

化工工程师继续教育电视讲座系列教材

化 学 工 程

(二)

中国化工学会教育工作委员会组织编写



化学工业出版社

TQ02
27
3:2

化工工程师继续教育

电视讲座系列教材

化 学 工 程

(二)

中国化工学会教育工作委员会组织编写

化学工业出版社

513546

内 容 提 要

本书是化工工程师继续教育电视讲座的配套教材之二。在第一册所介绍的化工热力学、反应工程、分离工程等化工基础理论之后,本书将侧重于化工过程的开发和应用知识。全书包括化工系统的模拟分析与综合、化工流程的模型化和模拟计算、化工系统优化、化学化工数据库、化工新技术开发及其管理、技术经济评价等六部分。与第一册的基础理论相比,本书内容将更加突出先进性、实用性和可自学性等工程师继续教育的特点。

本书主要是针对八八年、八九年间的电视讲座而安排编写的,可供收看有关节目和录像的科研、设计、生产和教学等岗位的工程技术人员作为学习的配套教材,也可作为化工、炼油、轻工、冶金、防化等专业的学生们加深理解专业知识,拓宽知识面的学习资料。

化工工程师继续教育 电视讲座系列教材 化 学 工 程 (二)

中国化工学会教育工作委员会组织编写

责任编辑:徐世峰

封面设计:许立

*

化学工业出版社出版发行

(北京和平里七区十六号楼)

化学工业出版社印刷厂印刷

*

开本 $850 \times 1168^{1/32}$ 印张 $12^{1/2}$ 字数330千字
1988年8月第1版 1988年8月北京第1次印刷

印 数 1—20000

ISBN 7-5025-0349-8/TP·8

定 价4.50元

前 言

《化工工程师继续教育电视讲座系列教材》是中国科协、化学工业部、石油化工总公司、化工学会和中央电大共同举办的继续教育电视专题的配套教材，由中国化工学会教育工作委员会组织国内教授、专家共同编写。

化工工程师继续教育是适应新科学技术革命发展需要，从广义化工概念出发，面向所有化工行业的工程技术人员，对他们进行以新理论、新技术、新方法为主要内容的大学后教育。通过学习，增长知识，诱发创造力，提高工程技术人员素质，使知识转化为技术，形成生产力，从而提高生产、科技、管理水平，增强企业活力，建设现代化的化学工业。

本讲座为化学工程学科，计划约90学时，分两次讲完。《化学工程》（一）包括化工热力学、反应工程、分离工程三部分。《化学工程》（二）为系统工程与过程开发，占60学时。考虑到教学内容的整体性、系统性和科学性，先讲基础理论和进展，后讲过程应用和开发。讲述内容着眼于发展远景，立足于现实需要；强调理论结合实际，学以致用；力求体现先进性（反映学科的现代水平）。实用性（以应用为主）、自学性（便于读者自学），以利开阔思路指导工作。

本讲座各课程主持人为：

〈化工系统的模拟、分析与综合〉：

杨友麒（化工部计算中心，高级工程师）

〈化工流程的模型化和模拟计算〉：

麻德贤（北京化工学院，教授）

〈化工系统优化〉：

陈丙珍、沈静珠（清华大学，教授）

〈化学化工数据库〉：

许志宏 (中国科学院化工冶金研究所, 研究员)

〈化工技术开发及其管理〉:

蒋楚生 (化工部科技局, 高级工程师)

〈技术经济评价〉:

成思危 (化工部科技局, 高级工程师)

我们对组织编写电视讲座教材还缺少经验, 殷切希望各界读者提出宝贵意见, 不断改进, 为提高我国化工工程师水平做出贡献。

中国化工学会教育工作委员会

一九八八年一月

目 录

第一部分 化工系统的模拟分析与综合

第一章 概论	1
第一节 化工系统工程发展的背景及沿革	1
一、从机械时代向系统时代过渡	1
二、化工系统工程学的领域	3
第二节 化工系统的分析、综合与优化的概念	5
一、分析与综合	5
二、系统的优化	6
第三节 进行数学模拟的必要性和优越性	8
一、过程开发中的数学模拟方法	8
二、化工设计中的数学模拟方法	11
三、改进化工厂生产操作的数学模拟方法	12
四、在过程控制中的数学模型	13
第四节 数学模拟的一般方法	15
一、数学模型化的步骤	15
二、数学模型的类型	17
三、数学模拟的手段——计算机系统	19
第二章 化工系统的稳态模拟方法	24
第一节 建立简单再循环系统的稳态模拟模型的例子	24
一、原始数据及假设	25
二、要求的解答	26
三、单元模块的数学模型	27
第二节 模拟问题的实质	30
一、过程各流股的本质	30
二、处理物料的本质	31
三、过程单元的本质	32

