

化工过程工程 工业实践

S.W. Bodman 著
曲德林 曾宪舜 译

清华大学出版社

化工过程工程工业实践

Samuel W. Bodman 著

曾宪舜 曲德林 译

清华大学出版社

内 容 提 要

本书是目前国外在化工系统分析和过程设计方面广泛使用的一本主要的参考书。其特点是侧重于工业实践。全书列举了六个典型的化工过程设计的实例,包括流体输送、萃取过程、精馏过程、反应器设计以及反应-分离系统的过程设计的工业实践。每个实例都从问题的提出,实验数据的处理,过程的简化,数学模型的建立,直到设计计算,流程比较和选择,过程最优化,最后对过程经济进行评价,并推荐一个较好的设计方案。本书还特别强调化工中计算机辅助设计的重要性。第5、6、7章还附有具体的设计计算的 FORTRAN 程序及打印结果。

本书的对象是从事化工系统工程、化学工程、过程设计、过程经济分析、化工软件、计算机辅助设计工作的工程技术人员,也可作为高等学校化工类各专业的教师、高年级学生、研究生的教学参考书。也适于作课程设计和毕业设计的参考书。

化工过程工程工业实践

Samuel W. Bodman 著

曾宪舜 曲德林译

☆

清华大学出版社出版

北京 清华园

清华大学印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行·各地新华书店经售

☆

开本: 787×1092 1/16 印张: 11 1/2 字数: 291 千字

1985 年 8 月第一版 1985 年 8 月第一次印刷

印数: 00001~10,000

统一书号: 15235·179 定价: 2.10元

译者的话

随着现代计算机技术的发展,化工系统工程取得了长足的进展。总结这一领域的基本理论、方法和实践的有影响的著作,都是在 60 年代末和 70 年代初相继问世的。如《过程分析和模拟》、《过程工程的决策》、《过程综合》等,本书也是其中之一。本书是国外在化工系统分析和过程设计方面广泛使用的一本主要的参考书。

本书的特点是侧重于工业实践。全书共列举了六个典型的化工过程设计的实例,包括流体输送系统、萃取过程、精馏过程、反应器设计以及反应-分离系统等过程设计的工业实践。每一个实例都对问题的提出、数据准备、过程简化、数学模型的建立、设计计算、流程比较、最优化、过程经济评价等内容进行了详细的讨论,并推荐了一个较好的设计方案。这样一种从原始数据出发,前后连贯的,有工业背景的设计全过程,对高等学校化工类专业的高年级学生,特别是对刚刚走上研究和设计岗位的年轻工程技术人员来说,是非常有用的。

本书的另一个特点是强调在化工过程设计中使用计算机的重要性。书中列举的实例,不论解题的思路还是分析方法。都是以计算机辅助设计为基础的。第 5、6、7 章还附有这几章设计计算内容的具体的 FORTRAN 程序及使用这些程序的计算结果。应该说这里提供的程序还是初步的,尚有很大的改进余地,但还是很有参考价值。原书所附的这些程序有一些错漏之处,译者已做了修改,并在 IMS8000SX 微处理机上试算过。本书所附的程序是可执行的程序。

本书服务对象是从事化工系统工程、化学工程、过程设计、过程经济、化工软件、计算机辅助设计工作的工程技术人员,也可作为高等学校化工类各专业的教师、研究生和高年级学生的参考书。也适合于作为课程设计和毕业设计的参考资料。

对于从事高粘度流体输送、液-液萃取、苯催化加氢、氯化苯、乙苯氧化脱氢制苯乙烯的反应器设计、苯乙烯单体精制等具体生产的读者,本书相应章节的内容可直接利用。其它领域的读者,亦可从中得到有益的启示。

由于译者水平所限,译文难免有错漏之处,切望读者批评指正。

本书在翻译过程中,得到滕藤教授和刘明华等同志的热情指导和帮助,仅在此表示诚挚的谢意。

译者 1984.4

前 言

现在许多工程科学系的课程安排中,一个主要问题是,在理论基础结合化工实践的环节上所用的时间太少。特别是,常常忽视或者不太注意对过程设计和经济评价的研究。因此,年轻的工科毕业生经常难于适应工业组织的环境,不善于利用他们的技术知识解决生产实际中的经济效益问题。

为了适应工业实践的要求而给学生以更多的准备,马萨诸塞理工学院(M. I. T)化工系制定了两种特别的教学大纲。首先是化工系的化工实践课。在教师的直接和细致的指导下,使学生接触工业实际问题。这个大纲已经实行了五十多年,证明对学生一般的科学经验的培养是有效的。为完成实践课程大纲,在高年级开设了过程设计的综合课程。Thomas K. Sherwood 教授在他写的教科书“过程设计教程”中,总结了在 M. I. T 过程设计课程中他的开创性的工作。正如他所说的,该课程是以一系列设计实例为基础的。对每个例子都要求学生设计和分析解得的流程图。

本书力求把实践课程大纲的某些方面与 Sherwood 的实例分析方法结合起来讲授工程设计。希望这种结合不仅作为高等学校的过程设计教科书来说是有用的,而且也可以作为青年工程师迈入工业实践领域的一本参考书。

