

化工过程开发

HUAGONGGUOCHENGKAIFA

化学工业出版社

化工过程开发

陆震维 缩译

内 容 提 要

本书主要根据德意志联邦共和国1974年出版的乌尔曼工业化学全书第4卷第4版缩译而成。本书共分三篇：化工过程开发概论，化工数学模型的建立和化工装置的最优化。

本书可供从事化工过程研究和开发的工程技术人员参考，也可作为有关高等院校师生的教学参考。

化工过程开发

陆震维 缩译

责任编辑 谢丰毅

封面设计 任 辉

化学工业出版社出版

(北京和平里七区十六号楼)

化学工业出版社印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行

开本850×1168¹/₃₂印张12³/₄字数335千字印数1-5,110

1984年5月北京第1版1984年5月北京第1次印刷

统一书号15063·3557定价1.60元

译 序

本书主要根据德意志联邦共和国乌尔曼工业化学全书新编第4卷第4版缩译而成。在内容的选择上，偏重于阐明化工过程开发的一些基本观点和方法。通过本书的介绍，力求使读者对过程开发的全貌有一概括的了解。鉴于当前化工过程数学模型化的研究和发展，以及电子计算机在化工领域内的广泛使用，今后化工过程的开发将愈来愈多地采用数学模拟放大的方法，因此选用了化工数学模型和装置最优化两篇作为本书的主要内容。

应该指出，由于化工过程的复杂性，对于具体的一个过程开发来讲，决没有固定的模式。本书所述也仅仅是大致的规律。

本书在缩译过程中，承蒙化工部规划局区灿棋同志和我院梁玉衡、汪文川等同志对本书中有关内容提出了许多宝贵的意见，在此谨表示感谢。

由于译者水平有限，时间仓促，因此书中难免出现许多缺点和错误，希读者批评指正。

译者

目 录

译序

绪论	1
----------	---

第一篇 化工过程开发概论

第一章 化工过程开发的内容和步骤	6
第二章 过程的技术资料	10
2.1 过程的专门资料	10
2.1.1 物性数据	11
2.1.2 平衡	11
2.1.3 转化率和收率	13
2.1.4 反应速率	16
2.1.5 反应器的型式	17
2.1.6 操作方式	23
2.1.7 过程方法的描述和流程草图	23
2.2 过程的外围资料	24
2.2.1 原料	24
2.2.2 最终产品	25
2.2.3 副产品	26
第三章 过程的评价	28
3.1 装置规模	28
3.2 费用估算	29
3.2.1 开发费	29
3.2.2 投资费	30
3.2.3 原料费	34
3.2.4 生产费	35
3.3 盈利估算	39

37837

3.3.1	静态盈利	39
3.3.2	动态盈利	39
3.4	最优化	40
3.4.1	单件设备的最优化	40
3.4.2	过程的最优化问题	41
3.5	不同过程方法的比较	42
3.5.1	选择过程方法的准则	42
3.5.2	不同的工艺路线	43
3.5.3	不同的原料	45
3.5.4	新产品	46
3.5.5	技术可靠性	46
第四章	试验工作	53
4.1	阐明有关问题	55
4.1.1	分析方法	55
4.1.2	物性数据	56
4.1.3	动力学测定	58
4.1.4	催化剂的开发	60
4.1.5	材料的腐蚀问题	62
4.2	单元操作试验	65
4.2.1	模型方程和模型试验	65
4.2.2	典型的单元操作试验	70
4.3	中试装置	85
4.3.1	建立中试装置的一些基本观点	85
4.3.2	关于化学反应器的研究	88
第五章	试验方法和结果整理	104
5.1	过程分析	104
5.1.1	试验安排	104
5.1.2	建立数学模型	105
5.1.3	数据处理	108
5.1.4	试验结果的计算	109
5.2	过程最优化	110
第六章	设计工作	113
6.1	设计准备	113

