

过程工程

物质·能源·智慧

中国科学院过程工程研究所 组编

郭慕孙 顾问

李洪钟 主编



科学出版社

内 容 简 介

过程工程作为一门新兴的交叉学科引起了国内外学术界的关注。它的研究与服务对象涵盖了化工、冶金、材料、生物、能源、资源、环境等诸多工程领域。它的基础理论、技术和方法也在原化学工程理论的基础上增加了许多创新的内涵。本书组织国内外知名的过程工程专家和学者撰写,力求综合反映当今过程工程学科的发展现状与水平,希望能告诉读者什么是过程工程,过程工程的研究与服务对象是什么,它有什么基础理论和方法等。

本书分为基础篇和专业篇,共26章,涵盖内容广泛,理论与应用并重。基础篇就过程工程的学科定位、共性基础理论、新概念、新方法、发展现状和展望等进行论述;专业篇阐明若干具体专业的新工艺、新过程、新方法。

本书可供与过程工程和过程工业有关的科技工作者、高等学校的教师和学生、政府和企业的管理人员阅读与参考。

图书在版编目(CIP)数据

过程工程:物质·能源·智慧/中国科学院过程工程研究所组编;李洪钟主编. —北京:科学出版社,2010

ISBN 978-7-03-029379-4

I. ①过… II. ①中… ②李… III. ①化工过程—研究 IV. ①TQ02

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2010) 第 210749 号

责任编辑:杨震 周强 刘冉/责任校对:包志虹

责任印制:钱玉芬/封面设计:陈敬

科 学 出 版 社 出 版

北京东黄城根北街16号

邮政编码 100717

<http://www.sciencep.com>

双清印刷厂印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

2010年11月第 一 版 开本:B5 (720×1000)

2010年11月第一次印刷 印张:46 1/2

印数:1—2 500 字数:912 000

定价:138.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换)

各章编写人员

基础篇

- 1 多尺度方法与过程模拟——回顾多尺度方法, 展望虚拟过程工程
李静海 葛蔚 王维 杨宁 张家元 何京东 (中国科学院过程工程研究所)
- 2 传递基础
毛在砂 (中国科学院过程工程研究所)
- 3 化学反应工程概论
杨超 程景才 程荡 (中国科学院过程工程研究所)
- 4 多相流结构与传递及其调控
李洪钟 (中国科学院过程工程研究所)
- 5 微化学工程与技术
陈光文 赵玉潮 袁权 (中国科学院大连化学物理研究所)
- 6 分离过程工程前沿
刘会洲 (中国科学院过程工程研究所)
- 7 精馏传质分离过程
袁希刚 (天津大学)
- 8 离子液体科学与工程基础
张锁江 赵国英 周青 董坤 刘晓敏 孙剑 董海峰 (中国科学院过程工程研究所)
- 9 复杂流体分子热力学
刘洪来 彭昌军 胡英 (华东理工大学)
- 10 多相流动的数值模拟——离散单元法及其在炼铁高炉中的应用
周宗彦 余艾冰 (澳大利亚新南威尔士大学)
- 11 反应粉碎过程原理及应用
沈佳妮 陈黎明 马紫峰 (上海交通大学)
- 12 专业数据和计算资源的网络化共享——构建未来虚拟研究环境的基础
李晓霞 袁小龙 夏诏杰 聂峰光 郭力 (中国科学院过程工程研究所)
- 13 计算机辅助化学产品设计
吴昊 温浩 赵月红 (中国科学院过程工程研究所)

- 14 过程系统工程——“两化融合”发展与PSE：挑战和前景
杨友麒（中国化工信息中心）
- 15 过程工业与循环经济——在过程工业中推进循环经济发展
金涌 陈定江（清华大学）

