

■ 北京大学基础课教材

化学工程基础

温瑞媛 严世强 江 洪 翟茂林 编著

HUAXUE
GONGCHENG
JICHU

北京大学出版社

化学工程基础

温瑞媛 严世强 编著
江 洪 翟茂林

北京大学出版社
北 京

图书在版编目(CIP)数据

化学工程基础/温瑞媛等编著. - 北京: 北京大学出版社, 2002.3

ISBN 7-301-05469-6

I. 化… II. ①温…②严… III. 化学工程-高等学校-教材 IV. TQ02

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2002) 第 005930 号

书 名: 化学工程基础

著作责任者: 温瑞媛 严世强 江洪 翟茂林

责任编辑: 赵学范

标准书号: ISBN 7-301-05469-6/O·0534

出 版 者: 北京大学出版社

地 址: 北京市海淀区中关村北京大学校内 100871

网 址: <http://cbs.pku.edu.cn>

电 话: 出版部 62752015 发行部 62754140 编辑部 62752021

电子信箱: zpup@pup.pku.edu.cn

排 版 者: 兴盛达打字服务社 62549189

印 刷 者: 北京大学印刷厂

发 行 者: 北京大学出版社

经 销 者: 新华书店

787 毫米×1092 毫米 16 开本 17.5 印张 450 千字

2002 年 3 月第 1 版 2002 年 3 月第 1 次印刷

定 价: 25.00 元

内 容 简 介

本书是参照综合大学应用化学和化学专业的化工基础教学大纲,并结合作者多年教学实践经验编写而成的。

本书包括流体流动、热量传递、传质分离和化学反应工程四章,每章后均附有精心选编的习题。基于本书的读者主要为理科学生,在阐述化工过程原理时,特别注意揭示化工过程的内在规律,如动量传递、热量传递和质量传递机理的相似性及类似律等。书中还注意突出工程学特有方法,如对量纲分析法等内容的介绍,详细叙述了它们的来龙去脉。本书在绪论中简介了化工过程开发知识,在传质分离一章增加了膜分离过程,并在化学反应工程的基本原理一章中增加了生化反应工程基础。书后附录中有参考文献、中英文对照的化工专业术语、习题参考答案及需要经常使用的各类附表。

本书可作为综合性大学、师范院校应用化学和化学专业的化学工程基础教材或教学参考书。



前 言

本书是根据新的理科大学化工基础教学大纲和近年教材建设会议精神,结合多年教学实践经验编写的理科大学应用化学和化学专业的化学工程基础教材。在编写中既注意了理科学生探究机理的钻研习惯,又注意突出了有别于基础理论学科的工程学特点。较以往教材增加了深度,扩充了内容。例如增加了流体粘性本质和规律的阐述,三种传递过程机理的相似性及类似律的推导,以及内外扩散对催化反应的影响等进一步揭示化工过程的内在规律。又如,重点阐述了工程学特有的方法,像对影响因素极复杂的工程实践往往无法列出数学表达式或式子太复杂无法求解而产生的量纲分析法(黑箱法),以及类似律法、流动模型法和传质单元法等,引导理科学生注意学习另一类解决问题的方法,启迪思维,开阔视野。另外,还增加了新型分离方法——膜分离过程,以及生化反应工程基础。同时,也注意将工程学的实践性和经济观点贯穿始终。书末还列了书中涉及到的化工专业术语的英汉、汉英对照表,便于学生查阅国外资料,及时学习、了解学科新动态。

鉴于学习化工过程开发知识对理科学生是重要的,但因受学时数的限制难以单独开课,我们就将其编写在绪论中,以简介给学生起到引路作用。

通过对课程内容的学习,学生不仅能对化工过程有了理性认识,而且拓展了解决问题的思路,进而了解科研成果产业化过程中可能遇到的问题和解决途径,有了和工程师合作开发的共同语言。