四、过程构型	33
五、进料流股	34
第三节 三种类型的流程模拟	34
一、标准流程模拟问题	35
二、设计型模拟问题	35
三、流程的模拟优化问题	36
第四节 序贯模块法的模拟与优化	37
一、序贯模块解法例题	37
二、分隔、断裂与加速收敛	39
三、参数的优化方法	40
第五节 联立方程法的模拟与优化	45
一、联立方程法的本质	45
二、联立方程法的优缺点	47
第六节 双层法模拟与优化	48
第七节 化工流程系统模拟分析软件	51
一、流程模拟软件的结构	52
二、流程模拟计算的深度	53
三、常用的著名流程模拟软件	56
第三章 化工系统的综合	57
第一节 化工系统综合的基本概念和方法	57
一、概念	57
二、综合的步骤	58
三、系统综合研究的几个主要方面	59
四、系统综合的基本方法	65
第二节 分离系统的综合	68
一、分离系统综合中的直观推断法则	68
二、有序直观推断法进行分离系统的综合	76
第三节 能量回收网络的综合	80
一、 TH 图与组合曲线	81
二、挟点及最小公用工程消耗	82
三、最大能量回收网络的设计	85
参考文献	93

第二部分 化工流程的模型化和模拟计算

第一章 化工流程模拟系统的组成和作用	95
第一节 化工流程模拟系统的组成	96
一、结构单元模块库	96
二、物性数据库及物性估算模块库	96
三、执行程序模块库	97
第二节 化工流程模拟系统的作用	98
第二章 化工流程结构的模型化	99
第一节 有向图	100
第二节 结构矩阵	101
一、相邻矩阵	101
二、关系矩阵	103
第三节 结构表	105
一、联结表	105
二、顺序表	106
第四节 联结方程	107
第三章 流程结构中不可分隔子系统的识别	109
第一节 不可分隔子系统	109
第二节 识别不可分隔子系统的矩阵法	110
一、相邻矩阵法	111
二、可及矩阵法	113
第三节 识别不可分割子系统的联结表法	120
一、相邻矩阵通路搜索法	124
二、有向图通路搜索法	126
第四章 流程回路的断裂与收敛	128
第一节 回路物流的断裂	128
第二节 断裂物流的收敛	131
一、直接迭代法	132
二、韦格斯坦法	133
三、布劳伊登法	137
第五章 流程模拟系统的决策变量	138

第一节 流程模拟系统的变量	138
第二节 自由度分析	139
第三节 决策变量的选择	143
一、拓朴双层图	143
二、选择决策变量的算法	145
三、决策变量的优先选择	147
参考文献	148

第三部分 化工系统优化

第一章 化工系统优化的意义及基本方法	149
第一节 化工系统优化在生产中的应用实例	149
一、企业的规划及资源的最优分配	149
二、过程系统的综合与优化设计	150
三、现有装置的参数调优与控制	152
第二节 化工系统优化的主要步骤	153
一、确定系统	154
二、建立系统的优化模型	154
三、进行优化计算	157
四、系统的灵敏度分析	158
五、实施和评价	159
第二章 企业规划及资源的最优分配问题——线性规划	160
第一节 线性规划问题的数学模型	160
第二节 线性规划的几何解释	163
第三节 单纯形法求解线性规划	166
第四节 灵敏度分析	175
第五节 线性规划软件的结构及应用实例	178
第三章 化工系统的优化计算——非线性规划	184
第一节 单级系统的优化方法——拉格朗日乘子法	184
一、单级系统的优化模型	184
二、拉格朗日乘子法	185
三、简单的算例及说明	187
第二节 串联多级系统的优化方法	191
一、串联多级系统的优化模型	191

二、串联多级系统的优化计算	192
三、应用举例	194
四、数值解法	195
第三节 搜索方法	198
一、一维搜索	198
二、搜索方向的确定	201
第四章 大系统优化	212
第一节 概述	212
一、大系统的优化模型	212
二、系统优化方法的分类	213
三、SQP与GRG法	215
第二节 可行路径法	218
一、直接搜索法	218
二、梯度搜索法	219
第三节 不可行路径法及其衍变	221
一、IPOSEQ法	221
二、CFV及RFV法	224
三、有关算法的几点讨论	226
第四节 计算实例——炼油厂常减压装置的调优计算	228
一、炼油厂常减压装置的流程系统	228
二、调优的目标函数	228
三、决策变量	229
四、约束条件	229
五、优化模型	230
六、优化计算结果及讨论	230
参考文献	233