专 业 篇

- 16 石化技术自主创新的崎岖之路
闵恩泽（中国石油化工股份有限公司石油化工科学研究院）
- 17 超重力反应过程强化原理与工业应用
陈建峰 邹海魁 邵磊（北京化工大学）
- 18 铁矿气相还原原理及应用
朱庆山（中国科学院过程工程研究所）
- 19 基于复杂反应过程的材料化工
张伟刚（中国科学院过程工程研究所）
- 20 纳米材料结构调控及过程工程特征
李春忠（华东理工大学）
- 21 功能纳米铁氧化物粉体的合成和应用
宋宝珍 樊红雷 马宝林（中国科学院过程工程研究所）
- 22 生物质原料过程工程
陈洪章 付小果（中国科学院过程工程研究所）
- 23 陶瓷膜的工业化应用研究进展
徐南平 邢卫红 金万勤 范益群（南京工业大学）
- 24 重油梯级分离过程——从概念到工业试验
徐春明 赵锁奇 毛羽 卢春喜 孙学文 陈建义 鄂承林 许志明
鲍晓军（中国石油大学）
- 25 能源过程工程
岑可法 方梦祥 李晓东 王树荣 骆仲泱（浙江大学）
- 26 中药过程工程
刘明言（天津大学）

序

郭慕孙

过程工程的来历

化学工程经过归纳、综合和与其他知识的交叉,形成了以传递和反应为主且还在不断发展的“三传一反+X”的学识基础(见《过程工程学报》2001年01期)。这一学识基础的应用对象已远远超出了化工起家时的化学产品,覆盖了所有物质的物理和化学加工工艺,将化学工程提升至过程工程。过程工程的学识基础将如何扩展成长,21世纪,我们国家又该如何建立过程工程的前沿,将成为今后的热点。(Through induction, integration and cross-disciplinary interaction, chemical engineering has acquired an ever-expanding knowledge base involving transport and reaction as its main contents. The application of this knowledge base has far extended beyond its namesake, the chemical products, to encompass all physical as well as chemical processing, upgrading chemical engineering to the much larger field of process engineering. How to further foster the expansion and growth of this knowledge base of process engineering, and, in facing the challenges of the 21st century, the identification of appropriate frontiers for China, are becoming the foci of attention.)

关于化学工程和过程工程的相同、承继和区别, *Wikipedia* 载有以下两段文字:

Chemical engineering is the branch of engineering that deals with the application of physical science (e. g. chemistry and physics), with mathematics, to the process of converting raw materials or chemicals into more useful or valuable forms.....*Chemical engineers are for the most economical process.*

Process engineering is often a synonym for chemical engineering and focuses on the design, operation and maintenance of chemical and material manufacturing processes.

过程工程的特色

特色1 占我国GDP 1/6: 过程工程作为从事物质的物理、化学、生物转变的工程, 包括以下两类: 全属过程工程, 如石油、化学原料过程工程, 在我国共

13 种；渗入其他行业的过程工程，如烟叶、自来水过程工程，在我国共 14 种，如表 1 所示。两者共占全国 GDP 的 16.6%，高于电子行业，也高于农业。因此研究过程工程具有重大经济价值。

表 1 我国过程工业所包括的范围（史丹）

过程工业（按大行业分）	包含在其他大行业中的过程工业
食品加工业	金属表面处理及热处理业
食品制造业	铸件制造业
造纸及纸制品业	粉末冶金制品业
印刷业	绝缘制品业
石油加工及炼焦业	集成电路制造业（部分生产环节）
化学原料及化学制品业	电子元件制造业（部分生产环节）
医药制造业	烟叶复烤业
化学纤维制造业	纤维原料初步加工业
橡胶制品业	棉纺印染业
塑料制品业	毛染整业
非金属矿物制造业	丝印染业
黑色金属冶炼及压延加工业	火力发电业
有色金属冶金及压延加工业	煤气生产业
	自来水生产业

特色 2 连续运转+内循环：过程工厂一般都连续生产作业，且包含或多或少的内部物质和能量在流程内的循环，以求达到高纯度、高反应转换的产物，同时减少设备投资和生产成本。图 1 为低压空分制氧流程。

特色 3 组织结构：过程工程研究和开发（R&D）的运行包括三段：道（science）、术（technique）和企（industry）。三者相互促进反馈，必须有效管理和领导，同时也表明过程工程的道和术向其他领域的延伸和扩散。所选研究并不一定跨越全进程的全套开发研究，但必须明确其范畴，按畴规划行动。图 2 从一个过程工程师所需的知识和能力和他的活动范围，来阐明过程工程的结构。

特色 4 逐步审核：过程工程研究和开发（R&D）的贯彻和实施必须严格遵循步步执行可行性分析和评估的准则，在最终经济指标不能达标时，必须停工，寻找出路，然后才能继续。可行性分析包括流程的定量计算。从原始想象到创新成功的全流程如图 3 所示。