绪言主要描述了在化工产品工业化中,市场研究、过程设计和经济评价的相互制约和相互依存的关系。讨论了设计和分析实验室实验的方法,利用市场和经济信息的方法以及准备和提出化工过程设计的方法。在绪言之后,接着论述了工程设计中的六个实例。这些都是年轻工程师在最初的工业实践中经常会遇到的典型例子。本书还着重强调了精确分析的必要性和实验数据的关联方法。其次,还对讨论的问题求得的设计解和实际解做了一些论述。最后,对推荐的流程的每一种情况,都举例说明了结合技术和经济信息进行实际评价的方法。每个例子都以推荐的设计和进一步工作的建议来结束。这对今后的更详细的设计来说是必要的。

在分析和说明设计问题时,主要把重点放在数字计算机的应用上。对其中的三个实际应用的例子提出了计算机程序。这些程序及其它类似的程序已被证明,在学生可以直接与机器通话的“计算机教室”里使用时,是特别有帮助的。关于这本教科书的预备知识,我们认为,读者至少应具备 FORTRAN 算法语言的一些知识。

本书是作者担任 M. I. T 化工实习学校 Bound Brook 站主任时编写的。这个站位于新泽西 Bound Brook 美国氰胺公司的有机化学分部内。编写第三章所用的数据是学生小组收集的 Bound Brook 站的设计项目的一部分。作者在此感谢美国氰胺公司允许使用这些数据,并对公司在 1965—1966 及 1966—1967 学年的热情接待表示感谢。

许多个人对收集本书中的应用实例做出了重要的贡献。首先感谢 Thomas K. Sherwood 教授,他一直指导 M. I. T 的化工过程设计。正是他最初提出编写这本教科书,并且第二章和第四章几乎完全是以他在过程设计课程中所用的实例为基础的。在此对 Cornell 大学的 Robert York 教授,对他在化工设计经济评价方面的指导和对本书的许多部分带有启发性的

评阅表示诚挚的感谢。加利福尼亚大学贝克莱分校的 C. J. King 教授和 Scott Lynn 教授也热情地评阅了这本书的全部内容。他们的评论是非常重要的，增加了各个实例的深度和意义。密执安州中部地区的 Dow 化学公司的 Howard Kehde 博士和他的同事非常热情地评阅了有关苯乙烯生产的实例。他们的评论，由于引入了苯乙烯单体生产主要厂家的资料和细节，为这些实际应用的例子提供了宝贵的经验。加利福尼亚工学院的²Giles R. Cokelet 教授对硫的输送问题提供了有价值的评论。Cornell 大学的 R. G. Thorpe 教授最初告诉作者有关真空蒸馏苯乙烯-乙苯混合物的某些困难，这些资料对第六章的准备是非常有用的。第三章所用的数据是在 M. I. T 的 Michael Modell 教授的指导下收集的。对他在这方面的合作表示由衷的感谢。几位 M.I.T 前任助教和学生对第五、六、七章的计算机程序的编制也作了重要的贡献。在此特别感谢 Robert L. Blumberg, Bruce Crocker, Avelino R. Rodriguez 以及 Robert L. Sandel。

本书的计算机计算是在 M. I. T 计算中心完成的。作者非常感谢在研究开始时 Rohn 和 Haas 公司所给予的经济援助。这些对这本教科书的准备提供了很大的帮助。

作者并对美国研究发展协会的 Georges F. Doriot 夫人，Henry W. Hoagland，William H. Congleton，John A. Shane 和 Dorothy E. Rowe 小姐表示感谢，他们四年来在经济分析和商业评价等各个方面所给予的指导，对目前的工作有很大的贡献。

在这个手稿的准备过程中，最大的鼓舞和帮助来自于作者的妻子 Betsy，没有她的贡献，这个工作是不可能完成的。

S. W. Bodman

马萨诸塞 剑桥

1968.3

目 录

前言

1. 绪论.....	1
2. 氯苯生产中的反应器设计、最优化和控制.....	12
3. Fenway 酸液-液萃取过程的改进	35
4. 苯加氢反应的催化反应器设计.....	51
5. 硫输送新方法的评价.....	67
6. 精制苯乙烯单体的真空蒸馏塔设计.....	83
7. 苯乙烯单体生产的过程设计和评价.....	101
附录.....	134

1. 绪 论

化工设计的实践需要应用多方面的才干和技巧。就专业所涉及的范围来说,化工工艺设计工程师在给机械和结构等方面的专家提出设备的实际要求的时候,实际上履行了化学家和过程开发工程师的双重职责。最近 Sherwood^[44] 描述了化工设计所要完成的如下任务,这些任务的完成必定会弥补台式规模的化学实验和实际操作装置之间的差距。