鉴于不同专业对课程内容的要求有所不同,授课老师可按专业要求和学时数有所侧重和详略。

本书由北京大学的温瑞媛、江洪、翟茂林和兰州大学的严世强编写,由温瑞媛主编。其中流体流动和热量传递部分由温瑞媛编写,传质分离的精馏部分和中英文对照专业术语由翟茂林编写,传质分离的其余部分和绪论由江洪编写,化学反应工程部分由严世强编写。

在本书即将面世之际,编者感谢北大原技物系历届领导,由于他们对化工课程建设的重视和支持,我们成功地开设了化工基础、工程制图课,建成并逐渐完善了实验教学基地——化工实验室,现在又编写出版了新教材,使得化工课程的建设完成了阶段任务。感谢本书责任编辑赵学范编审为本书的出版付出的辛劳。也感谢高宏成教授的热忱鼓励和叶宪曾教授的严谨审核。

由于作者水平有限,书中若有错误与不当之处,恳请读者批评指正。

编 者
2001年10月

目 录

绪论	(1)
0.1 化工技术学科的发展	(1)
0.2 化工基础课的内容和学习目的	(1)
0.3 化工过程开发	(2)
第1章 流体的流动及输送	(8)
1.1 流体概述	(8)
1.1.1 流体的特性	(8)
1.1.2 连续介质假设	(8)
1.1.3 流体的易流动性和粘性	(9)
1.1.4 定态流动和非定态流动	(9)
1.2 流体静力学	(9)
1.2.1 流体的密度	(9)
1.2.2 流体的静压强	(10)
1.2.3 流体静力学基本方程	(11)
1.2.4 流体静力学基本方程的应用	(12)
1.3 流体在管内流动的基本方程	(15)
1.3.1 流量和流速	(15)
1.3.2 连续性方程	(16)
1.3.3 柏努利方程	(17)
1.3.4 动量衡算方程	(20)
1.3.5 基本方程的应用举例	(20)
1.4 流体的流动现象	(23)
1.4.1 牛顿粘性定理与流体的粘度	(23)
1.4.2 两种流动型态和雷诺准数	(24)
1.4.3 层流和湍流的特征	(25)
1.4.4 流体流动中的剪应力和动量传递	(28)
1.4.5 边界层概念	(29)
1.5 流体在管内的流动阻力损失	(30)
1.5.1 圆形直管阻力损失计算通式	(30)
1.5.2 层流时的阻力损失	(31)
1.5.3 湍流阻力损失与量纲分析法	(31)
1.5.4 局部阻力损失	(35)
1.5.5 阻力损失计算式的应用——乌氏粘度计	(37)
1.6 管路计算	(38)
1.6.1 简单管路	(38)

1.6.2	分支管路	(39)
1.6.3	并联管路	(40)
1.7	流速和流量的测量	(41)
1.7.1	测速管	(41)
1.7.2	孔板流量计和文丘里流量计	(42)
1.7.3	转子流量计	(44)
1.8	流体输送机械	(45)
1.8.1	离心泵	(46)
1.8.2	往复泵和往复压缩机简介	(51)
1.8.3	几种化工用泵简介	(53)
	习题	(54)
第2章	热量传递	(59)
2.1	概述	(59)
2.1.1	传热的基本方式	(59)
2.1.2	传热中冷、热流体的接触方式	(60)
2.1.3	载热体及其选择	(60)
2.2	热传导	(61)
2.2.1	傅里叶定律	(61)
2.2.2	导热系数	(62)
2.2.3	平壁稳定热传导	(63)
2.2.4	圆筒壁导热	(65)
2.3	对流传热	(67)
2.3.1	对流传热机理	(67)
2.3.2	对流传热速率	(69)
2.4	传热系数经验关联式	(70)
2.4.1	以量纲分析法为基础的实验方法	(71)
2.4.2	热量和动量传递的比拟法——类似律	(74)
2.5	传热过程的计算	(79)
2.5.1	热量衡算	(79)
2.5.2	总传热速率方程	(80)
2.5.3	总传热系数	(81)
2.5.4	传热平均温度差	(83)
2.5.5	换热器传热计算举例	(86)
2.6	换热器	(89)
2.6.1	间壁式换热器	(89)
2.6.2	换热器传热过程的强化	(92)
	习题	(93)
第3章	传质分离过程	(96)
3.1	传质过程的机理及传质设备	(96)