第四部分 化学化工数据库

第一章 概论	234
第一节 数据及数据库	234
第二节 化学化工中的数据库	237
第三节 管理型数据库	239
一、三种基本的数据模型	239

二、关键步骤	240
第四节 建立化学化工数据库中的问题	241
本章参考文献	243
第二章 基本有机化合物性质数据库	244
第一节 概况及范围	244
第二节 基本有机物性数据库包括哪些性质	245
第三节 科学类型数据库的复杂性	248
第四节 基本结构和功能	251
第五节 应用举例	253
第六节 进一步的工作	255
本章参考文献	256
第三章 无机方面数据库简介	258
第一节 无机热化学数据库	258
一、概述	258
二、优势区相图	259
三、复杂体系化学平衡计算	263
四、应用举例	270
第二节 水溶液热力学数据库	273
一、概述	273
二、基本公式与程序系统	274
三、应用举例	278
第三节 材料数据库的构筑	279
一、概述	279
二、材料数据库的发展趋势	280
本章参考文献	281
第四章 其它化学类数据库简介	282
第一节 质谱数据库	282
第二节 红外谱数据库	286
第三节 化学物质毒性数据库	288
本章参考文献	289
第五章 管理型数据库	290
第一节 开发策略	290
一、TPS—MIS—DSS	290

二、信息系统中的用户	291
三、管理信息系统对管理组织的影响	292
第二节 微机上的管理型数据库	293
本章参考文献	295
第六章 文献、情报类数据库	296
第一节 概述	296
第二节 中国化学文献数据库	299
本章参考文献	302
第七章 数据库的发展	303
第一节 面向问题	303
第二节 与各类模拟系统程序的联系	304
第三节 动态数据采集和处理	306
第四节 事实库或知识库的兴起	307
第五节 计算机绘图	308
第六节 数据库的网络和服务	310
第七节 数据中心及数据库	313
第八节 人工智能化的发展	314
第九节 发展数据库的措施	316
本章参考文献	317

第五部分 化工新技术开发及其管理

第一章 前言	318
第二章 化工新技术开发的范围	320
第一节 开发基础研究	320
第二节 过程研究	320
第三节 工程研究	321
第三章 化工新技术开发的程序	323
第一节 课题选择	323
第二节 初步评价	323
第三节 开发基础研究	324
第四节 中间评价及概念设计	324
第五节 过程研究	324

第六节 最终评价及基础设计	325
第七节 电子计算机应用	325
第八节 产品应用研究及市场开发研究	325
第四章 概念设计	326
第五章 基础设计	328
第六章 工艺软件包	330
第七章 实例分析之一——甲基叔丁基醚法分离	332
第一节 碳四的技术开发概况	332
第二节 技术开发过程的特点	333
第三节 技术路线的比较及原则流程的确定	333
第四节 开发基础研究	335
一、催化剂的研究	335
二、醚化反应规律的研究	335
三、相平衡数据的测定	336
四、反应动力学方程的建立和用序贯法对其参数进行精估	336
第五节 工程研究	338
一、概念设计	338
二、反应器数学模型的建立和计算机模拟计算	338
第六节 过程研究	339
第七节 基础设计	340
第八节 结语	340
第八章 实例分析之二——农药“百菌清”的技术开发	341
第一节 概况	341
第二节 技术开发的关键内容	342
一、催化剂研究	342
二、复合床反应器开发研究	344
第三节 结语	345
第九章 计划管理	346
第一节 计划管理的执行过程	346
第二节 实例——“三丙”技术开发	346
第三节 计划评审技术 (PERT)	347
第十章 组织管理	349
第一节 技术开发的组织形式	349

第二节	实例——苯酐生产中热熔冷凝箱的开发	349
第十一章	成果鉴定及奖惩办法	352
第一节	成果鉴定及推广	352
第二节	奖惩办法	352
第十二章	开发与研究的重点注意事项	354
参考文献		354

第六部分 技术经济评价

第一章	绪论	356
第一节	什么是技术经济评价	356
第二节	为什么要进行技术经济评价	356
第三节	技术经济评价的主要步骤及指标体系	357
第四节	化工研究及开发项目的技术经济评价的主要类型	358
一、	开题评价	358
二、	中间评价	358
三、	工业化评价	358
第二章	市场调查及预测	360
第一节	市场调查及预测的意义和作用	360
第二节	市场容量	360
第三节	增长潜力	361
一、	经验判断法	361
二、	趋势外推法	362
三、	类比推断法	362
四、	相关分析法	362
五、	消费比重法	362
六、	消费系数法	363
第四节	竞争能力	363
第五节	市场机会的综合评价	365
第六节	预定开发规模的确定	366
第三章	技术分析与评价	367
第一节	技术分析与评价的意义及作用	367
第二节	技术分析的主要内容	367

