

内 容 提 要

化工设计是一种创造性的劳动。设计质量的优劣对基建投资和生产成本有极其重要的、甚至是决定性的作用。设计人员需有坚实的理论基础和正确的设计方法才能胜任这一工作。

本书从工艺工程师的角度，介绍了达到当代先进水平的化工装置设计的内容和设计方法。前者包括设计概论、经济评价和过程控制，后者介绍过程模拟、分析与合成理论在设计中的应用，即怎样进行反应、分离和换热等过程的流程组织与工艺参数的优化。在取材方面着重先进、实用，注意概念与思路的叙述，避免繁复的数学推导。为便于理解，编写了大量在工业上已被实际应用的案例。

本书可作为高校化工类专业高年级学生的教学参考书，也可供有关科研、设计和生产部门科技人员参考。

前 言

编写本书的主要目的是为高校化工类专业高年级学生提供一本化工设计课程的教学参考书。

对于绝大多数化工类高校毕业生来说，到工作岗位后都会遇到与设计基本知识有关的各种问题。对于分配到设计单位的学生，需要学习设计基本概念这一点是不言而喻的，即使是分配到以应用研究和开发研究为主的单位或工厂的毕业生，同样需要熟悉设计的原理、概念和方法。

化工部新技术开发管理条例规定研究阶段的成果应以基础设计的方式提供，因为开发的目的是将科研成果转化为生产力，开发成果应包括能满足设计所需的一切技术要点。能否做到这点，除了研究人员的理论素养和是否掌握了正确的开发方法以外，了解设计的原理、概念和方法是个重要因素。

工厂的技术人员要管理好自己主管的部分必须对该部分的设计有清晰的了解，即了解流程和各工艺参数是怎样确定的，设备的能力和裕度，生产成本由哪几项构成，各工艺参数变化对原材料消耗、能耗的影响等，再结合现场实际生产情况，就能正确判断生产是否有进一步改善和提高的可能。

因此，掌握化工设计的基本概念和方法能帮助学生从高等学校走向社会时能适应新的工作岗位的需要，迅速实现从大学生向工程师的转化；而对在职的工程技术人员来说则能帮助他们提高工作的质量。

化工设计课程的目的之二是帮助学生学会综合运用各种已学过的知识，系统地分析问题和解决问题的能力，学生在二三年级已学习了化工热力学、化工原理、反应工程等各种主课。这些课程有不同的教学要求，为了清楚阐明本课程的主要原理和概念，对

不属本课程教学大纲要求的内容,其例题和习题往往作各种简化,这样做是必要和正确的。但是为了培养学生解决实际问题的能力和树立经济概念,应该有一门培养学生综合和分析问题能力的课程。它基于工程科学,但重点是应用,设计课就是这样一种综合性质的课程,因此也可以说本书的目的之一是帮助学生认识和进入真实世界,树立判断问题的能力和信心。

为了达到上述目的,必须防止两种偏向,第一种偏向是教材内容如同设计手册,学生可以通过教材了解设计的具体业务,如设计规定、资料和数据等,但没有阐明设计的本质和思考方法,仅是一本有用的工具书;另一种偏向是着重叙述新颖,但目前尚不成熟的设计方法,因而对实际的设计过程指导意义较少。为避免这两种片面性,本书致力于介绍以理论为指导,以流程模拟系统为工具,先进而实用的设计思想和方法。

本书的主要内容分为三部分。第一部分是第1、2、7章,从工艺工程师的角度,介绍了达到当代先进水平的化工装置设计的内容,使读者对设计的性质、工作内容和步骤有正确而全面的了解。第二部分是第3、4、5、6章,重点介绍流程的组织 and 参数选择,即介绍从过程合成和分析的观点出发,用化学工程各学科知识去进行结构优化和参数优化的工作,并通过案例研究具体说明。第三部分是第8章和附录,介绍设计过程常用的物性数据计算及设计文件的图面表示和一些设计规定,便于读者查阅。

本书第3章第1、2、3节由朱开宏编写;第4章由朱世才编写;第6章第2节由费志浩编写;第8章由张瑞生编写;其余各章节均由倪进方编写。

由于化工设计涉及的知识面非常广泛而编著者的知识和经验有限,书中难免有不妥和错误之处,敬请读者批评指正。

目 录

第 1 章 化工设计概论	(1)
1.1 设计要求	(1)
1.2 设计性质和过程	(2)
1.3 设计种类	(3)
1.3.1 概念设计	(5)
1.3.2 中试装置设计	(6)
1.3.3 基础设计	(7)
1.3.4 初步设计	(8)
1.3.5 详细设计	(9)
1.4 项目组织	(9)
1.5 设计内容	(10)
1.5.1 设计原则	(10)
1.5.2 设计基础	(11)
1.5.3 物料流程图	(17)
1.5.4 带控制点管道流程图	(17)
1.5.5 工艺设备设计	(21)
1.5.6 设备布置	(24)
1.5.7 管道工程	(26)
1.5.8 保温工程	(37)
1.6 安全与防护	(40)
1.6.1 毒性	(41)
1.6.2 燃烧与爆炸	(42)
1.6.3 噪声	(52)
第 2 章 经济分析与评价	(54)
2.1 装置投资估算	(54)

