‌هایی از چنین مسائلی در انتهای هر فصل آمده، به گونه‌ای که مسائل ساده و نیز سخت در آن‌ها گنجانده شده است. راه دیگری که برای استفاده از این کتاب وجود دارد، بدین ترتیب است که در دروس مختلف به کار گرفته شود. به عنوان مثال پس از تدریس تعادل واکنش شیمیایی در درس ترمودینامیک استادان می‌توانند با برگزاری یک جلسه در مرکز رایانه با به کارگیری فصل مربوط به تعادل واکنش شیمیایی در این کتاب به آموزش کاربردهای رایانه در این مورد بپردازند. سایر فصول را می‌توان در دروس دیگر به کار گرفت. به این طریق دانشجویان از این کتاب در کل طول تحصیل استفاده خواهند کرد. امید است پس از آن دانشجویان قادر به تمرکز بیشتر بر اصول مهندسی شیمی و به کارگیری رایانه به عنوان یک ابزار باشند.

در این کتاب به ویژگی‌های چهار نرم‌افزار پرداخته شده است. ممکن است در دانشگاه شما همه این نرم‌افزارها نصب نشده باشند. گرچه اشکال ظاهری ممکن است متفاوت باشند، اما معانی و طرق حل مشابه می‌باشند و مسلماً مسائل را با دیگر برنامه‌ها نیز می‌توان حل کرد. در محیط کار، مهندسان با آنچه شرکتشان مهیا نموده است کار می‌کنند، بنابراین به دلیل در دسترس بودن نرم‌افزار ضعیف‌تر مجبور به استفاده از آن می‌گردند. نرم‌افزارهای قوی‌تر معمولاً گران‌تر هستند، بدین دلیل در چند فصل یک مسأله با بیش از یک برنامه حل شده است تا دانشجویان درک کنند برنامه‌هایی که امکانات افزون‌تری ارائه می‌دهند نیاز به برنامه‌نویسی بیشتری برای حل مسائل پیچیده‌تر دارند. بر طبق تجربه من در صورت وجود برنامه‌هایی که ارتباط نزدیکی به هم داشته باشند، دانشجویان از برنامه‌ای استفاده می‌کنند که مسأله‌ی آن‌ها را سریع‌تر حل می‌کند.