3.1.1	传质过程的机理	(96)
3.1.2	气-液相传质设备	(103)
3.2	液体的精馏	(109)
3.2.1	双组分溶液的气-液平衡	(110)
3.2.2	精馏原理和流程装置	(116)
3.2.3	精馏过程的物料衡算与操作线方程	(118)
3.2.4	理论塔板和理论塔板数	(128)
3.2.5	板效率和实际塔板数	(134)
3.2.6	塔高、塔径和塔板压力降的计算	(135)
3.2.7	间歇精馏	(137)
3.2.8	其他精馏简介	(139)
3.3	吸收	(142)
3.3.1	吸收的气-液平衡	(143)
3.3.2	吸收过程的物料衡算	(145)
3.3.3	填料塔中吸收的计算	(146)
3.3.4	吸收过程的理论塔板数	(152)
3.3.5	化学吸收简介	(153)
3.4	膜分离	(154)
3.4.1	超滤(UF)过程的原理	(155)
3.4.2	膜分离过程的流程和操作	(156)
3.4.3	膜分离器	(158)
3.4.4	超滤的应用和主要计算	(159)
3.4.5	电渗析(ED)过程简介	(161)
	习题	(162)
第4章	化学反应工程的基本原理	(165)
4.1	概述	(165)
4.1.1	化学反应工程概述	(165)
4.1.2	化学反应工程中的基本概念	(170)
4.2	化学反应体系的量	(173)
4.2.1	化学计量方程式	(173)
4.2.2	化学反应进行的程度	(173)
4.2.3	化学反应速率	(174)
4.2.4	收率与选择性	(175)
4.2.5	等温变容反应系统	(176)
4.3	均相反应器	(178)
4.3.1	化学反应器设计的基本内容	(179)
4.3.2	化学反应器设计的基本方法	(179)
4.3.3	间歇操作的釜式反应器(IBR)	(179)
4.3.4	全混流反应器(CSTR)	(184)

4.3.5	活塞流反应器(PFR)	(186)
4.3.6	理想反应器的组合	(189)
4.3.7	均相反应器的优化选择	(193)
4.3.8	非等温反应过程	(199)
4.3.9	有关成本核算	(207)
4.4	化学反应器中的非理想流动	(208)
4.4.1	停留时间分布的定量描述	(208)
4.4.2	停留时间分布的实验测定	(210)
4.4.3	平均停留时间与散度	(213)
4.4.4	理想反应器中的停留时间分布	(216)
4.4.5	实际反应器的设计方法(流动模型)	(218)
4.5	气-固相催化反应	(222)
4.5.1	外部传质过程的影响	(222)
4.5.2	内部传质过程的影响	(225)
4.6	气-固相催化反应器	(230)
4.6.1	固定床反应器	(230)
4.6.2	流化床反应器	(234)
4.6.3	气-固相反应器的选型	(236)
4.7	生化反应工程基础	(237)
4.7.1	生化反应动力学	(237)
4.7.2	生化反应器	(242)
	习题	(248)

附录

A.	附表	(253)
A.1	常用物理量的单位和量纲	(253)
A.2	水的物理性质	(254)
A.3	饱和水蒸气表	(255)
A.4	干空气的物理性质	(256)
A.5	某些液体的物理性质	(257)
A.6	常用固体材料的物理性质	(258)
A.7	某些气体的物理性质	(259)
A.8	管壁的绝对粗糙度	(259)
A.9	管子规格(摘录)	(260)
A.10	泵规格(摘录)	(261)
A.11	管板式热交换器系列标准(摘录)	(263)
B.	重要的化工专业术语	(264)
B.1	汉英对照	(264)
B.2	英汉对照	(265)
C.	习题参考答案	(268)
D.	参考文献	(270)