2.1.1	投资组成	(54)
2.1.2	估算种类	(56)
2.1.3	估算方法	(57)
2.1.4	费用指数	(65)
2.2	单元设备价格估算	(67)
2.2.1	设备质量	(67)
2.2.2	压力容器	(69)
2.2.3	塔设备	(69)
2.2.4	热交换器	(74)
2.2.5	常压贮槽	(75)
2.2.6	离心泵	(76)
2.3	总生产成本估算	(81)
2.3.1	直接生产成本	(82)
2.3.2	固定费用	(85)
2.3.3	工厂管理费	(85)
2.3.4	销售费用	(86)
2.4	税金和利润	(86)
2.4.1	产值	(86)
2.4.2	销售收入	(87)
2.4.3	利润	(87)
2.4.4	税金	(87)
2.5	经济评价的几个基本概念和准则	(88)
2.5.1	现金流通图	(88)
2.5.2	金钱的时间价值	(89)
2.5.3	静态评价方法	(98)
2.5.4	动态评价方法	(102)
第3章	反应过程	(110)
3.1	反应过程设计的评价指标	(110)
3.1.1	转化率	(110)
3.1.2	选择性	(110)

3.1.3	收率	(111)
3.2	反应器设计的基本方法	(111)
3.3	在反应系统设计之前必须掌握的信息··	(114)
3.3.1	化学计量学	(114)
3.3.2	化学热力学	(119)
3.3.3	化学动力学	(124)
3.3.4	催化反应	(130)
3.3.5	共性数据	(131)
3.4	过程性质和输出条件	(131)
3.4.1	过程连续或间歇	(131)
3.4.2	原料的预处理	(132)
3.4.3	目的产品和产品流股数的确定	(133)
3.5	反应器选型	(135)
3.5.1	反应器类型	(135)
3.5.2	反应器选型方法	(137)
3.5.3	反应器选型判据	(138)
3.6	主要工艺参数选择	(145)
3.6.1	温度	(145)
3.6.2	压力	(148)
3.6.3	组成	(149)
3.6.4	转化率	(151)
3.7	控制反应热的补充方法	(152)
3.7.1	溶剂蒸发	(152)
3.7.2	出口物料循环	(152)
3.7.3	催化剂稀释	(153)
3.7.4	惰性稀释剂	(153)
3.8	反应器网络的配置	(154)
第4章	换热过程.....	(165)
4.1	问题的提出	(165)
4.2	基本概念	(166)

4.2.1	$T-H$ 图	(167)
4.2.2	挟点及最小公用工程用量	(167)
4.2.3	栅格图	(171)
4.3	挟点和最小公用工程用量的求取	(173)
4.4	挟点特性	(175)
4.5	最小换热器个数的确定	(176)
4.6	换热网络的合成	(178)
4.6.1	热端的合成	(182)
4.6.2	冷端的合成	(182)
4.6.3	初始网络的合成	(184)
4.6.4	初始网络的调优	(185)
4.6.5	ΔT_{\min} 的选择	(187)
第 5 章	分离过程	(190)
5.1	分离过程的热力学效率	(190)
5.1.1	最小分离功	(191)
5.1.2	净功耗	(192)
5.1.3	热力学效率	(194)
5.2	分离流程的合成	(194)
5.2.1	分离方案数	(194)
5.2.2	分离方法的选择	(196)
5.2.3	分离序列的确定	(199)
5.3	工艺参数的确定	(218)
5.3.1	塔压	(219)
5.3.2	回流比	(221)
5.3.3	产品纯度或回收率	(227)
5.3.4	进料的热状态	(229)
5.4	塔型选择和实际板数的确定	(233)
5.4.1	塔型选择	(233)
5.4.2	平衡级计算结果分析	(237)
5.4.3	理论板数的决定	(241)

5.4.4	实际板数的决定	(242)
5.5	分离过程的节能措施	(243)
5.5.1	多股进料	(243)
5.5.2	侧线塔	(247)
5.5.3	中间再沸器或中间冷凝器	(251)
5.5.4	热泵	(253)
5.5.5	精馏系统之间的热集成	(258)
5.5.6	精馏系统与全过程的热集成	(262)
5.5.7	热与功的集成	(265)
第6章	流程模拟和优化	(272)
6.1	流程物料衡算的几个问题	(272)
6.1.1	计算基准	(272)
6.1.2	比率系数	(273)
6.1.3	物流的循环	(273)
6.1.4	物料的排放	(280)
6.2	流程模拟的几种方法	(283)
6.2.1	序贯模块法	(283)
6.2.2	联立方程法	(285)
6.2.3	联立模块法	(288)
6.3	流程模拟软件的用途	(289)
6.4	流程模拟软件的组成	(291)
6.4.1	执行程序	(291)
6.4.2	物性数据库	(292)
6.4.3	算法子程序	(293)
6.4.4	成本估算和经济评价	(293)
6.4.5	单元操作模块	(293)
6.5	化工过程的自由度分析	(295)
6.5.1	物流的独立变量数	(295)
6.5.2	单元模块的自由度	(296)
6.5.3	流程的自由度	(298)