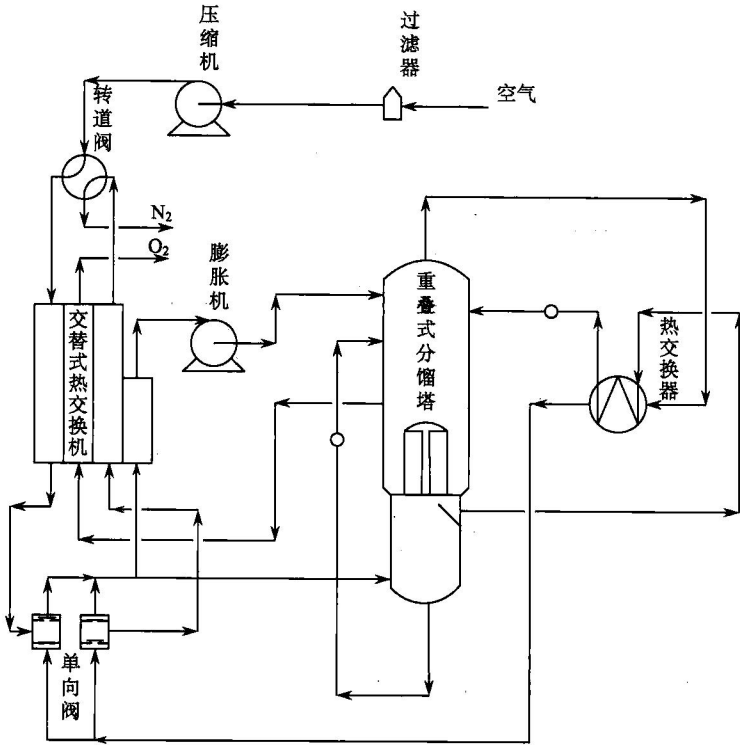


图1 低压空分制氧流程

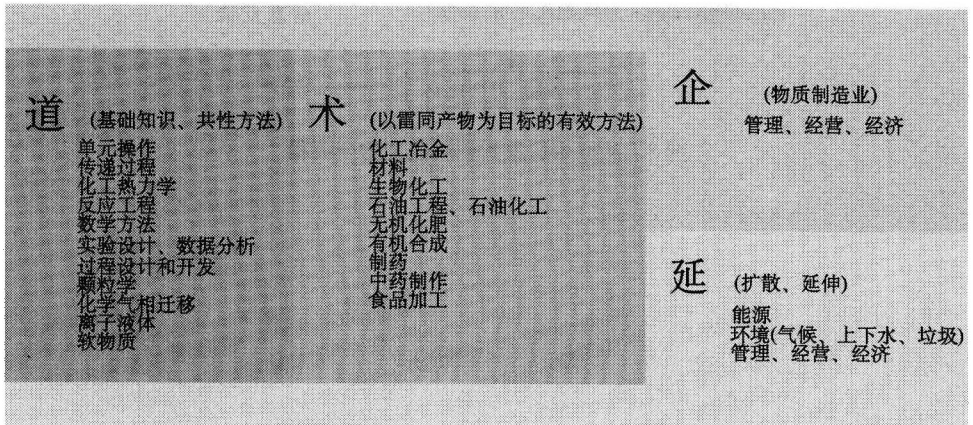


图2 一个过程工程师所需的知识、能力和活动范围

研究或开发：道或（道+术）

管理或经营：道+术+延

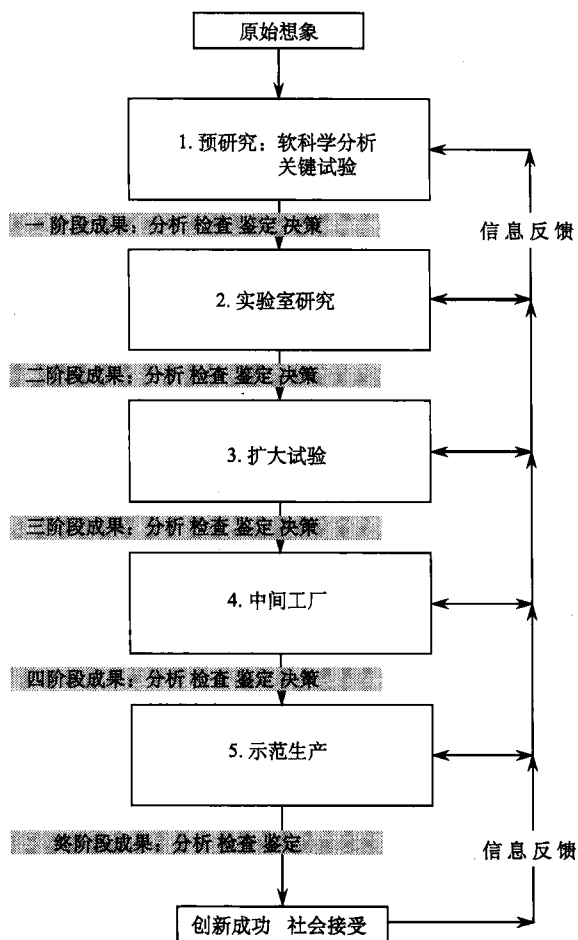


图3 从原始想象到创新成功的全流程

前 言

李洪钟

若以英国人 Davis 于 1901 年撰写的化工手册作为化学工程学科的起点，化学工程作为一个独立学科已有百年的历史。伴随着化学工业的发展，化学工程经历了实践—理论—再实践—再理论，由低级到高级的发展过程。美国麻省理工学院 Walker、Lewis 和 McAdams 三位教授于 1923 年将多年积累的单元操作教材编撰成教科书，这被认为是化学工程发展的第一里程。美国的 Bird 教授等于 1958 年出版的专著 *Notes on Transport Phenomena*，从动量、热量、质量的传递（“三传”）角度研究化学工业生产中的物理变化过程；美国的 Levenspiel 教授于 1957 年出版的专著 *Chemical Reaction Engineering*，将传递过程的原理与具有化学反应的工艺结合，经归类和归纳，又形成一门新的分支化工学科——化学反应工程，与传递原理一起被称为“三传一反”。“三传一反”理论的形成被认为是化学工程发展的第二里程。