1. 经济行情的判断
2. 计划或设计的构思
3. 设计的初步分析
4. 最终设计的完成
5. 建造和运行的实施

上述任务表明了设计必经的各个阶段,也要求设计工程师在各个阶段作出决策。

上述任务清单对从全局的观点来安排每一个局部的工作是很有用的。作设计规划分析时要记住:在设计的每个阶段完成之后,必须进行整个规划的经济评价;若在每一步之后不进行适当的评价,那么在下阶段中就要花费更多的时间和精力,因此是不合算的。

为把实验室构思成功地转变为实际的操作装置,就要求工艺设计工程师必须具有广博的基础知识,不仅是技术基础知识,而且要了解经济和社会的知识。例如,要使厂址选择适当,地理知识是重要的;掌握了企业的财政和经济学就能正确地进行评价,这是获得经济效益的先决条件。很明显,目前应用和掌握现代化计算装置——电子计算机的操作是训练设计专家的一个非常重要的部分。一个有成就的设计工程师,除了具有深厚的技术知识之外,还必须在分析自己的业务能力和研究其它人的工作和成就中,不断地发展本人的才干。

这本教科书描述了为成功地完成化工过程设计所需要的技术上的和经济上的知识。本章扼要地对这些知识加以总结。绪言之后是一系列的实际应用的例子,代表了化学工业工程设计的重要方面。

选用的实际应用的例子不仅列举了工程设计的各种不同类型,而且也列举了完成设计所需要的各种不同的阶段。内容包括了化学反应器的设计、分离设备的设计、管线大小和最优化等例子。就这些实际应用而言,或者对实际的技术问题而言,最大的困难在于要从实际问题中提炼出需要解决的问题来。也就是确定要求的是什么?通常一个技术问题失败的原因之一就是回答了并没有问及的问题,或者完成了并没有要求去完成的工作,即没有触及所要解决问题的本质。对不同类型和程度的设计来说,这种困难就特别普遍。本书说明的实例反映了实际的工业问题,归纳成备忘录的形式。有些例子中,所采用的数据是从文献中收集的。而另一些反映实际工艺问题的应用例子,其数据来源于本公司的实验室,并且其最终结果又用到实际的生产管理中去。

本书引用的三个实际应用的例子,其设计分析以计算机程序的形式总结在附录中。每一个程序运行所得到的结果都可用来评价设计的经济指标,而经济指标是以过程主要变量的函数形式表示的。但书中并没有给出最优解和这些变量可行解的集合。提出计算机程序的目

的是为了使人们进一步地去开发它，使它能够更精确地评价设计项目的经济性。这些程序在“计算机教室”中使用是特别有益的，在这种情况下，班组可以直接与数字计算机进行人机“对话”。

用计算机详细评价一个化学工艺过程，是工业设计小组可能遇到的一种极端情况；另一种极端情况并不要求详细的设计或者经济评价，仅需要一定量的计算用来确定最终设计的大致结构就行了。对后者，本书说明了只要考虑相当有限的情况，并在计算中使用简捷的方法是非常有好处的。

通过列举不同技术内容和不同设计程度的一系列例证，本书试图说明成功地完成工艺过程设计有关的一些概念。按照定义，过程设计是把技术理论同有用的实验数据联系起来，最终形成一个可行的生产过程。按照习惯，人们总是孤立地检验设计，而很少强调应用一组可以协调的原则。这些原则对正确地理解和成功地完成所研究的问题是必要的。因此要确立起这样一组原则，把它作为一种指南，使下面要讨论的实际应用的例子，超出它们各自的特定范围而更富有意义。这里考虑如下的一组原则：

1. 设计要求的确定
2. 市场条件的综合
3. 实验数据的评价
4. 关键设计参数的建立——模拟和最优化
5. 过程经济评价
6. 设计结果的说明

在绪言中不拟详细说明上面所列的每一部分，仅仅作些粗略的讨论，并对少数相应的参考资料加以评论。不应该认为综述的参考文献是一个完全的文献清单，而只是为初次接触工艺设计问题的年轻化学工程师们提供一些帮助。

设计要求的确定

完善的过程设计必须能够适应和满足各种问题的要求，如前所述，如果使用了数据处理设备就能使设计者比以前更加自由地研究系统参数的各种联系。实际上，本书的一个主要目的在于示范使用计算机研究过程设计的诸方面。虽然现代计算机的出现使用户很容易通过逐次迭代得到逼近的数值解，但是用户需要作大量的客观判断，避免只是为解题而解题。就工业所要求的工程的各个方面来说，如果由于设计改进所带来的好处不超过建立程序和计算时间上所花费的代价，那么从工程和从计算时间上讲都是浪费。

为确定详细设计计算最起码的要求，最好先借助于简单的手算分析限定条件下的设计。由于一般可作简化假定，限定条件下的计算往往十分简单。例如，如果一个实验反应器在两个温度之间绝热操作，其实验结果可以直接放大到在同样两个温度之间操作的工业绝热单元中去。这个结果与假定在较低的温度下的等温操作所得到的结果相比确定出了非等温操作所要落入的范围。当一个条件下的设计转变为另一个条件下的设计时，应注意重要设计参数的变化。人们可以就中间条件进行更详细的计算。这样的计算步骤将在第四章中加以说明。在这基础上设计了苯加氢的反应器。因此进行限定条件下的比较，其效果是明显的。然而，这个简单的技术常常被忽略，从而造成了工程上和计算时间上不必要的浪费。