6.6	流程模拟的数据输入	(301)
6.6.1	文件名称	(301)
6.6.2	单位的选择	(302)
6.6.3	组分集	(302)
6.6.4	热力学性质	(302)
6.6.5	流程	(305)
6.6.6	进料和循环物流	(305)
6.6.7	单元模块参数	(305)
6.6.8	迭代方法和收敛精度	(306)
6.7	流程模拟计算的几个注意点	(308)
6.7.1	物料流程的正确描述	(308)
6.7.2	设计变量的选择	(311)
6.7.3	设计变量数值的决定	(313)
6.7.4	逐步扩大流程计算的范围	(314)
6.7.5	有效地选择单元模块	(315)
6.8	设计优化的基本概念	(315)
6.8.1	优化问题的数学表达	(316)
6.8.2	目标函数	(317)
6.8.3	决策变量和状态变量	(317)
6.8.4	等式约束	(317)
6.8.5	不等式约束	(317)
6.9	解决最优化问题的几种途径	(318)
6.9.1	案例研究	(319)
6.9.2	参数灵敏度分析	(319)
6.9.3	直接优化法	(320)
6.9.4	减少决策变量数	(323)
第7章	过程控制	(331)
7.1	控制要求	(331)
7.1.1	抑制外部扰动的影响	(331)
7.1.2	使过程在优化的工况下操作	(333)

7.2	控制系统的设计要点及步骤	(333)
7.2.1	确定为达到设计要求所需测量的参数	(333)
7.2.2	选择控制变量	(337)
7.2.3	确定调节器的调节规律	(337)
7.3	简单调节系统	(340)
7.3.1	压力控制	(340)
7.3.2	液位控制	(343)
7.3.3	温度控制	(347)
7.3.4	流量控制	(351)
7.4	复杂调节系统	(354)
7.4.1	串级控制	(355)
7.4.2	分程控制	(355)
7.4.3	超弛控制	(357)
7.4.4	选拔控制	(358)
7.4.5	前馈控制	(360)
7.5	报警、切断和联锁	(361)
7.6	安全和操作性能检查	(362)
第8章	物性数据	(368)
8.1	沸点	(370)
8.2	临界性质	(372)
8.3	密度	(377)
8.3.1	液体密度	(377)
8.3.2	气体和蒸汽	(379)
8.4	热容	(380)
8.4.1	固体和液体的热容	(380)
8.4.2	气体	(383)
8.5	汽化潜热	(388)
8.6	熔融热和溶解热	(391)
8.7	生成热	(392)
8.8	偏心因子	(398)

8.9	溶解度参数	(398)
8.10	蒸汽压	(399)
8.10.1	安托因方程	(399)
8.10.2	用两个参照物质估算蒸汽压	(400)
8.10.3	Lee-Kesler 法	(402)
8.11	相平衡数据	(402)
8.11.1	汽液平衡数据	(406)
8.11.2	威尔逊 (Wilson) 常数的估算	(409)
8.11.3	烃类化合物的 K 值	(410)
8.11.4	高压下的汽液平衡	(410)
8.11.5	液-液平衡	(410)
8.11.6	气体的溶解度	(411)
8.12	导热系数	(411)
8.12.1	固体	(412)
8.12.2	液体	(412)
8.12.3	气体	(412)
8.12.4	混合物	(413)
8.13	粘度	(413)
8.13.1	液体	(413)
8.13.2	气体	(416)
8.14	表面张力	(417)
8.15	扩散系数	(419)
8.15.1	气体	(419)
8.15.2	液体	(420)
附录 1	设计文件	(426)
1.1	设计说明书	(426)
1.2	操作说明书	(427)
1.3	分析规程	(428)
1.4	工艺设备一览表	(428)
1.5	设备规格说明书	(429)

1.6 工艺物料流程图 (Process Flow Diagram)	(429)
1.7 带控制点管道流程图 (Piping and Instrumentation Diagram)	(431)
1.8 设备布置图	(434)
1.9 管道布置图和单线图 (Isomer)	(434)
1.10 管道等级表	(434)
1.11 配管工程说明	(435)
附图 1 常用设备图例	(437)
附图 2 常用管道附件图例	(442)
附录 2 三废排放规定	(445)
附表 2-1 车间空气中有害物质的最高允许浓度	(445)
附表 2-2 十二类有害物质的排放标准	(450)
附表 2-3 工业“废水”最高允许排放浓度 (在装置或装置处理设备排出口)	(452)
附表 2-4 工业“废水”最高允许排放浓度 (在工厂的排出口)	(453)
附表 2-5 污水中抑制生物处理的有害物质允许浓度	(453)

第1章 化工设计概论

本章从工艺工程师的角度叙述化工装置设计的主要内容和设计程序,使读者对设计的全貌有个概括的了解。

1.1 设计要求

化工装置是由各种单元设备以系统的、合理的方式组合起来的整体。它根据现有的原料和公用工程条件,通过最经济和安全的途径,生产符合一定质量要求的产品。

化工装置设计必须同时满足下列要求:

(1)产品的数量和质量指标。

(2)经济性:除了在个别情况下建设生产装置是从产品的社会效益出发外,其余的装置不仅应该有利润,而且其技术经济指标应该有竞争性,即要求最经济地使用资金、原材料、公用工程和人力。要达到这个目标,必须进行流程优化和参数优化的工作。