化学工程对化学工业的发展起了巨大的推动作用，而化学工业的发展也为化学工程学科不断提出新挑战和新课题，促进了化学工程学科的发展。目前化学工程的服务对象已不限于化学工业，而是扩展到冶金、材料、能源、环境、生物等诸多进行物质与能量转化的过程工业。化学工程学科本身也在不断扩大其科学内涵，向着以更广泛地研究物质和能源在化学、物理和生物转化过程中的运动、传递和反应及其相互关系以及过程的绿色化和集约化为科学内涵的过程工程学科转移。近 20 年来，由于计算机技术、观测测量技术和通信技术的发展，计算化学工程应运而生，结构与界（表）面和多尺度问题受到关注，化工过程的优化调控和模拟放大进展迅速；温室气体效应和环境污染日趋严重，人类生活需求不断提高，要求零排放和不污染、不破坏环境，要求物质的循环使用或全利用，要求能量的节约与优化利用，绿色过程工程、产品工程和系统集成工程得以形成和发展。化学工程学有可能在“三传一反”理论的基础上增加新的科学内涵而转变为过程工程学，成为化学工程发展的第三里程。目前，我国过程工业的产值占工业总产值的二分之一，占工业总税收的三分之一，可见，过程工程学科的发展不仅具有重要的科学意义，而且对国民经济的发展同样起着举足轻重的作用。过程工程学的发展现状如何，它面临的挑战是什么，它的发展趋势又是什么，是值得工程科学界关注的问题。