设计工程师需要培养的最重要的技巧就是为确定设计的限定条件所必需的简单计算的能力。其中最困难的是为简化计算作近似的假设。一般来讲这种能力要通过若干年的实践来培养,初学者通常感到作到这一点十分困难。但是应该正确地认识到对问题的简化和进行有意义的分析的能力不是自发地随着经验的积累而增长起来的。必须进行有意识的培养。要把经过最终操作装置考验证实了的结果和在初步设计阶段作出假定后而得到的结果进行比较。只有经过这样的反复和比较,才能够提高今后估计和分析问题的能力。

但也不能过分强调限定条件下计算的需要。这种计算应该尽可能早地应用在规划的设想阶段。而目前和将来所作的大量工作是为研究管理人员提供某项规划在技术上和经济上获得成功的可能性的定量估算。很清楚,这种估计主要是要作出此项规划的投资和操作费用的预报。在几乎没有或根本没有数据的情况下这种估计是必要的。而这个估计又必须要从某种限定情况的分析中得到。进行这种分析的能力不仅对确定过程变量的最初范围有价值,而且对确定包括台架和中间规模试验费用在内的经济效益的可能性上也是有价值的。

因此,设计工程师在规划的台架试验阶段就应该考虑到:假如最初的估算表明经济上获得成功的可能性不太大的话,那么除非在外界条件,诸如原材料的供应地点比经济因素更重要的情况下,应该重新考虑台架实验是否要进行。同样,当工作通过了台架和中间规模实验阶段之后,特别在协调技术进展和市场研究小组的研究工作中,过程开发小组和过程设计工程师之间的讨论可能是很重要的。

市场条件的综合

设计工程师、市场研究与开发小组之间的合作是至关重要的。完成过程设计计算所需要的一项最重要的信息就是估计产品的目前和将来的市场要求。在多数情况下,设计工程师分析技术情报和准确地放大为工业装置的能力对最终操作的经济性仅有一定的影响。而产品正确的销售预报对操作单元最终经济特性的影响更为关键。

例如在计算整个系统经济性的阶段,可能使动力学常数或传热系数 20% 的误差得以降低,然而市场预报上同样百分数的误差,在计算整个规划的经济评价的过程中,由于误差传递将被放大。

市场信息的来源通过政府的报告或由各种贸易期刊发表的年度评论等多种渠道。然而最重要的信息来源却是推销员和顾客之间的私人洽谈,正是这种内部交涉构成了销售预报的最好的根据。销售预报一般应该在过程开发的最初阶段准备出来。但在市场研究工作进行的过程中,它可能发生迅速的和重大的变化。因此最主要的是应该不断地向过程设计小组报告市场估计的动态。只有这样,才能够完成最终的设计,并为目前和今后的市场估计证实设计是合算的。最后,还应该记住工厂的建设通常在设计规划完成之后二年或二年以上才能够完成。假如经济条件有利的话,需要在建设完工之前扩大工厂的生产能力,这一点更进一步地强调了对精确市场预报的需要。

由于收集和处理有意义的原始数据有困难,过去的化学工程文献很少对“市场学”这门学科给以注意。目前由于采用了电子计算机,有可能广泛和精确地收集和处理市场信息,因此促进了应用到化工领域中的市场理论的发展。目前这个领域内的研究相应地增加了。发表论文的增加就是很明显的说明。特别值得注意的是,在 1965 年美国化学工程师协会的讨论

会上发表了一系列的论文，在会上还讨论了科学研究、市场和设计工作之间的相互作用^[9,11,18,24,42]。这些论文是由熟悉化工产品商业化生产的诸方面人士准备的。这些论文雄辩地说明了进行市场分析所带来的好处，并提出了市场和研究开发组协作中所遇到的问题。特别值得指出的是，这些论文对于各种方法的论证是很有价值的。运用这些方法，工程师可以确保获得适当的市场信息并取得相应的精确的经济评价。美国化学工程师协会^[1]发表了另外的关于化工产品市场学的论文概要。这本书包括了 20 篇文献，可作为市场学这一领域的很好的基础材料。此外还详细论述了产品广告、应用研究及产品输送方法等方面的内容。

对最新化工产品市场学文献的全面评论是非常需要的。这种评论，最好由工业市场学经验丰富的人执笔。评论不仅仅可以帮助学生认清形势，也希望促进形成一个较好的整个工业的市场分析技术。