绪 论

0.1 化工技术学科的发展

化工技术学科是伴随着化学工业形成和发展起来的。起初,人们对化工生产的研究仅仅是针对某种具体产品,探讨生产的最优工艺过程,这些研究逐渐形成了化学工艺学。随着化工生产的不断发展,化工产品及其工艺过程日益增多,1893年在芝加哥化学家会议上人们开始注意到:“化工、食品工业,尽管其物料不同,但都具有共同的基础”。进一步的研究发现:千变万化的化工过程,除化学反应外,都包含着许多物理操作过程,这些操作过程依其操作目的和物理原理可以归结为若干种基本过程。具有共同操作目的和物理原理的一类操作过程称为单元操作。二战之后,流化床催化裂化,丁苯橡胶合成以及原子能工程三项重大技术的崛起,生产规模的日益扩大以及非均相催化反应的广泛应用,化学动力学已不能完全解决生产中化学反应过程的实际问题,人们开始从工程的角度去研究化学反应过程的化学变化和物理影响,至1957年正式形成了化学反应工程学。可以说,单元操作概念的提出,开辟了对化工过程的共同规律和工程问题的研究,形成了化学工程学。化工单元操作及其设备的原理(化工原理)和化学反应工程学构成了化学工程学的两大支柱。

随着对单元操作物理本质的深入研究,人们把众多的单元操作归结为动量传递、热量传递和质量传递三大传递过程,并发现其内在联系,从而形成了化工传递工程学。由于化工生产日趋大型化、综合化和自动化以及系统论、计算技术的发展,化学工程学的研究已从单个单元操作扩展到整个工厂甚至整个行业的大系统,形成了化工系统工程学。近年来,化学工程学已经步入新近发展起来的生物反应工程、环境工程和系统仿真等崭新的领域。

0.2 化工基础课的内容和学习目的

化工基础课介绍的是化工技术学科的基础知识。主要内容是化学工程学的知识,对于综合性大学理科化学专业和应用化学专业没有开设其他化工类选修课的,还可以包括化学工艺学、化工过程开发、化工计算等化工技术学科的初步知识。本书以化工过程开发方法为指导,介绍流体动力过程、传热过程、分离过程和化学反应工程学。

学习本课程是为了提高学生“科研、科技开发、科技管理及分析和解决一般生产问题的初步能力”。从理科化学专业的培养规格来看,不是把学生培养成工程技术人员,而是科研、开发、教学人员,学习化工基础课是为了使他们能与工程技术人员搞好“接力”或是互相“渗透”,使他们的科研成果尽快转化为现实生产力。从这个层面上讲,学习化工基础课的目的是:

(1) 在科研工作中提高产业化意识。例如在科研的选题、研究方案中树立市场需求、经济可行性和环境保护等技术经济观点。

(2) 与工程技术人员建立共同语言。包括科研成果的表述方式和化学工程技术中的基本观点和方法,如合理简化的观点、最优化观点、衡算的方法、数学模型的方法等。

(3) 指导开发和科研工作。了解科研成果产业化过程中可能遇到的问题和解决方法。利用这些知识分析确定科研成果应用于生产时,设计的方案能否实现,如何有效利用能源以及设

备的可行性等。

另外,化学工程学的一些研究方法是理科课程中没有系统介绍的,学习本课程有助于理科学理论联系实际,避免他们的思维模式单一化,有利于全面掌握科学方法论。

0.3 化工过程开发

化工过程开发的方法提供了一种系统方法,指导我们运用化学工程学的理论和方法以及其他相关知识,进行化工新技术开发;提出了需要化学工程学解决的问题和主要任务;揭示了技术经济和工程技术的基本观点。