6.2	基础设计	117
-----	------------	-----

第二篇 化工数学模型的建立

第一章	引言	121
第二章	定义	124
2.1	技术过程和生产过程	124
2.2	过程参数	124
2.3	过程变量	124
2.4	设备和装置	129
2.5	模型.....	129
第三章	过程数学模型化的基本考察	132
3.1	状态变量, 相坐标和相状态空间	132
3.2	基本动态过程的数学模型	133
3.3	一般模型状况	137
第四章	数学模型分类	143
4.1	按确定性的类型分类	143
4.2	按依赖于时间的关系分类	143
4.3	按特性分类	146
4.4	按数学描述的方式分类	147
4.5	按应用目的分类	148
第五章	建立数学模型的步骤	156
5.1	初步研究	158
5.2	建立详细的数学模型	159
5.3	经验参数的估值	160
5.4	程序编制	162
5.5	模型计算	162
5.6	数学模型适用性的检验	163
第六章	系统分析	169
6.1	结构分析	169
6.2	功能分析, 功能模型	187
6.3	行为分析, 行为模型	190
第七章	建立数学模型的系统方法	191

7.1	集中参数系统的物料平衡	192
7.2	集中参数系统的能量平衡	208
7.3	分布参数系统	216
第八章	行为分析和技术过程的行为模型	224
8.1	过渡状态的数学描述	224
8.2	非线性函数的线性化	231
8.3	简单过程的模型化	235
第九章	物理分离过程的数学模型	254
9.1	一般模型方程组的建立	256
9.2	填料塔模型方程组	260
9.3	板式塔的一般模型方程组	279
9.4	计算汽/液平衡的公式	293
9.5	简单的计算过程	298
第十章	传热过程模型	302
10.1	已知给热系数时的稳定热平衡方程	302
10.2	未知给热系数时的单相和双相物料流的给热	307
10.3	空气冷却器	317
第十一章	化学反应器的计算模型	320
11.1	搅拌釜	323
11.2	管式反应器	328
11.3	流化床反应器	340

第三篇 化工装置的最优化

第一章	化工装置的模拟方法	345
1.1	过程矩阵的建立	347
1.2	同时衡算	351
1.3	序贯衡算	364
第二章	稳定操作时的参数最优化方法	368
第三章	缓慢过程的参数最优化	374
第四章	装置在操作过程中的参数最优化	379
4.1	基于统计的最优化方法	379

4.2 用不稳定的参数干扰进行最优化的方法	381
第五章 最优产品和原料的选择	383
参考文献	387

绪 论

化工过程开发是指从实验室过渡到第一套工业装置的全部过程。由于化工过程开发涉及化学工艺、化学工程、机械设备、调节控制、材料与防腐、技术经济等各个领域，同时还包括实验、设计和试生产等各个环节，因此它是范围极广的一门综合性工程技术。

近代的化工产品是日新月异的，工艺方法和设备也在不断地更新。因此，如何缩短从实验室过渡到工业化的开发周期，是有重大意义的。

毫无疑问，当前化学工业的迅速发展，首先在于化学这门科学的不断创新，以及采用了新型的材料和先进的机械装备。但是，就化工过程本身而论，主要取决于“化学工程”的发展。由于在过程开发时，自觉地运用了化学工程的理论和方法，从而使得在实现工业化生产时，不再全凭经验。其结果是大大缩短了工业化的周期，加速了化学工业的发展。

回顾化学工程的发展历史可知*：化学工程在20年代和30年代是建立在“单元操作”的概念上。由于初步建立了化工参数间简单的定量关系，使工程技术人员能设计和阐明化工装置。到40年代，流化床催化裂化过程和丁苯橡胶的乳液聚合的开发，依旧采用30年代逐级放大的方法，放大倍数不超过50倍。但是在曼哈顿工程设计中**，根据化学工程的基础理论工作，如扩散分离过程，流体的流动，过滤速度和传热过程的研究，以及借鉴已有的工程技术经验，使工程放大高达千倍，有些装置的放大倍数甚至

注：* 化机所C₅组；关于化学工程的若干问题，国外化学工程（第一部分）（1972年）。

** 美国原子弹研制工程。

更高。这个设计的成功，推动了化学工程理论在过程开发中的应用，同时也促使其在50年代发展为可靠的数学形式。由于电子计算机的应用和发展，更进一步推动了化学工程在60年代朝着十分理论性的方向发展，大量的研究工作是应用高等数学有力的工具来解决，诸如：流体流动，混和，反应动力学，晶粒长大和过程动态的自控理论等问题。大量化学工程的基础理论研究工作，化工过程的数学模型化和电子计算机的应用，使得化工过程的开发放大在今后逐步有可能按系统工程的理论来进行。