实验数据的评价

在化工产品的制造过程中，工艺步骤一般按以下顺序进行：

1. 反应物的准备
2. 进行反应
3. 加热或冷却反应产物
4. 从产物中分离出反应物和精制产物

毫无例外，设计工程师要把自己的每一步分析都建筑在他人所取得的实验数据或文献提供的数据的基础之上。为便于查找那些为数不多的，公开发表在化学文献上的数据，Mellon^[32]提供了一种非常有效地查找文献的方法。当一个过程操作的工程分析需要使用文献数据时，关键问题是要对使用的数据的质量进行评价。比如，在没有提出充分的理论对实验数据进行正确的分析和表达之前许多年就已经报导过的数据，由于缺乏理论指导，早期的实验中对某些量的测量难免是失败的，而这些量对系统分析又是不可缺少的变量。当然，在早期的工程实验室里所采用的实验装备并不象现在这么完善。因此重要的是要对各种实验室仪器的限度和弱点进行评价。

对发表的数据进行正确判断的困难往往和过程信息在工业上的保密问题交织在一起。为了保护一个生产过程的工业价值，很明显，有必要对外封锁技术数据。从技术观点出发，这通常要求工程师作出“合理”的假定以便进行分析。

Macmullin^[30]提出了工业数据分析的一个很好的例子。他讨论了苯氯化反应产物的分布问题。他所提出的数据证实了各种氯化产物的分布是反应的氯气总量的函数。然而，这个信息对工业过程的设计和评价来说还是不充分的，因为并没有指出反应的动力学参数值。为了完成这个设计，必须假定出合理的化学动力学常数，这将在第 2 章苯氯化的不同过程中加以讨论。当需要以这种方式处理问题时，人们总希望从尽可能不同的来源中得到文献的数据。通过对所有可行的数据进行比较和综合，确立起设计的现实基础。事实上，从一定数量的来源中收集和比较资料的技巧对过程设计的许多方面都是有用的。

在需要具体地投入时间和精力进行初步设计计算之前，要谨慎地评价设计所依据的实验数据的可靠性和一致性。这种评价通过把实验数据直接和文献数据进行比较来完成。例如，对二组分混合物，一组蒸气-液体平衡数据的大致精确度可以通过直接与不同温度和压力下

的同样的二组分混合物的数据进行比较而校核。假如对所要求的化合物，这些数据都不能用的话，那么根据实验室数据计算出来的相对挥发度可以利用拉乌尔定律得出的理想混合物的计算值进行比较。另外把它与具有同样化学结构的其他化合物的相对挥发度进行比较也是有帮助的。最后，数据的热力学一致性应该通过引入一种形式的吉布斯-杜亥姆方程来评价。

同样，在半对数坐标纸上用测出的固体在液体中的溶解度对绝对温度的倒数作图，我们可以得到一条直线，从这条直线的斜率可以计算溶解热。把这个溶解热的数值与在化学结构上和它相似的其他化合物的溶解热或熔化热值进行比较来校核实验数据的可靠性。类似的技术可以应用于化学动力学数据或化学平衡数据的处理，从而导出活化能或化学焓的改变。然后用这些值与文献值进行比较。

表 1-1 总结了化工过程总体规划中最常遇到的数据可靠性的评价方法。应该强调的是，这个表并不是设计方法的总结，而只是一套用来判断设计所用技术数据的质量的标准。所列出的参考文献并不是全面的。明显的是，这个表大大地简化了化工操作的类型，也大大简化了即使完成一个简单的设计问题都需要的理论和技术的知识。虽然实践证明了表 1-1 所总结的资料对于理论应用于实际的工程问题是非常有用的。在很多场合，人们仍然希望和要求用更先进的理论来补充表 1-1 所描述的基本方法。

各种化工工艺过程所包含的内容不同，当然在使用表 1-1 时也有很大的差别。例如，

表 1-1 评价和关联化学工程实验数据的有用方法

过 程 操 作	所需的设计参数	数据评价和关联的依据	参考文献
液体输送	摩擦系数	$f/2 = F(N_{Re})$	(34)
液体加热或冷却	传热系数	$j_H = F(N_{Re})$	(31)
化学反应	化学动力学常数	阿累尼乌斯关联	(46)
	化学平衡常数	Van't Hoff 关联	(52)
催化化学反应	有效因子	Thiele 模式	(40)
	从流体到催化剂颗粒表面的传质系数	$j_D = F(N_{Re})$	(40)
悬浮液反应	从液体到催化剂颗粒表面的传质系数	$k_L = F(D, N, D_p, \mu, \Delta\rho)$	(19)
搅动反应	在液体主体表面上的传质系数	$k_L = F(D, N)$	(27)
	从气体气泡到液体主体的传质系数	$k_L a = F(D, N, V_s)$	(45)
吸收	气体在液体中的溶解度	亨利定律或拉乌尔定律	(21)
沸腾或冷却	蒸汽压	克劳修斯-克拉贝龙方程	(52)
精馏	汽液平衡 (相对挥发度)	吉布斯杜亥姆方程	(37)
	板效率	Murphree 效率关联	(37)
结晶	溶解度和过溶解度	克拉贝龙关联	(14)
萃取	分配系数	涅恩斯特定律	(14)

有机化学工业中大量使用萃取和浸取过程,大量和经常使用的是在半对数坐标纸上画出溶解度数据,从而得到溶解热的简单方法。一旦对实验数据有了把握,就有可能顺利地进行萃取和浸取级数的最优设计计算。