顺应学科的发展和时代的需求,中国科学院化工冶金研究所于2001年更名为中国科学院过程工程研究所,重点从事过程工程科学与技术的研究,旨在引领过程工程学科前沿,服务国家过程工业的重大需求。2008年,过程工程研究所建所50周年时,举办了“过程工程论坛”,分多次邀请国内外过程工程学科的专家来所作学术报告。郭慕孙先生提议将论坛的演讲编辑成一部专著,另外再邀请一些专家撰稿,使书的内容更丰富、更全面。希望该书能告诉读者什么是过程工程,过程工程研究和涵盖的内容是什么,它的服务对象是什么,它有什么基础理论和方法。可以说,过程工程的基础还是化学工程,其扩展部分为材料、生化、能源、环境、冶金、医药等工程领域。其基本理论还是“三传一反”,但应该是“三传一反”理论的深化与发展,还需增加绿色、环保、节能、减排、循环经济的相关理论与方法。本书定名为“过程工程——物质·能源·智慧”,意指过程工程反映人类智慧对物质能源转化过程的认识和驾驭。撰写的内容分为两类:一类是基础性的,就过程工程的学科定位、共性基础理论、新概念、新方法、发展现状和展望等进行论述,称为基础篇;另一类是专业性的,阐明某一具体专业的新工艺、新过程、新方法,称为专业篇。本书由26章组成,涵盖的内容广泛,理论与应用并重。由于过程工程的学科理论正处于形成与发展阶段,本书暂不追求其理论的系统性。参加本书撰写工作的都是国内外知名的专家和学者,他们的论著代表了当今过程工程学科发展的水平。本书可供与过程工程与过程工业有关的科技工作者、高等学校的教师和学生、政府与企业的管理工作者的阅读与参考。希望本书的出版能对过程工程科学和过程工业的发展做出一点贡献。由于编写时间仓促,错误在所难免,望读者批评指正。

本书由郭慕孙先生发起并亲自编辑,巴敬莉同志负责与撰稿人联系及初稿校对工作。本书出版之际,正逢郭慕孙先生九十华诞,谨以本书作为献给郭慕孙先生90岁生日的礼物。

目 录

序 前言

基 础 篇

1 多尺度方法与过程模拟——回顾多尺度方法, 展望虚拟过程工程	3
1.1 多尺度概念的产生	3
1.2 EMMS 模型的建立	4
1.3 $N_{st} \rightarrow \min$ 假设受到质疑	4
1.4 机制协调概念的深化	5
1.5 Compromise 概念的初步证明	6
1.6 EMMS 工业应用和协调概念的扩展	7
1.7 $N_{st} = \min$ 的证明和极值型多尺度方法的建立	7
1.8 多尺度 CFD (EMMS+CFD) 的发展	8
1.9 新的多尺度并行计算模式的提出和挑战	11
1.10 探索实现虚拟过程的可能性	13
1.11 二十多年来发展极值型多尺度方法的体会	13
参考文献	14
2 传递基础	17
2.1 过程工程体系的特点	17
2.2 传递过程的速率	18
2.2.1 动量传递的牛顿黏性定律	19
2.2.2 热量传递的傅里叶定律	20
2.2.3 质量传递的非克定律	20
2.2.4 传热系数和传质系数	21
2.2.5 传递过程的相似性	23
2.2.6 化学反应速率	24
2.3 动量守恒方程	26
2.3.1 动量守恒方程的积分形式	26
2.3.2 动量守恒方程的微分形式	28
2.3.3 应力本构关系	29

2.3.4	不可压缩流体的 Navier-Stokes 方程	29
2.4	能量守恒方程	30
2.5	传质方程和连续性方程	32
2.5.1	总物料衡算	32
2.5.2	组分质量守恒	34
2.6	传递过程原理的发展	35
2.6.1	湍流中的传递过程	35
2.6.2	多相流中的传递过程	39
2.6.3	场的耦合与协同	43
2.7	研究课题	45
2.7.1	传递过程的推动力	46
2.7.2	相界面的传质过程	47
2.7.3	多相流的湍流模型	48
2.7.4	多元体系传递过程的非线性性质	50
2.7.5	非经典的传递现象	52
	参考文献	56
3	化学反应工程概论	59
3.1	非催化反应工程	59
3.1.1	非催化气-固反应	59
3.1.2	非催化气-液反应	61
3.2	催化反应工程	62
3.2.1	吸附速率和平衡	63
3.2.2	多相催化宏观动力学	63
3.3	反应器的类型	66
3.3.1	气-固和液-固反应器	67
3.3.2	气-液或液-液反应器	69
3.3.3	气-液-固三相反应器和其他复杂多相反应器	71
3.4	反应器的设计及放大	73
3.4.1	反应器的混合	74
3.4.2	反应器内多相传递	79
3.5	结语	81
	参考文献	83
4	多相流结构与传递及其调控	87
4.1	结构问题	87
4.2	多相流结构与传递的关系	90