在近代的化工企业和工业研究部门中，为了有效地进行化工过程的开发，大都设立了“研究和开发”部，使研究和开发紧密相连。

化学工业的研究任务，主要在于发展满足于国民经济各部门所需的化工新产品和对老产品的工艺生产方法进行改造。这种研究一般可以区分两个阶段：第一阶段主要是在实验室里进行，即所谓“基础研究”；在此阶段中要对大量的反应方法作比较实验。经初步筛选后，确定一种有希望的反应方法。当然也可利用别的单位的基础研究成果，或者根据文献报导的方法来开发，但此时应进行“追试”，以便证实其可靠性。第二阶段即为过程开发本身。过程开发是建立在一个十分明确的目标上。

实验室研究的结果，只能说明该过程方法的可能性，但还不足以用来设计一个生产装置。过程开发的任务是要得出所有必需的情报资料，以便使实验室的研究结果能变为工业生产的现实。实验室研究和过程开发是相互衔接的。一般讲，实验室研究是在得到一种生产方法的“设想”而告终，过程开发则要对这种生产方法的“设想”在技术上和经济上的可能性和合理性进行考核⁽¹⁾。为了进行试验而所需的模型装置或中试装置的设计、安装和开车均应直接包括在过程开发阶段中。

从实验室到第一套工业生产装置的建立是过程开发的任务，但是在建立第一套生产装置后还有进一步考虑化工装置的最优化的问题。这是由于一般在建立第一套工业装置时，有关一些设计

参数的假定，以及所建立的数学模型尚须通过工业生产来检验。虽然在过程开发的进行中已经考虑到最优化问题，但还不完善。只有当建立的数学模型与实际工业生产相符合后，模型才算是适用的。因此，当工业装置建成并投产后，还必须根据工业装置上获得的数据，核对模型和修改原设计，并在装置上进行调优运算。这样才有可能为今后建立的装置达到最优设计和最优控制。

在化学工业中，用于研究和开发的费用约占总销售额的5~10%^{〔2〕,〔3〕*}。而其中实验室的研究费用不到1/4，其余部分均用于工业试验，即用于过程开发本身。过程开发所耗费的人力、物力是相当大的，因此必须科学合理地组织。

由于在过程开发中运用了化学工程的理论，并加强了研究和开发的组织管理，从而使得从化学家实验室里的一个基本发现到实现工业生产之间的时间，即所谓“开发周期”大大缩短^{〔4〕}。

目前化工生产的特点是：生产装置的规模和产量不断增大。在1950到1970年间，石油化工产品和纤维产品几乎增长了十倍。图1.1为凯洛格工程公司所建合成氨装置规模逐年增长的情况^{〔5〕}。图1.2表示了一些国家乙烯装置单系列生产能力的发展情况^{〔6〕}。在上述情况中，大型装置单系列的生产能力在五年中大约增加了一倍。当然这种发展不是无限制的^{〔7〕}。但是可以肯定，新的生产

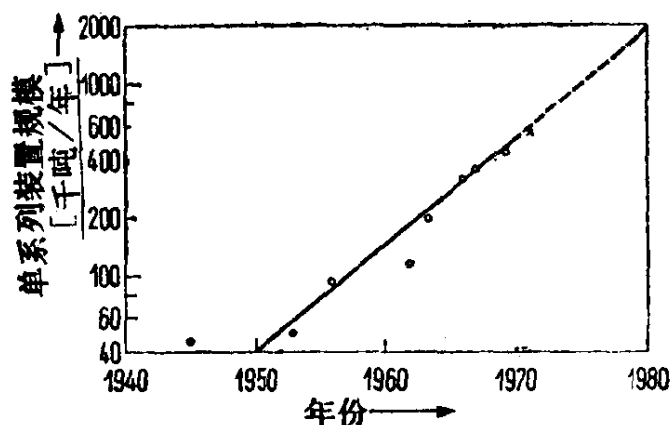


图 1.1 凯洛格公司建造的大型合成氨装置^{〔5〕}

* 此数据偏高，一般占3~5%。——编译者注

方法装置规模必须比老方法的装置规模要大，这样才能显示其优越性。这表示：从实验室到工业生产装置间的放大倍数比以往要求更大。此外，为了加快工业化，要求尽可能地减少中间试验的级数，因此也就增大了放大倍数。由此可见，工程放大问题已成为当前过程开发的核心问题。