当不可能进行工艺数据的理论关联时,使用因次分析法就有很大的价值。求解的问题基本上或根本没有理论基础的情况下,利用统计法设计实验对于减少实验总量和分析工作量是特别重要的。Koehler 整理了下面的一些参考文献,系统地概括了统计论在化工中的应用。这些资料还有力地说明了统计设计法除了可用于实验室和中间工厂数据的分析之外^[7,23],其在装备实验^[22]、计算机数据整理^[41]、选择生产线的合适的控制线路^[17]和改进质量控制方法上^[26]的优越性。当过程设计还缺乏充分的理论指导时,使用概率统计方法能够为必要的设计和评价计算提供相当有价值的基础。

最后一点容易被忽视的就是要进行适当的误差分析。如果所用的实验技术的或然误差近似等于数据关联的随机偏差,那么就可以认为具有很高的置信度,其中所有的误差来源均已恰当地确定,并经过了计算。有了这样的分析为设计使用这些数据提供了很大的可靠性,特别当投资费用大的时候,更是如此。

关键设计参数的建立—模拟和最优化

Sherwood^[44]在他的教科书中十分恰当地指出设计者必须善于作假定。一旦有了充分的数据可以用来全面和精确地分析一个过程,那么完成这项设计的经济上的刺激性就不那么大了。然而,为了作适当的初步假定,设计者必须培养能够把确定过程整体经济性很关键的变量分离出来的能力。往往初步设计计算要求确定出最重要的设计变量。在第4章苯加氢的反应过程设计中要对这一问题加以说明。

对于很一般的操作过程,人们比较熟悉关键变量。如在蒸馏塔的设计中,回流比通常作为过程经济性的最敏感的指标。然而对特殊的或相当复杂的设计的首次分析来说,确定最关键变量的任务一般由工程师自己承担。在进行多变量设计的时候,用给许多过程变量任意地赋上“合理”值的办法来选择初值点,这些变量是确定过程经济性的最低数目的关键变量。通过关键变量的变化,从而完成设计的初步经济计算和最优化。通过改变起初确定的参数来调整初始值。讨论苯乙烯生产经济性的第七章说明了使用数字计算机大大简化了初始条件的计算和改变。这一章也说明了为了确定每一种假定对过程总体经济性的影响,必须返回去讨论原始的假定。另外,认识到多变量的设计问题可能存在几个局部的最小值也是重要的。所以必须判断是取得了局部的最小值还是取得了整体的最小值。

上述的计算步骤缺乏对问题的有机的整体逼近,大量的决策必须由工程师自己作出。在某种设计问题中,可以应用线性规划法,使设计计算更定量地逼近逻辑值。这种方法用于可归纳为线性关系的设计问题中。Happel 的非常实用的教科书“化工过程经济性”^[18]包含了线性规划的简要叙述和例证。但特别要注意的是许多化工经济的问题都是典型的非线性问题,因此不能直接应用线性规划法。然而可以通过对方程进行线性化求出近似的解析表示式,线性规划法有助于确定费用函数的一般性质和相对重要性。

现代化学工程研究的一个重要方面集中在开发部分或整体过程设计中的最优化的先进方法,特别重视化学反应器系统最优化设计。Aris^[6,61]、Dehgh^[16]以及 Kramers 和 Wester-

terp^[28] 认真地总结了这方面的大量研究工作。动态规划法是最重要的现代最优化方法之一。在动态规划中, 首先最优化串联操作的最后一级, 然后把最后两级作为一个整体进行最优化, 计算一步加一级, 逆向进行到确定出整个过程的最优化条件为止。这种方法广泛应用于连续搅拌反应器系统^[5]的分析中。另外, 就管形反应器的最优化而言, 变分法具有重要的价值, 特别是在绝热反应^[15] 情况下更为有用。除去前面提到的最优化方法之外, 也证实了可用“最速上升”法对反应器系统进行最优化^[20]。这种方法通过过程变量连续地定量变化来尽可能地逼近希望的最优值, 这一步骤一直进行到讨论中的设计参数(如产量)最优化为止。

在开发最优化方法的同时还发展了新的方法来简化和减轻设计计算的工作量。Rosen^[38] 提出了完成过程物料平衡的计算机程序。Raviez 和 Norman^[36] 报导了结合物料和热量衡算关系的更灵活的程序。Sargent 和 Westerberg^[39] 开发了一个通用计算方法, 这种算法对于完成化工过程的计算机模拟所要求的程序设计是非常有价值的。

最近 Lee, Christensen 和 Rudd^[29] 在需要进行假定的多变量设计问题的研究方面作出了非常重要的贡献, 他们建立了一种方法, 用把初值赋到一组选择的设计变量中去的方式来减少计算的工作量。这项工作是在化工过程设计中开始有效地使用计算机这一发展趋势的第一个信号。