4.2.1	快速流化床中气-固流动局部不均匀结构的预测——EMMS 模型	91
4.2.2	不均匀结构与曳力系数的关系——动量传递	93
4.2.3	不均匀结构与传质系数的关系——质量传递	96
4.2.4	不均匀结构与传热系数的关系——热量传递	101
4.2.5	关于聚团的并聚与分散对传质、传热影响的理论分析与讨论	108
4.2.6	理论预测与实验数据的对比	109
4.2.7	多相流动和三传一反的计算机模拟前景	111
4.3	多相流动结构的调控——散式化方法	114
4.3.1	床型设计	115
4.3.2	流体设计	119
	参考文献	125
5	微化学工程与技术	129
5.1	引言	129
5.2	微通道内流体流动特性	129
5.2.1	微通道内单相流体流动	129
5.2.2	微通道内多相流体流动	130
5.3	微通道内流体混合与传质特性	137
5.3.1	微通道内液-液互溶两相流体间的混合特性	137
5.3.2	微通道内液-液互不相溶两相流体间的传质特性	139
5.3.3	微通道内气-液两相流体间的传质特性	141
5.3.4	微通道内气-液-液三相流体间的传质特性	143
5.3.5	微通道内液-液-固三相流体间的传质特性	143
5.4	微通道反应器	143
5.4.1	微反应器内的均相反应	144
5.4.2	微反应器内的气-固催化反应	147
5.4.3	微反应器内的气-液两相反应	150
5.4.4	微反应器内的液-液两相反应	152
5.5	结束语	154
	参考文献	155
6	分离过程工程前沿	164
6.1	引言	164
6.2	化工过程中的界面现象	165
6.2.1	从分子结构到微相结构预测	167
6.2.2	化工分离过程热力学模拟	170
6.3	化工分离过程纳微结构界面研究展望	173

6.4	分离过程技术发展展望	175
6.4.1	微乳相分离技术	175
6.4.2	产物的直接捕获技术	176
6.4.3	仿生分离技术	177
6.4.4	分离过程强化技术	178
	参考文献	178
7	精馏传质分离过程	182
7.1	引言	182
7.2	精馏过程流体力学及其模拟	182
7.2.1	板式塔计算流体力学模拟	182
7.2.2	填料塔计算流体力学模拟	186
7.3	精馏过程计算传质学	187
7.3.1	基本传质方程及其封闭	188
7.3.2	计算传质学的方程体系	189
7.3.3	基于计算传质学的化工过程建模	190
7.3.4	计算传质学在精馏塔及其他化工过程模拟中的应用	191
7.3.5	挑战与展望	197
7.3.6	结论	198
7.4	气-液界面对流现象及其对传质过程的影响	198
7.4.1	气-液界面的 Marangoni 对流及对传质过程的影响	199
7.4.2	气-液界面的 Rayleigh-Bénard 对流及对传质过程的影响	201
7.4.3	结论	202
7.5	间歇精馏过程	202
7.5.1	间歇精馏的基本操作模式	203
7.5.2	间歇精馏塔的类型	203
7.5.3	特殊间歇精馏	204
7.6	精馏过程多元气-液传质理论	210
7.6.1	气-液界面的多元传质现象与普遍化 Fick 定律	210
7.6.2	多元传质的普遍化的 Maxwell-Stefan 方程	212
7.6.3	多元传质方程的求解	213
7.6.4	多元传质方程非稳态解与点效率计算	215
7.6.5	结论	225
	参考文献	226
8	离子液体科学与工程基础	231
8.1	引言	231