(一) 化工过程开发的含义和步骤

化工生产由于原料并非纯品,工艺过程受混合、传热等因素影响,以及出于其他技术和经济的考虑,与化学实验有很大差别,因此要实现工业化生产,还要做大量的研究工作。由化学科研成果到实现工业化生产的全部研究过程称为化工过程开发。在图 0-1 所示的科研成果产业化过程中,这些研究工作主要集中于“开发研究”阶段。化工过程开发工作大致可分为开发基础研究、过程研究、工程研究和技术经济评价等四个方面,其步骤如图 0-1 所示。

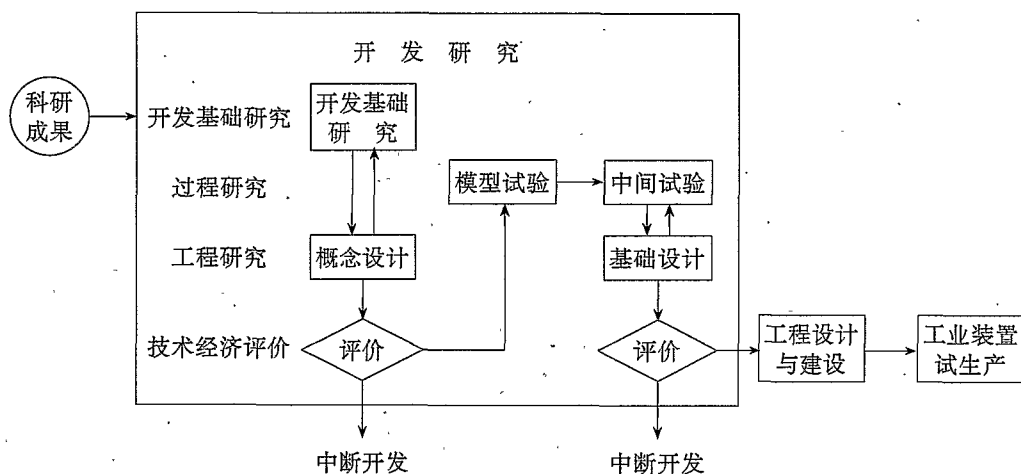


图 0-1 科研成果产业化过程流程框图

1. 开发基础研究

开发基础研究是针对化工过程开发而进行的实验室规模的初步研究。通过研究为进一步开发提供依据。其内容包括:

- (1) 初步筛选原料路线;
- (2) 了解过程特征(包括反应的必要条件、催化剂性能、副反应及其进行程度以及开发所需的热力学动力学数据和物性数据);
- (3) 归纳出适宜的工艺条件;
- (4) 拟定原料、中间产物、产品的分析方法。

开发基础研究也包括收集技术经济资料,能从文献、手册获得的经验和可靠数据资料应充分利用,从而减少试验工作量。

2. 过程研究

过程研究(process research)是按设想的工业化技术方案进行的模拟和放大试验研究。它包括小型工业模拟试验、模型试验、中间(工厂)试验等等。

3. 工程研究

工程研究包括概念设计、中间工厂的基础设计、最终生产装置的基础设计等。它们都带有研究的性质,不属于常规的工程设计。

(1) 概念设计(conceptual design)。是指对预定生产规模的生产装置提出的设计方案,是凭借对过程的概念认识提出的技术方案。

(2) 基础设计。是指针对工业装置进行的初步的设计。它是开发研究成果的主要形式,可以作为技术转让的主要技术文件。

基础设计的内容包括:工艺概述、工艺流程图、工程计算及工艺条件、带控制点的工艺流程图、物料衡量及能量衡算、设备明细表、公用工程及“三废”处理方案等等。

4. 技术经济评价

技术经济评价是化工过程开发中对开发项目的技术可行性和经济合理性的考察。开发研究正式立项前要进行“立题评价”;开始放大试验前要进行“方案论证”;完成基础设计后开始投资建设时要进行“项目评估”;开发研究的每一个中间阶段也要进行阶段性的评价。如果评价结果是肯定的,则可进行下一步研究;当评价中对过程提出质疑时,应就有关问题返回重新研究,或对开发方案提出改进意见;否则应中止开发研究工作。