过程经济评价

当化学家在实验室里从事基础研究时, 一般不太注意产品的最终应用和产品在经济上获得成功的可能性。这在新产品的开发中, 对于造成一个创造性的气氛, 是极其宝贵的。然而一旦规划进入应用研究和开发阶段, 在此项规划的每一步工作之前都应该作出经济上的评价。这样, 在最初阶段就可以取消经济效益低的规划, 把更多的技术努力放在发展经济效益可能最大的产品的生产上。

设计工程师(或任何其他评价过程经济性的人)的一个重要职责就是和新产品的最新工艺的发展相并进, 并根据它们对利润潜力最终影响来说明这些发展。例如为了增加一种新产品的产率, 在特定的溶剂中进行某种化学步骤, 那么必须估算从溶剂中分离出这种产物的费用。产物回收的费用可能抵消了使用溶剂带来的节约。假如是这样的话, 这个产品的初期的过程研究和开发过程将要相应地加以改变。

工业上经济计算的实际情况千差万别。由于评价技术明显的商业性质, 文献中很难找到可采用的有意义的资料, 而这些资料对指导化学家和工程师解决与经济评价有关的问题是非常有用处的。

科学技术工作者在第一次接触经济评价问题时, 所遇到的一个比较大的困难是不了解经济术语。Beattie 和 Vivian 提出了化工经济分析中所用术语的详细定义汇编^[16], 大大地减轻了这一困难, 并且还说明了使用一致术语的重要性。

化工规划的经济评价以最简单的形式提供工厂建设所需要的投资费用的估计和此过程的运行费用预报。通过从预期的销售收入中扣除操作费用和所得税, 可以确定出净收入。利润除了可用每年收入的美元值表示之外, 还可以表示为预期的回收占投资费用的百分数。美国化学工程师协会的出版物^[2]很好地总结了化学工业公司的商业风险计算的指导准则。

每一个公司都具有自己独特的受到保护的原材料供应、生产经验、会计制度和长远的扩大生产的规划。因此不同的公司相同的工程项目会有不同的命运，这取决于各个公司如何决策。比如美国有一个公司，其产品在国内销售，这些产品面临着和欧洲制造的同样产品的竞争。欧洲人按调整计价为基础对产品进行计价，即折旧和辅助费用完全放到内销产品上，而出口产品仅仅负担直接费用。很明显，在这种形势下，即使是运输费用计入产品价格，欧洲公司仍然处于非常有利的竞争地位。这样费用计价标准上的不同就会引起商业市场中的很大差别。类似的例子也说明了其他条件，诸如原材料位置和生产经验上的差别也会导致明显不同的商业效果。几本教科书^[18,35,43,50]阐述了用于化学规划费用的规范性计价方法。应该注意到每个公司都规定了规划投资的最小回收额。很明显，有必要保守这些数字的秘密。然而在外部条件（如原材料位置）不利的形势下，对规划来说，估计8%—10%可以作为投资回收率的比较现实的低限。当然人们希望更高的回收率，通常也是可以达到的。

当研究规划的各种投入和产出现金流的现时值时，计算化学过程经济性所涉及的数学问题就变得十分复杂。Shouders 的一篇重要文章^[47]对这个问题进行了一般性的讨论并比较了各种利润标准对最终投资决策的影响。这篇文章也概括了工程经济学领域的实用参考书目，可供有兴趣的读者参考。

提供精确的经济评价的最大困难在于，不但市场价格和对产品的需求，而且国民经济总的发展都是动态函数。工厂的经济性能不但应该作为短项、高频率变化的函数，而且应该作为长项、产品出售美元值的逐渐增加或下降的函数来检验。对这个问题 Schenk^[42]作了简要的讨论，提供了一个有用的例证。他指出，化学规划的经济性受到销售价格变化的影响最大，除了销售价格之外，按照对投资回收影响的重要性，销售量的变化、销售损耗和投资依次是最关键的因素。他在讨论中也说明了对适当的价格和销售预报的需求。研究售价涨落的影响有时也称之为风险分析，通常在一个新的化学规划经济评价的最终报告中要求这项内容。

Twaddle 和 Malloy^[49]讨论了长项需要，出售价格和生产规模的变化对化学规划预期经济回收的影响。这个参考资料还提供了图解说明工厂经济性能的各种方法。特别是有效地证明了造成需求和价格随时间变化的原因会显著地影响最优的工厂规模，还有可能从根本上影响工厂是否建设的决策。

初步设计的常规经济评价的主要困难是缺乏过程装备的可靠的投资费用数据。Chilton 的汇编^[12]提供了费用估计和费用数据关联方法的有用的背景材料。他的教科书中的关联法十分适合于初步费用估计。然而，为了校核费用估计，还可以推荐其他的一些文章^[4,50]。特别在估计较大的设备的价格时应该用二、三个不同的参考文献核对。当设计到最后阶段时，为了验证所有重要装备的估算，最好应该亲自与设备制造厂家联系。

设计结果的说明

不论化学规划的设计和评价的质量如何，如果不把它全交给最终投资决策人批准的话，那么所有的努力都是白费的。特别是对技术报告的需要是早已被人们所认识的一个重要问题。目前有几本很好的教科书可以满足这个要求^[25,33,48]。总的来说，技术报告质量不高可以归结为准备和精心加工这篇报告所付的努力不够，而不是语法、文体或报告结构上的不当造成的。