(3)安全:化工生产中大量物质是易燃、易爆或有毒性的。因此,设计必须充分考虑各种明显的和潜在的危險,保证生产人员的健康和安全。

(4)符合国家和各级地方政府制订的环境保护法规,对排放的废气、废水、废渣进行处理。

(5)整个系统必须可操作和可控制。

可操作是指设计不仅能满足常规操作的要求,而且也能满足开停车等非常规操作的要求,可控制是指能抑制外部扰动的影响,系统能适应和稳定。

由此可见,设计是一个多目标的优化问题,不同于常规的数学问题,不是只有唯一正确的答案,设计师在作出选择和判断时要考

虑各种经常是相互矛盾的因素,即技术,经济和环境保护等的要求。在允许的时间范围内选择一个兼顾各方面要求的方案,这种选择或决策贯穿了整个设计过程。

1.2 设计性质和过程^{[1][2]}

设计是一种创造性的劳动,它是工程师所从事的工作中最有新意、最能使人感到满足的工作之一。当一项设计任务提出时,设计是并不存在的。设计师从接受任务之时开始就要根据设计要求构思各种可能的方案,经过反复比较,选择其中最佳者。

在酝酿各种方案时必须广开思路,寻找各种可能性,然后根据一系列内部和外部约束条件,排除一些不合理或不可能的方案,使需要进一步开展工作的方案数减少。

对每一个不同的设计任务其外部和内部约束条件是不相同的,外部约束条件是指不随项目具体情况变化的,无法松弛的约束条件。通常是指下列几项:

- (1)政府制定的各种法律、规定和要求。
- (2)各种自然规律。
- (3)安全要求。
- (4)资源情况。
- (5)各种必须遵循的标准和规范。
- (6)经济要求:如投资限额和投资回收期。

设计人员在外部约束条件的制约下,制订若干个可能的方案,若对这些可能的方案不加筛选就进行下一步工作,必然要浪费大量的人力和时间。因此,要根据一些原则或称为内部约束条件,排除一些不符要求的方案,得到可行的方案,这些内部约束条件是:

- (1)技术软件的来源,技术成熟程度,价格和使用条件;
- (2)材料:原材料、建设材料、关键设备供应的难易;
- (3)时间:允许和需要的设计时间;
- (4)人员:素质和数量;

- (5)产品规格;
- (6)用户的具体要求;
- (7)建厂地区的具体情况。

经过内部约束条件的筛选,最后只得到一个可行方案的情况是很少的。因此,还要对保留的少数方案进行深入的分析研究,再根据设计要求进行筛选,不断优化工艺参数和结构,得到唯一的最佳流程。若此流程经过安全和操作性能分析符合要求,此流程即为最终的工艺流程,可据此进行工程设计。整个设计过程是一个交替进行过程合成与分析,不断作出选择,修改原有设想的迭代过程,可用图 1-1 表示。进行过程合成(结构优化)和过程分析(参数优化)的思路将在第 3 章至第 5 章进行说明。

由于化工装置是一个由各种单元设备以系统的、合理的方式组合起来的整体,因此在进行过程合成与分析时必须从全系统,而不是从单元设备的角度出发,否则会得出从单元设备来看也许是正确的,但从全局来看却是不正确的结论。这一点正是化工装置(过程)设计与单元设备设计的差别,前者不仅要求设计人员掌握各单元设备的设计方法,而且还要求掌握化工系统工程的基本概念。还需要说明一点的是:在进行参数优化和结构优化的过程中,必须求解一组表征各单元过程中发生的物理、化学现象的数学表达式,即物料平衡、能量平衡、相平衡和速率方程。在通常情况下,这些方程是非线性的,其变量有连续型,也有离散型。要求解这样一个优化问题,如果直接采用数学方法求解,有时是极其困难,甚至是不可能的,必须进行系统分解和简化数学模型,或采用案例研究等方法进行优化。详见第 6 章。

1.3 设计种类

从一个新产品或新工艺的试验研究开始到进行工厂建设为止,需要进行两大类设计:

第一类是新技术开发过程中的几个重要环节,即概念设计、中

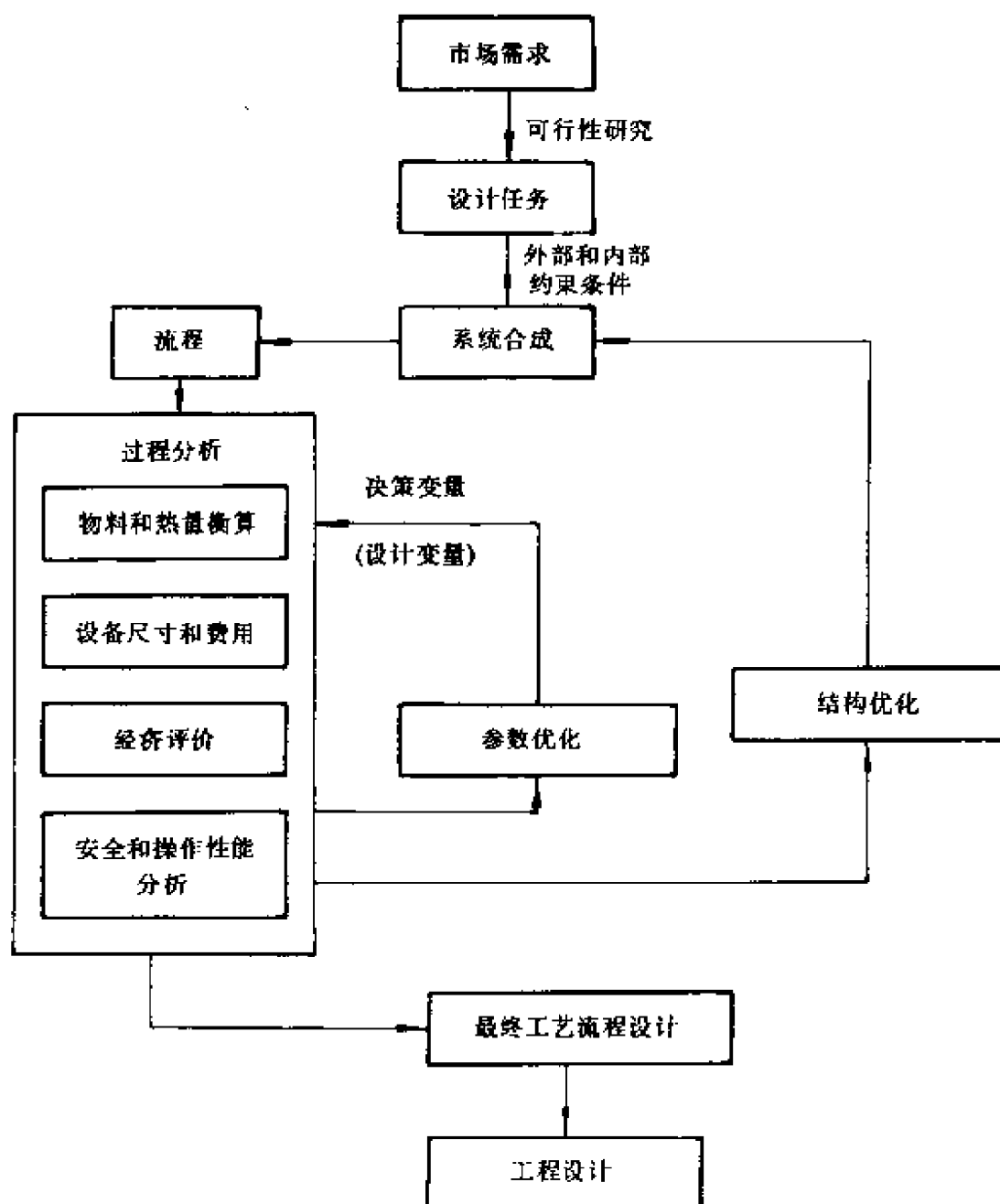


图 1-1 设计过程和内容
(本图参考了文献[2])

试设计和基础设计,这一类设计由研究单位的工程开发部门负责进行。若研究单位设计力量不足,可以委托设计单位,或与设计单位合作进行。

第二类是工程设计,包括初步设计和详细设计,这两种设计是基本建设计划和实施的依据,由设计单位负责进行。

1.3.1 概念设计

概念设计为工程研究的一个环节,它是在应用研究进行到一定阶段后,按未来的工业生产装置规模所进行的假想设计。它的工作内容主要是根据研究提供的概念和数据,确定流程和工艺条件以及主要设备的型式和材质、三废处理措施等,最终得出基建投资和产品成本等主要技术经济指标。

一般情况下,概念设计在中试以前进行。通过概念设计可判断研究的工艺条件是否合理,数据是否充分,在这个基础上提出:

(1)对开发项目进行初步的经济评价,以确定技术路线的合理性和改进方向;

(2)小试需要补充的试验内容和课题;

(3)有无必要建立中试装置,确定中试的规模、范围和必须通过中试解决的问题和取得的数据。

若概念设计在中试以后进行,其内容主要还是确定流程和工艺条件,但其目的则是对中试结果进行进一步的技术经济评价,确定该项目工业化的可能性和需补充研究的内容。若结论是肯定的,概念设计所确定的流程和工艺条件可作为下一阶段设计工作的基础。

因此,概念设计是实现设计与研究的早期结合,一般工程经验与研究对象的特性相结合的一种好方式。通过概念设计,可以及早暴露研究工作中存在的问题和不足之处,从而能及时解决问题,缩短开发周期。

从上述概念设计的内容和要求可知从事概念设计的人员应既要有工程经验,又要熟悉研究业务,能掌握开发过程的全局。这样

才能对基础研究和过程研究提出既不遗漏,又不过分苛刻或不必要的要求,使研究和设计人员在整个开发过程中协调地开展工作。

1.3.2 中试装置设计

当某些开发项目不能采用数学模型法放大,或者其中有若干研究课题无法在小试中进行,一定要通过相当规模的装置才能取得数据或(和)经验者才需进行中试。

中试装置的主要任务是:

- (1)验证基础研究得到的规律。
- (2)考察从小试到中试的放大效应。
- (3)研究一些由于各种因素没有条件在实验室进行研究的课题。
- (4)进行新设备、新材料、新仪器、新控制方案的试验。

中试装置的设计应注意下列各点:

(1)中试装置的规模在满足下列条件下应尽量小,只要满足下述两点:

- ①能满足各项试验任务的要求。
- ②不因规模过小而引起设备、仪表或管子附件选型方面的困难。

(2)中试装置的地点应力求选在有同类生产装置的老厂内以节省中试的原料和辅助材料费用。

(3)力求避免全流程试验,根据试验内容建设必要的相应设施。

(4)中试装置的流程和设备结构在形式上不一定要与工业装置完全相同,但必须在实质上反映工业装置的特性和规律,能得到基础设计所需的全部数据,使得工业装置投产时不会出现没有预计到的问题。