第三节	技术先进性	368
第四节	技术适用性	369
第五节	技术可靠性	370
第四章	投资估算	371
第一节	投资估算的意义及作用	371
第二节	投资估算的类型及准确度	371
第三节	类比估算法	372
第四节	单因子估算法	373
第五节	操作单元法	373
第六节	系数法	374
第七节	模块法	375
第五章	成本估算	377
第一节	成本估算的意义及作用	377
第二节	与原材料及动力有关的费用	377
第三节	与劳务有关的费用	378
第四节	与资金有关的费用	378
第六章	经济效益预测	380
第一节	经济效益预测的意义及作用	380
第二节	赢利能力的衡量方法	380
第三节	投资回收期	381
第四节	净现值	381
第五节	内部收益率	382
第六节	效益——成本比	383
符号一览表		385
参考文献		387

第一部分 化工系统的模拟分析与综合

杨 友 麒

第一章 概 论

化工系统工程的基本内容是系统的分析与综合，这当中必然用到最优化方法。要进行系统的分析与综合，就必须建立系统的数学模型，用电子计算机来进行系统性能的数学模拟，所以系统的数学模拟又是其最基础的方法，而电子计算机则是最基本的工具。

第一节 化工系统工程发展的背景及沿革

一、从机械时代向系统时代过渡

在四十年代以前，人类认识世界的思维方法主要受简化论及机械论的制约。简化论教人们将研究对象分解成其组成部分，然后研究各个组成部分的性能，最后，将各个独立组成部分的解释集成在一起就成为总体的解释。机械论则认为：一切现象均可以用一个最终的因果关系来解释。在这种思想指导下，各种科学向分析的纵深发展，学科不断分化和专门化。

到四十年代后期，科学的综合化发展趋势日益明显，综合科学和横向科学不断出现，人们要求从事物的整体和各部分，各层次之间的联系方面去认识世界，从而从机械时代进入系统时代。

化学工程学的发展也证实了上述的发展规律，众所周知，把各种各类的化学生产视为由一些共同的“单元操作”所组成，这一认识上的飞跃奠定了化学工程学的基础。后来，到了五十年代，深入研究各种“单元操作”的结果，发现他们又是由一些更为基本的能量传递、质量传递规律所制约。这种认识上的另一次飞跃产生了“传递过程”

这一新的学科分支。与此同时，“化学反应工程”及“过程控制”等分支也相应发展起来。这些发展都是在学科分化和解析深化的总发展趋势背景下进行的。

然而，现代化的化学工业生产发展对科学技术提出了新的要求，这些要求可归结为：

1. 现代化的化工企业向综合化方向发展，流程结构日益复杂。为了原料的有效利用，采用各种再循环方式；为了副产品的有效利用，普遍形成联合企业。这种综合性联合企业的合理计划和设计，就不能把单个装置或车间孤立起来考虑，必须当成整体系统来研究。

2. 企业规模日趋大型化。这对设计和操作的要求都更高了，因为是否达到最优化，不仅投资出入可观，而且将来生产操作成本也大不相同。因此，对设计、操作乃至控制的最优化要求更为迫切。

3. 新产品迅速发展与工业放大技术落后的矛盾尖锐。这样就要求改革老式的相似模拟和逐级放大方法，转而采用数学模拟放大技术。

4. 能源危机之后，为了节能，装置的集成度大为提高，设备的操作条件愈来愈苛刻。这就对过程的自动化控制提出了更高的要求，必须把相互联接的对象当成一个整体来进行研究，乃至用电子计算机根据数学模型进行系统优化控制。

系统工程的发展为解决上述问题提供了可能。在四十年代美国贝尔电话公司研究所在研究大规模通讯网络时已痛感有发展新的系统工程方法的必要。到二次世界大战以后，美国麻省理工学院G.W.Gillman设计中继系统时发展了系统方法，1954年正式开设系统工程课程。1957年H. Goode和R. E. Machol出版了第一本“系统工程”著作^[1]。

另一门横断科学——控制论，作为一门研究感受、存贮、传递和加工以控制为目的的讯息的学问，二次大战后也迅速地发展并运用于化工过程。

运筹学方法在第二次世界大战中首先在军事应用中发展起来，在战后这种方法被应用于工业生产。这门横断科学的发展为化工系统的最优化提供了许多有效的方法。