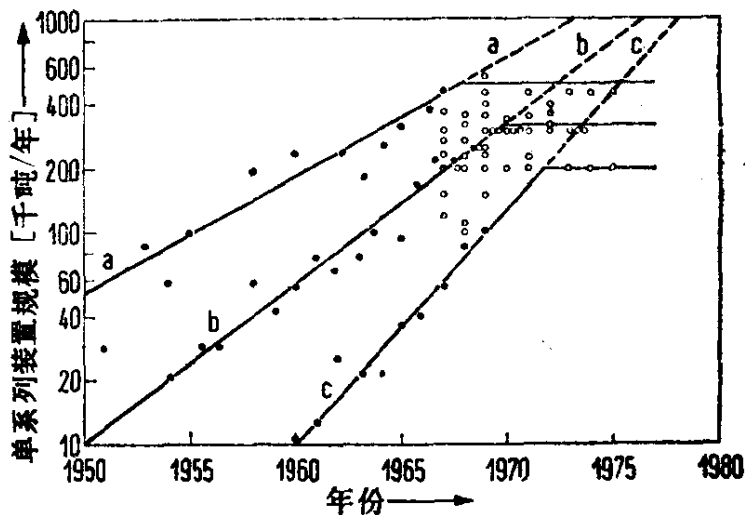


图 1.2 美、日、英、西德、比利时和荷兰等国乙烯生产规模的发展⁽⁴⁾
a) 最大规模; b) 平均规模; c) 最小规模; (○是按公开发表资料的补充点)

如前所述，目前化工过程的开发是处于逐步从经验过渡到科学的过程。长期以来化学工业中采用传统的相似模拟放大。这种放大方法在电子计算技术尚未得到广泛应用时，对于如何合理组织试验，以及解决一些变量不多的物理过程的放大问题，确实起了一定的作用。但是对于复杂的化工过程，由于无法同时满足各种相互矛盾的相似条件，例如对于化学反应器的放大，相似方法是无能为力的。值得注意的是：用电子计算机进行数学模拟放大，这种方法是在充分利用现有的技术情报资料、化工数据、化学工程的理论和小试验结果的基础上整理成抽象的理论模型（初级模型），然后在电子计算机上解算，经过与实验结果比较（一般要中试结果），并反复对模型进行修正，若模型在一定的精度要求内能符合试验结果，则可以直接用于放大设计。采用数学模拟的

优点是可以实现高倍数的放大，并且用数学模型在电子计算机上进行“数学试验”可大量节省人力、物力和时间。但是，数学模拟放大的关键是要建立一个在一定范围内能反映原型本质的数学模型，因此要求充分掌握过程的基本物理——化学规律。虽然目前还只能在少数过程中用这种方法放大，但它无疑是今后过程开发研究中的一个重要方向。这里要着重指出：数学模拟放大并不意味着不要中试。相反，在许多情况下，一个正确的数学模型往往要经过小试、中试、甚至通过工业生产的检验后才能完善地建立。此外，由于化工过程的复杂性；当前在化工过程的开发中，还不能完全排斥经验或半经验放大的方法，这里重要的是，应力求减少从实验室过渡到工业生产间的试验级数。

在开发一过程时，经济的观点是十分重要的，但决不是唯一的判据，因为有许多其它因素是难以用经济来表示的，例如：

1. 产品使用性能是否优于其他方法生产的产品；
2. 装置的三废、噪音、热量的扩散等对周围环境有无破坏作用；
3. 生产过程有无危险，对操作人员的健康有无危害。

因此，在过程开发时必须同时对技术、经济、三废安全和可靠性等一系列问题作综合的考虑。

由于化工过程开发涉及面甚广，因此要求过程开发者除了掌握一定的数学、物理、化学、机械和材料等基础科学和工程技术知识外，尚须具有良好的化学工程理论素养，以及丰富的化工生产和设计的经验。应当指出：在过程开发中应尽可能地采用现有化工生产中或其他领域内的一切可以利用的成熟经验。

第一篇 化工过程开发概论

第一章 化工过程开发的内容和步骤

这里要阐明的是，在开发一化工过程时应从何处着手，包括哪些内容和步骤。

首先应明确，涉及的产品是有经济价值的，并能满足国民经济的需要。若要生产，也已经有了一种可能的方法，而且对其他方法也作过比较试验。通过初步考核，业已证明产品的性质能满足需要，否则应改变工艺方法，使其能达到所要求的性能。

有关的反应均应经过实验室研究。通常实验是间歇的，实验设备大多是用玻璃制成的。所希望的反应和其他可能出现的副反应均为已知。在一定的操作条件下，已获得有关收率的数据。