技术经济评价包括技术的(工艺过程的速率和效率等即先进性,安全和容易操作控制即可靠性)、经济的(资源及其价格、产品市场、成本、生命周期等)、社会的(产业政策、法律、就业等)和生态环境的(污染程度和危害性)等几方面的内容。

化工过程开发是一个逐步放大的过程,其间,过程研究借助试验研究为开发工作提供信息,并验证放大的技术方案和设计质量,而工程研究则是依赖设计者的理论和经验提出进一步放大的决策,也是对前者的总结。当然,对于规模较小、工艺过程不太复杂、放大效应不大的精细化工产品,如染料、生物化学品、化学试剂等产品的生产,一些试验和设计步骤可以省略或简化。综上所述,化工过程开发是在技术经济评价中过程研究和工程研究交插进行,逐步放大,得到最佳设计的过程。因此,放大和优化是开发工作的核心问题,而探索化工过程共性规律和放大方法,为化工设计计算提供依据则是化学工程学的的主要任务。

(二) 过程研究的步骤和内容

过程研究旨在为开发工作提供信息依据,同时具有验证技术方案的性质。与开发基础研究的试验不同的是,过程研究侧重于探索工程因素(物料混合、扩散、传热以及杂质积累对反应过程的影响、设备型式、尺寸及腐蚀情况等)对过程的影响。在目前广泛运用的开发方法中,经验放大的方法不研究过程的内在规律,需要从各级试验中了解工艺条件和设备尺寸对过程结果的影响规律,因此更多地依赖于试验,而数学模型放大方法则是从小型试验中获得概念认识和物理描述,依据相对成熟的理论进行放大设计,对试验的依赖相对较少,有时甚至可以省略中间试验。因此对于不同的开发方法,各级试验的要求、信息内容和试验方法有很大差异。

1. 小型工业模拟试验

小型工业模拟试验是在实验室里用小型工业模型装置进行的模拟试验,习惯称为“小试”。小试通常包括以下内容:

- (1) 比较各种可能的反应器或分离提纯方法的效果(转化率、选择性、纯度等);
 - (2) 在不同条件下试验,初步优选工艺条件;
 - (3) 运用经验放大法时,应比较不同尺寸的反应器和不同物料处理量对过程结果的影响规律即“放大效应”和消除放大效应的判据;
 - (4) 用数学模型放大时,应从上述试验现象中找出识别模型的特征规律。
- 另外,有时人们把开发基础研究中的试验也称为小试。
小试通常使用实际生产中拟用的粗原料;必要时,还应对比不同原料的效果。

2. 模型试验

为建立过程的理论模型,在实物模型设备中进行的试验称为模型试验,一般是对单一过程甚至只对过程的某一特征进行模拟。采用实际物料在实际工艺条件下进行试验,称为“热模试验”,其试验内容类似于小试中的第(3)条,当规模不大时常被并入小试。用数学模型放大反应过程时,常采用与实际物料物理性质相近的惰性物料进行试验,可单独考察反应器内的物理规律,称为“冷模试验”,其目的是验证和修正数学模型。“大型冷模试验”有时可以取代中间试验。

3. 中间工厂试验

中间工厂试验简称“中试”,它是用小于工业规模的半工业化装置,对化工过程所做的一种较全面的试验考察。其考察的内容应包括:

- (1) 检验工艺流程以及工艺系统连续运转的可靠性;
- (2) 确定最优工艺操作条件(温度、压力、浓度、流量等);
- (3) 进一步考察放大效应,测试和寻求放大判据;
- (4) 用数学模型放大时,检验和修正数学模型,测取过程参数(模型参数、物性数据等);
- (5) 考察其他工程因素(设备材质和腐蚀作用、工艺过程中杂质积累等)对过程及产品的影响;
- (6) 生产一定的产品供进一步开发使用;
- (7) 考察工艺过程中产生“三废”的情况,寻找治理方法。