中试装置设计的内容基本上和工程设计相同,但由于规模小,若施工安装力量较强,可以不出管道、仪表、管架等安装图纸。

1.3.3 基础设计

基础设计是一个完整的技术软件,是整个技术开发阶段的研究成果。它的质量优劣,体现了研究开发工作的水平。在一般情况下,应在研究内容全部完成并通过鉴定后进行。

基础设计的内容应包括将建设的生产装置的一切技术要点,合格的工程设计人员应根据基础设计完成一个能顺利投产,达到一定产量和质量指标的生产装置。根据 1984 年化工部和 1989 年中国石油化工总公司制订的新技术开发管理条例,其主要内容如下:

(1)设计基础。

设计依据,技术来源,生产规模、年操作小时、原材料规格、辅助材料要求、产品规格及界区条件,公用工程规格等。

(2)工艺流程说明。

详细说明工艺生产过程,主要工艺特点,反应原理及工艺参数和操作条件等。

(3)物料流程图与物流表。

(4)带控制点管道流程图。

包括管道流程及控制方案,并对特殊管线的等级和公称直径提出要求。

(5)设备名称表和设备规格说明书。

①设备名称表和台数。

②非标设备简图、表示设备性能的主要数据、设备的操作温度及压力、建设性意见及材料选择要求。

③对关键及有特殊要求的设备提出详细的结构说明,设备结构条件图及防腐要求等。

(6)对工程设计的要求。

①对土建的要求。

②对主物料管道、特殊管道及阀门的材质和设计安装提出要求。

③对工程设计的一些特殊要求。

(7)设备布置建议图(主要设备相对位置图)。

(8)装置的操作说明。

①开停车过程说明,

②操作原理及故障排除方法,

③分析方法及说明。

(9)装置三废的排放点、排放量、主要成分及处理方法(根据需要可对三废处理单独提出基础设计)。对工业卫生、生产安全的要求。

(10)自控设计说明。

介绍流程中主要控制方案的原则,控制要求,控制点数据一览表,主要仪表选型及特殊仪表技术条件说明。

(11)消耗定额。

(12)有关的技术资料,物性数据等。

(13)安全技术与劳动保护说明。

说明装置危险区的划分,列出所处理介质的特性和允许浓度,为安全生产,事故处理及劳动保护应设置的特殊措施。

1.3.4 初步设计

初步设计的任务是根据基础设计结合建厂的具体条件作出工程设计阶段的主要技术决定。在国外,工厂建设者根据初步设计得出的经济评价最终决定是否建设该项目;在国内,权力机关(或委托单位)根据初步设计审查该项目是否先进、落实和可靠,审查的重点是:

(1)各种技术决定是否先进、可靠。

(2)各种设计标准,例如关于生活和辅助生产设施、定员、三废排故的设计标准是否符合国家和各级政府的规定。

(3)投资、成本、利润、定员和占地等主要指标是否符合设计任务书的规定。

(4)资金、原料、燃料、关键设备、建筑和安装材料的来源和运

输是否落实。

若以上问题都得到肯定的结论则初步设计通过,作为开展施工图设计的依据。

初步设计的具体内容请参考附录一“设计文件”。

1.3.5 详细设计

详细设计的任务主要是:

(1)设计各专业进行工程建设和生产所需的一切施工图和文件。

(2)编制精确的投资估算。

(3)根据设备规格说明书的要求落实设备制造单位或者直接订购设备。

详细设计的具体内容同样请参考附录一,“设计文件”。

1.4 项目组织

基础设计是个技术软件,因此它的内容局限于装置工艺过程的技术秘密和诀窍。但工程设计是将基础设计转化成工业装置建设所需的施工图,需要众多的专业协同工作,解决一系列工程问题。因此,要有合理的项目组织,但其具体结构应根据项目的范围和复杂程度而异。

大型工程设计需要的专业有工艺、管道工程、自控、设备、安装、土建、电气(强电和弱电)、给排水、三废处理、热力、运搬、机修、总图、采暖通风、工程经济等 15 个专业。每个项目设立一个项目负责人,负责项目进度、投资控制和各专业之间的协调。各专业设立分项负责人,分项负责人负责本专业的技术问题和项目进度,对中小型项目,在多数情况下项目负责人由工艺分项负责人兼任;对于大型项目则需设立专职的项目负责人。

为了保证设计质量,每个专业有各专业技术负责人,负责对各个项目的重要设计内容进行审核,重大技术问题尚需由设计院总

工程师审定,这种项目和专业的双重领导体制,称为矩阵式结构。实践证明,这种结构能保证设计项目的进度和质量。

1.5 设计内容

在 1.4 节中已经说明化工装置的工程设计需要多达 15 种专业人员的协同工作才能完成,不可能有人能了解所有专业的技术细节,本节是从工艺工程师的角度出发,说明在项目和厂址确定后化工装置设计的内容和应考虑的问题,以便对设计的全貌有个总体的、概括的了解。

1.5.1 设计原则

设计方案的选择是多种因素综合的结果,常不取决于某个单一的目标,而且有很多要求是相互矛盾的,如何决定取舍常因建厂具体情况的不同而异。例如基建费用和操作费用,基建费用和操作方便生产稳定,究竟哪一个是矛盾的主要方面?前者可以通过一个合适的经济评价判据来决定,后者则取决于设计人员或用户的主观判断,无法用定量的指标来表达。从这个意义上来讲,设计不仅是一种科学技术,也是一种艺术。为了使整个设计有统一的判别策略,不因人而异,在设计开始前应确定一些设计原则:

(1)技术经济评价指标的种类和数值:这是具体方案比较的依据,例如投资回收期小于六年,投资利润率大于 15%等。

(2)要求生产的可靠程度:例如最低的小时(日)生产能力不低于公称设计能力的 95%等,由此决定设计裕量。

(3)生产能力波动的适应范围:例如要求最低操作负荷为正常操作负荷的 50%,根据这个要求决定透平压缩机的防喘振措施、塔板流体力学计算的下限等。

(4)材质使用原则:以耐腐蚀材料为例,在通常情况下耐腐蚀性能愈好的材料价格愈高。因此,究竟采用什么材质应有统一的规定。

(5)自动化水平:自动化水平的高低取决于装置的安全要求、生产要求以及控制的投资和得益。如果建厂条件是劳动力富裕而资金短缺,则不应盲目追求高自动化水平。

(6)转动设备和易磨损、易腐蚀或易结焦设备的备用原则。

设备是否备用可根据设备的平均故障间工作时间,平均修复时间,全装置的连续运转时间和利润等数据,用可靠性理论得出定量的结论。当没有可靠的数据时,应根据经验对全装置的动设备用作出统一的规定。

(7)是否要考虑发展规划。

有的设计项目因投资、市场需求和各配套装置的建设进度等原因需分期建设,若分期建设的间隔时间不长,则在第一期设计时应考虑后期建设的需要,例如在设备平面布置、单系列设备的能力和主要管道的管径等方面应留有余地,以节省总投资和减少改造工作量。

以上内容不一定全部用文字写在设计文件上,但必须在设计开始前制订完毕,在设计单位内部执行。

1.5.2 设计基础

1.5.2.1 年操作时间

年操作时间是指每年的自然日扣除大、中、小修和非正常停车时间后的实际生产时间,其数值随装置而异,具体地说和下列因素有关:

- (1)介质腐蚀性强弱。
- (2)生产过程中有无结焦、聚合现象。
- (3)设备备用系数的高低。
- (4)建厂地区管理和操作水平。
- (5)工艺成熟程度。

对于腐蚀性强或易聚合结焦而设备备用系数较低的装置,或第一次工业化的装置,采用较小的年操作日,例如 7560 时。对于工艺成熟、工况稳定、工人操作水平高的装置可取 8280 时,一般连续

化生产过程可取 8000 时。

1.5.2.2 原材料规格

化学品的浓度和纯度高时其价格也高,因此应根据工艺过程要求提出恰如其分的要求。对于原料的浓度和纯度要考虑如下因素:

(1)杂质对反应的影响:有的杂质在一定条件下会与反应物产生副反应,使收率降低和增加产品提纯的困难。

(2)杂质对催化剂的影响:是否会引起催化剂中毒或结焦。

(3)对于惰性杂质要考虑原料浓度降低后对主反应绝对速率和主副反应相对速率的影响。

(4)原料浓度对反应产物分离系统的影响。

(5)提高原料浓度和纯度所需付出的代价。

(6)若提高原料浓度,分离出的其他组分的价值。

1.5.2.3 产品规格

一个装置的产品即为另一个装置的原料,因此决定产品规格需要考虑的因素与决定原料规格需要考虑的因素相同。

1.5.2.4 原材料消耗和产品收率

对于绝大多数产品而言,占成本因素第一位的是原料消耗。因此,原料消耗应作为设计指标在设计开始前规定,然后通过合理组织流程和设定设计变量来实现这指标。

若在确定原材料消耗定额后,经过系统物料和热量衡算得到的消耗定额与原设定值不符,在流程一定的条件下,应判断原定工艺参数是否合适,若参数不合适则修改设定值,重新进行计算。若不能找到适宜的工艺参数则修改原定消耗定额,结束计算。若系统物料、热量衡算结果符合原定消耗定额则继续进行单元设备计算,根据计算结果检查原定工艺数是否合理。若不合理,修改原定消耗定额和工艺参数重新计算。整个设计过程是个反复分析计算,修改设定值,作出一系列判断的过程。为说明清楚起见,用如下框图表示上述设计程序。(图 1-2)