通常,技术工作的结果必须以口头形式发表。对发言者来说,他必须在短时间内总结出大量的技术资料。美国化学工程师协会准备了一本很好的小册子,在这个小册子中总结了在准备口头发言时要记住的一些要点,并且指出使用幻灯片或其他直观辅助手段是特别好的方法。Atwood^[8]、Fiesch^[16]和Weaver^[51]的教科书中提供了准备和进行口头发言的更全面和实用的参考资料。

总 结

前述部分简要地说明了设计工程师在他的工作实践中所接触的几个重要问题。讨论过的要点指出了为成功的完成设计工作必须要经过各种类型的正式训练。此外还提出了解决设计问题的特殊的,经证明是非常有效的处理方法。特别是计算机在辅助设计计算中的适当应用,要求人们应用更多的工程才能去研究和分析计算结果。下面的章节将提供一系列实际应用的例子,这些例子在工业设计的许多重要方面都具有实际的工业价值。

符 号

a	内表面面积
D	扩散系数
D_p	催化剂孔隙直径
f	摩擦系数
j_D	传质 j 因子
j_H	传质 j 因子
k_L	液相传质系数
N	叶轮旋转速度
N_{Re}	雷诺数
V_s	表观主体速度
μ	动粘度
$\Delta\rho$	固体和液体间的密度差

参 考 文 献

1. American Chemical Society, Chemical Marketing in the Competitive Sixties, Advances in Chemistry Series, No. 24, Washington, D. C. (1959).
2. American Institute of Chemical Engineers, Venture Analysis, A. I. Ch. E. Publication Department, New York (1960).
3. American Institute of Chemical Engineers, Guide for Writers and Speakers, A. I. Ch. E. Publication Department, New York (1967).
4. Aris, R.S., and R.D. Newton, Chemical Engineering Cost Estimation, McGraw-Hill Book Co., Inc., New York (1955).
5. Aris, R., The Optimal Design of Chemical Reactors, Academic Press, New York

(1961).

6. Aris, R., Introduction to the Analysis of Chemical Reactors, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, N.J. (1965).
7. Atkinson, A. C., Chem. Eng. 73, No. 10, 149 (1966).
8. Atwood, R. L., When You Talk, Atwood Corporation, Melrose, Mass. (1959).
9. Bare, B. M., Chem. Eng. Progr. 61, No. 10, 26 (1965).
10. Beattie, R. D., and J. E. Vivian, Chem. Eng. 60, No. 1 (1953), reprinted in reference 12, p. 24.
11. Bradley, J. W., Chem. Eng. Progr. 61, No. 10, 15 (1965).
12. Chilton, C. H., Cost Engineering in the Process Industries, McGraw-Hill Book Company, Inc., New York (1960).
13. Craver, J. K., Chem. Eng. Progr. 61, No. 10, 24 (1965).
14. Denbigh, K. G., The Principles of Chemical Equilibrium, Cambridge University Press, Cambridge (1961).
15. Denbigh, K. G., Chemical Reactor Theory, Cambridge University Press, Cambridge (1965).
16. Flesch, R. The Art of Plain Talk, Harper Brothers, Inc., New York (1946).
17. Freund, R. A., Chem. Eng. 73, No. 3, 70 (1966).
18. Happel, J., Chemical Process Economics, John Wiley and Sons, Inc., New York (1958).
19. Harriott, P., A. I. Ch. E. J. 8, 93 (1962).
20. Horn, F., and U. Troltenier, Chem. Ing.-Tech. 32, 382 (1960).
21. Hougen, O. A., K. A. Watson, and R. A. Ragatz, Chemical Process Principles, Part I, John Wiley and Sons, Inc., New York (1954).
22. Hunter, J. S., Chem. Eng. 73, No. 7, 111 (1966).
23. Hunter, W. G., and A. C. Atkinson, Chem. Eng. 73, No. 12, 159 (1966).
24. Kennel, W. E., Chem. Eng. Progr. 61, No. 10, 20 (1965).
25. Kobe, K. A., Chemical Engineering Reports: How to Search the Literature and Prepare a Report, Interscience Publishers, Inc., New York (1957).
26. Koehler, T. L., Chem. Eng. 73, No. 1, 81 (1966).
27. Kozinski, A. A., and C. J. King, A. I. Ch. E. J. 12, 109 (1966).
28. Kramers, H., and K. R. Westerterp, Elements of Chemical Reactor Design and Operation, Academic Press, New York (1963).
29. Lee, W., J. H. Christensen, and D. F. Rudd, A. I. Ch. E. J. 12, 1104 (1966).
30. MacMullin, R. B., Chem. Eng. Progr. 44, No. 3, 183 (1948).
31. McAdams, W. H., Heat Transmission, McGraw-Hill Book Company, Inc., New York (1954).
32. Mellon, M. G. Searching the Chemical Literature, American Chemical Society Publications, Washington, D. C. (1964).