中试比较接近实际生产,许多小试中不易观察到的工程因素表现得比较充分,但中试耗资巨大,必须在充分论证之后系统地有计划地实施。在中试装置的设计建设前应确定中试规模、中试流程和测量控制方法问题。中试放大倍数取决于对过程规律掌握的程度,有时放大10倍都困难,需要进行多次中试,但采用数学模型放大,有报导丙烯二聚一次放大17000^①倍。中试可以是部分流程的,很多单元操作,人们已充分掌握其过程规律,可以不做中试。除非特殊需要,一般应避免全流程中试。

(三) 概念设计的内容和方法

概念设计又称为“方案设计”,是根据开发初期获得的技术经济信息对预定生产规模的装置提出的设计方案。其目的是估计开发项目实施后的技术经济效果;确定进一步开发的方案、试验内容和重点。概念设计的重点在于合理安排流程,而不是完整精确的计算,即使如此,它对于方案的评选仍有较高的价值。

概念设计的内容主要包括:方案概述、工艺过程的优化、物料衡算和能量衡算、主要工艺条

^① 陈甘棠,梁玉衡:《化学反应技术基础》,p.5,北京:科学出版社(1981)

件、工艺流程图和主要设备规格表等。有时还可以有“三废”治理初步方案,主要技术经济指标、技术经济资料以及对进一步试验的建议等。

1. 方案概述

概念设计目前尚不存在一个万能的方法,一般是先将技术方案分解成若干个因素,单独研究每一个问题,最后进行过程合成(process synthesis)即综合的过程。在所有技术因素中,原料路线和反应、分离加工的方法是技术方案首先要考虑的问题。因此方案概述中在确定生产规模、产品规格、质量的前提下,主要就是优选原料路线和原则流程。选择原料路线时要考虑到原料来源稳定、价格低、储运方便、反应步骤少等原则。如聚氯乙烯单体氯乙烯可以由电石乙炔加氯化氢,也可以由乙烯氧氯化法生产。电石乙炔法反应步骤少且后处理方便,但耗电多;氧氯化法可以利用石油化工系统中生产的大量的乙烯和副产品氯化氢,但反应步骤多,产物分离提纯麻烦。在电力和煤资源丰富的地区可以用电石乙炔法,而在石化工业发达的地区则多采用乙烯氧氯化法。原则流程的选择则应考虑反应条件不太苛刻、分离方法简便且能耗小,以及资源充分利用等。苯氯代生产氯苯时,副产物多,有二氯苯、三氯苯和未反应的苯,且产率约50%。但反应温度只需55~70℃,通过精馏又可以很好的分离产物,苯还可循环利用,因此该方案仍然是可行的。以上的工作主要是靠经验和资料分析筛选,当经验不能确定时,可以将几个选择方案列出,待优化工艺时进一步选择。一般应确定一个原料路线,其中某些单元过程可有少数几种选择,以减少优化时的工作量。

2. 工艺过程的优化

化工生产过程应该在一个最佳的状态下运行,这样才能使产业的效益最佳。最佳可以是速度快、产量高、质量好、消耗低、费用少,这些称为优化目标。它们一般是影响过程的各种因素——需要在设计中决定的变量的函数,因此称为目标函数,而这些变量称为决策变量,包括结构变量(设备的型式、尺寸)和操作变量(操作方式和操作条件)。当然,优化最终是以经济效益为目标,而其他技术经济指标如安全、污染程度等一般可当作约束条件。

工艺过程的最优化或称优化(optimization)的一般步骤如下:

- (1) 确定优化目标。各种目标有时是矛盾的,因此最终应以整个系统的经济效益为目标;
- (2) 分解优化目标并找出与决策变量的关系,写出目标函数和约束条件;
- (3) 运用数学方法给出目标函数的最优解。简单函数的最优化可以采用求极值的方法,对于复杂的目标函数有专门的最优化数学方法,可以参考有关书籍。

另外,由于过程的复杂性,有时人们对过程的机理不很清楚,也可以通过试验确定一些操作变量的最优值(参见本节)。

由于开发过程一般都要经过中试,基础设计中还要进一步优化,因此概念设计中的优化要求不高,许多不敏感的因素可以暂不优化。设计时可根据小试结果或一般原则选取。

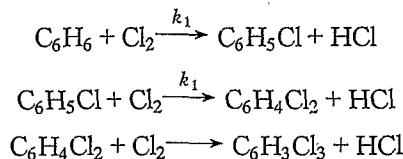
3. 物料衡算和能量衡算

物料衡算和能量衡算一般是先将各股物料的量、物料的能量变化、做功和传热量等各项算出,分别列表表示。衡算的区域可以是一个工厂、一个单元、一个设备,也可以是一个微分空间,时间可以是一年、一天等等。

通过物料衡算和能量衡算,可以了解原料、产品、中间产物、副产物的量;计算设备的热负荷、尺寸和主要性能;在生产中可以检验装置运转的情况;还可以为资源和能量的综合利用提供依据。物料衡算和能量衡算也是技术经济评价的重要依据。

【例 0-1】 苯氯代生产氯苯反应器的物料衡算和工艺优化。

苯氯代反应为连串反应：



小试了解到 Cl_2 限量时,最后一个副反应可忽略;在搅拌充分的条件下,气液接触良好,化学反应是动力学控制的,可视为均相反应;主副反应均为准一级反应,其动力学方程为:

$$-\frac{dx_A}{dt} = k_1 x_A$$

$$\frac{dx_B}{dt} = k_1 x_A - k_2 x_B$$

$$k_1 = 4.72 \times 10^{12} e^{-82000/RT}$$

$$k_2 = 2.7 \times 10^{20} e^{-136400/RT}$$

式中: x_A, x_B —分别为反应物苯和产物氯苯的摩尔分数; t —反应时间, h; k_1, k_2 —主、副反应的速率常数, h^{-1} 。

(1) 反应器的物料衡算

该反应前后分子数是不变的,故可以用物质的量 n 衡算。以 1 kmol 氯苯为基准的物料衡算列于表 0-1。

表 0-1 氯苯反应器的物料衡算

输 入		输 出	
项 目	n/kmol	项 目	n/kmol
苯	$1/x_B$	苯基	$1/x_B$
		其中:氯苯	1
		苯	x_A/x_B
		二氯苯	$\frac{1}{x_B} - \frac{x_A}{x_B} - 1$
氯气	$\frac{2}{x_B} - 2 \frac{x_A}{x_B} - 1$	氯化氢	$\frac{2}{x_B} - 2 \frac{x_A}{x_B} - 1$
总 计	$\frac{3}{x_B} - 2 \frac{x_A}{x_B} - 1$		$\frac{3}{x_B} - 2 \frac{x_A}{x_B} - 1$

(2) 工艺优化

化工生产过程常常以一年的成本,又称生产费用为优化目标,它一般可分为原料费用,操作费用(能耗、人工等)和设备费用(折旧)。在本例中,用精馏分离苯、氯苯和二氯苯(年产氯苯 3600 t),该过程能耗很高,若反应转化率低,则需要回收的苯增多,操作费用大;转化率提高,副产物的量随之增多,原料费用又会增高,因此选择适当的主副产品的量是优化的主要任务,而其他因素均为不敏感因素。

经计算该生产过程的各项费用(参考表 0-1)为:

$$\text{原料费} \left(636484 \frac{1-x_A}{x_B} - 224728 \right) \$ \cdot \text{a}^{-1}$$