8.2	离子液体的微观结构及氢键相互作用	232
8.2.1	离子液体的氢键网络结构	232
8.2.2	离子液体团簇	234
8.2.3	离子液体中正负离子协同催化作用机制	236
8.3	离子液体的物性变化规律及预测方法	240
8.3.1	离子液体数据库	242
8.3.2	离子液体的分子模拟及周期性变化规律	243
8.3.3	离子液体的 QSPR 研究	243
8.4	离子液体中反应-传递原位研究方法以及放大规律	244
8.4.1	离子液体中传递-转化耦合性能的原位研究装置	244
8.4.2	离子液体中气-液传质过程的实验研究	245
8.4.3	离子液体中气-液传质过程的数值模拟研究	247
8.5	结论	249
	参考文献	249
9	复杂流体分子热力学	254
9.1	引言	254
9.2	链状流体的状态方程	256
9.2.1	化学缔合统计理论框架	257
9.2.2	状态方程	259
9.2.3	状态方程的应用	262
9.3	链状流体的混合亥姆霍兹函数模型	264
9.3.1	密堆积格子模型	265
9.3.2	密堆积格子模型的应用	268
9.3.3	格子流体模型	269
9.3.4	格子流体模型的应用	270
9.4	结束语	271
	参考文献	273
10	多相流动的数值模拟——离散单元法及其在炼铁高炉中的应用	283
10.1	引言	283
10.1.1	颗粒-流体流动的数值模拟概述	283
10.1.2	高炉内的多相流动概述	286
10.1.3	高炉多相流动的数值模拟	287
10.2	数学模型描述	288
10.2.1	颗粒相控制方程-离散单元法 DEM	288
10.2.2	流体相控制方程-计算流体力学	290

10.2.3	传热模型	290
10.2.4	耦合计算方法	292
10.2.5	平均方法	293
10.3	应用举例	295
10.3.1	高炉上部物料分布的模拟	296
10.3.2	高炉炉体内气-固两相的模拟	302
10.3.3	风口回旋区气-固流动的模拟	307
10.3.4	炉缸内颗粒行为的模拟	314
10.4	总结	317
	参考文献	318
11	反应粉碎过程原理及应用	325
11.1	反应粉碎的特点与机理	325
11.1.1	反应粉碎特点	325
11.1.2	反应粉碎机理	326
11.2	反应粉碎中的机械化学效应	328
11.2.1	粉体物理化学性质的变化	328
11.2.2	粉体之间的机械化学反应	328
11.2.3	粉体晶体结构的变化	329
11.2.4	发生固相反应	329
11.3	反应粉碎的应用及研究现状	330
11.3.1	粉体表面改性	330
11.3.2	粉体活化	330
11.3.3	机械合金化	331
11.3.4	能源材料制备	332
11.3.5	污染物处理	333
11.3.6	反应粉碎过程模拟	333
11.4	反应粉碎过程发展趋势	334
	参考文献	334
12	专业数据和计算资源的网络化共享——构建未来虚拟研究环境的基础	337
12.1	引言	337
12.2	网络化专业数据的共享	337
12.2.1	单一的化学数据库的网络化基本成熟	338
12.2.2	发展趋势: 多个网络化学数据库的统一检索	338
12.2.3	原始实验数据的数字化共享与保藏	341

12.3	计算资源的网络化共享	341
12.4	化学数据和计算资源的网络化集成	343
12.5	结语	344
	参考文献	345
13	计算机辅助化学产品设计	349
13.1	引言	349
13.2	化学产品工程	349
13.2.1	化学产品工程的知识结构	350
13.2.2	化学产品金字塔	350
13.2.3	产品设计与工艺设计的结合	352
13.2.4	多尺度方法	352
13.3	化学产品设计	352
13.3.1	化学产品设计的基本步骤	352
13.3.2	计算机辅助分子设计和混合物设计	354
13.3.3	化学产品设计的方法体系	355
13.4	化学产品设计中的分子模拟	356
13.4.1	微观尺度模拟	356
13.4.2	介观尺度模拟	357
13.5	化学产品设计中的全局优化问题	358
13.6	化学产品工程中的机遇和挑战	360
	参考文献	360
14	过程系统工程——“两化融合”发展与 PSE: 挑战和前景	367
14.1	“两化融合”发展的必要性	367
14.1.1	我国的工业化进程	367
14.1.2	信息化的含义	368
14.1.3	“两化融合”发展是中华民族崛起的战略抉择	368
14.2	化学工业“两化融合”的发展趋势	369
14.2.1	从规模经济逐步向范围经济过渡	369
14.2.2	从传统制造业向服务制造业过渡	372
14.2.3	从高能耗高污染的重化经济向绿色生态经济（特别是低碳经济）逐步过渡	373
14.3	“两化融合”的发展提出的挑战	375
14.4	过程系统工程可以提供的支撑技术	375
14.4.1	产品工程和纳米过程系统工程为产品创新和精细化工发展提供支持	375