若已知参与过程的物料性质，则可设想各种可能的分离步骤。要预先准备好关于中间产品和副产品的分析方法，以及确定最终产品纯度的分析方法。

是否基于实验室的研究结果，就可着手进行开发，这对企业界而言是具有决定性意义的。除了根据需要外，关键要看技术经济指标是否先进，此外尚须考虑原料的供应、副产品的销路、三废处理等一系列问题。若工艺本身是成熟的，一般讲，进行开发问题不大。若该工艺过程在本企业中只是原则上了解，但具体情况尚不清楚，一般购买专利则更为经济，因为独立开发一项工艺要比购买专利所花的代价要高得多。

若涉及的是一项新工艺，则要要不要进行开发，主要取决于技术风险，竞争状态和该工艺路线的发展前途。要从事这项开发工作，必须在技术上可靠，经济上合理，而且这项新工艺对其他技

术领域也有用处。

在进行开发时，如前所述，主要着眼于把生产“设想”变为生产“现实”。在实验室阶段得到的情报资料是十分不够的，因为：

(1) 热力学数据和反应动力学数据大多还不足以解决从间歇的实验装置过渡到连续的工业生产装置，以及包括许多中间分离步骤。

(2) 副产品的返回对反应过程和最终产品性质的影响还不够清楚。

(3) 在实验室里得到的最终产品的样品，往往是经过最有利的净化操作而制备的，完全不同于工业生产情况。因此，关于最终产品的特性，尚不能最后定论。

(4) 实验一般是在操作参数有限的范围内进行的，例如，在玻璃设备内压力受到限制。因此即使是比较接近最优化也不可能。

(5) 在实验室里不考虑腐蚀和产品受到污染的问题，因为所用的材料，设备和物料与工业生产并非完全相同，而且实验时间相对较短。

(6) 在上述条件下作出的第一次计算结果是很不可靠的。

虽然对于过程已经有了一个设想，但还不够清楚，即对这种生产方法在技术上能否实现？对装置的各部分如何确定尺寸？还缺乏过程的计算所必须的一些工程技术资料。

过程开发就是要通过有关步骤，逐步地完善和填补这些空白。

为了解决上述问题，过程开发主要包括下列几个内容或环节：

- (1) 用工程观点收集和整理与过程有关的技术情报资料；
- (2) 进行预设计（或称概念设计）；
- (3) 对过程进行评价；
- (4) 进行模型试验和中间试验；

(5) 根据情报资料和试验结果, 按照工程设计的观点整理资料;

(6) 进行基础设计。

这里要指出, 上述几点只是过程开发中的几个关键内容, 决不是其全部。特别是实验室研究与过程开发也不能绝然分开, 例如许多实验室研究工作——分析方法的研究, 催化剂的开发, 反应动力学的测定, 材料的腐蚀试验和物性数据的测定等等, 均应直接属于过程开发内容的范围之内。

过程开发的步骤大致可按图1.3所示。当然所描述的步骤是典型的, 但不是说每个过程开发均是如此。这里所表示的仅仅是一个梗概。在实际情况中, 完成一个化工过程的开发是十分复杂的: 经常要重复一些假定, 而这些假定又要在不断深入研究的情况下加以确定, 或重新假定。

通过实验室的研究后, 按照已经掌握的情报资料, 首先提出一个流程图, 并对其作部分计算。经过第一次评价后, 就可进入预设计阶段。并作出第二次评价。通过预设计可以发现: 缺乏哪些基础数据, 应做哪些试验。应再根据对过程技术资料的掌握情况, 进行全流程或部分流程的试验, 有时甚至亦可只做单元过程和设备的试验。经过试验后就应作出第三次评价。应该指出, 不同方法的选择或者不同过程参数的选择, 应当尽可能地在实验室里或小试验中解决。在中间试验装置上长期对两种方法作比较试验常是例外的。

经过小试或中试后, 获得了工业装置设计所必须的工艺数据、化学工程数据和其他数据(如: 材料耐腐蚀数据, 三废处理方面的工程数据等)后, 应将全部情报技术资料按工程设计观点加以整理和完善, 使其为基础设计打下基础。一般讲, 工业研究单位只要有足够的设计力量, 就应做到基础设计。否则要与设计部门共同配合来完成。

经过基础设计后, 过程开发的最后一步是建立第一套工业生产装置。当然这一部分工作内容主要涉及设计、施工和开车等工