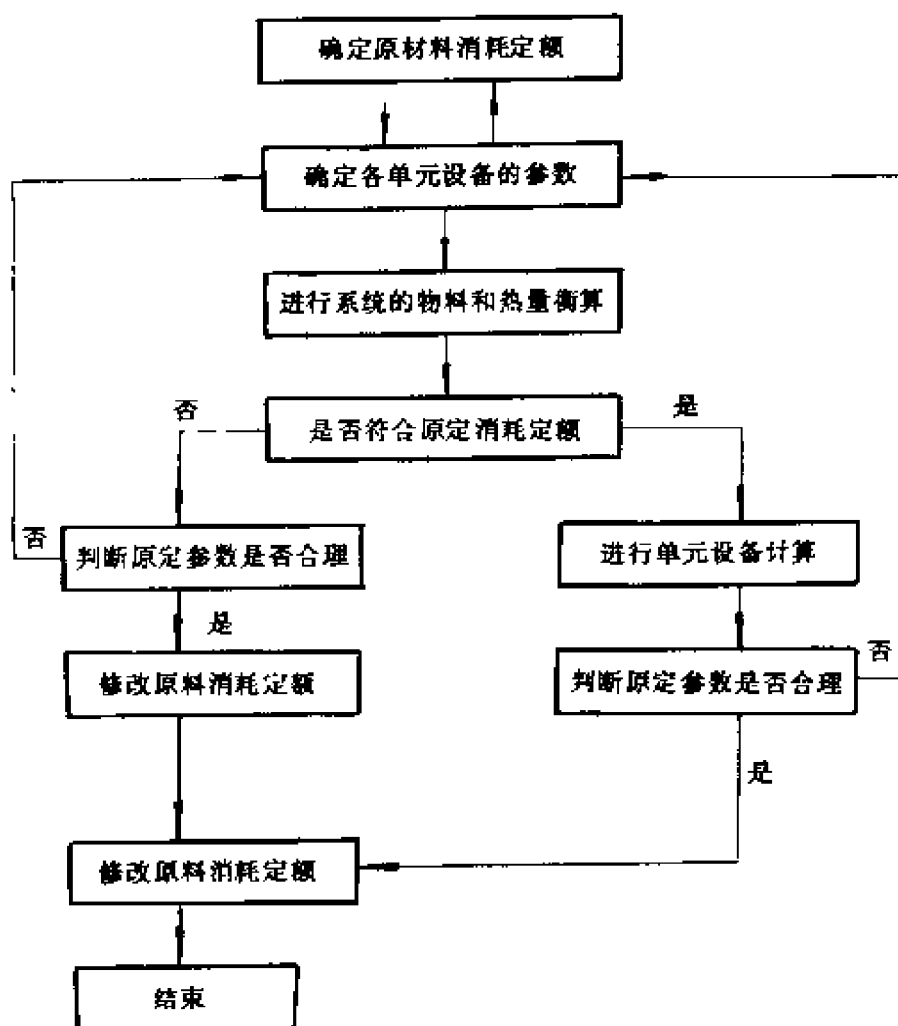


图 1-2 原料消耗定额计算

1.5.2.5 界区交接条件

生产装置占地面积的范围称为界区,界区交接条件指用管道输送的原料、产品和公用工程在界区边缘(界区线)交接处的温度、压力和相态。

公用工程交接条件由公用工程的规格决定。

产品在出界区前,大多数情况经过分离提纯处理,呈液相状态。即使用户在气态下使用,出于贮存运输的方便和节约,也以液相状态提供,只有在下列两种情况下以气相状态交接:

(1)生产过程中物料处于气相状态,用户使用也在气相状态,如氢气。

(2)沸点很低的物料,如石油裂解产生的乙烯和丙烯若以液相输送,由于冷损失不可能为零,在输送过程中这些物料会部分汽化形成两相,以至使阻力极大而无法输送。另一方面,若在输送前使其汽化,可以回收冷量,弥补部分分离提纯这些物料所需的冷量。

至于交接点处的温度压力,应满足用户的合理要求,除非有特殊困难。在一般情况下,生产装置内设有液体原料的中间贮罐以吸收上游装置微小的生产波动对本装置的干扰。原料进入的压力根据贮槽的压力、高度和管道系统阻力(包括流量计、调节阀、过滤器等)决定。

1.5.2.6 公用工程规格^①

公用工程应规定下列内容。

A 电

(1)对输入的动力电源的要求。

①回路数:根据生产性质决定,对于停电会造成生产事故的装置和对于国民经济生产有重大意义的装置采用双回路进线。

②电压:除小型化工装置外,一般化工厂用电负荷较大者采用6000V 高压电,容许电压波动范围一般在 $\pm 7\%$ 。

^① 这一节叙述的公用工程具体要求都不是规定值,作为可以参考的经验数据介绍。

③频率容许波动范围:我国电网的频率为 50 赫芝,允许波动范围一般为 $\pm 3\%$ 或 $\pm 3\%$, -5% 。

④短路容量:视具体情况而定。

(2)电气设备使用的电压。

①对于大功率电动机,例如大于 150kW;采用 6000V 高压电;中小型电动机采用 380/220V 低压电。

②正常照明用 380/220V 低压电,事故照明用 220V 直流电。

③电气部分控制、信号及继电保护用 220V 直流电。

④仪表电源用 100V 和 24V。

B 冷却水

(1)供水温度:根据气象条件决定最高供水温度,例如上海地区可取 32℃。

(2)供水压力:根据要求的回水压力加上热交换器阻力和管道系统阻力决定,一般为 0.45~0.50MPa(G)。

(3)回水温度:根据进水温度加 10~12℃温差作为回水温度。考虑到冷却塔能力和下水道密封垫片材质要求等情况,一般不超过 45℃。

(4)回水压力:对于循环冷却水通常要求回水能直接流到冷却塔塔顶,不另设接力泵,一般要求不低于 0.2~0.25MPa(G)。

(5)污垢系数:污垢系数根据水质处理费用和热交换器费用决定,大多数工程设计取污垢系数为 $0.000143(\text{m}^2 \cdot \text{h} \cdot ^\circ\text{C})/\text{kJ}$ 。

C 蒸汽

根据生产需要决定蒸汽压力和温度,常用的蒸汽压力为

超高压	11.5MPa(G)
高 压	10.4MPa(G)
中 压	1.3、1.6MPa(G)
低 压	0.4、0.5、0.6MPa(G)
工艺加热用	0.2~0.25MPa(G)

D 仪表用空气

根据常规气动仪表的要求,仪表用空气的规格如下:

(1)压力。

正 常	0.7MPa(G)
最 高	0.9MPa(G)
最 底	0.4MPa(G)

(2)露点:为了防止冬季低温时空气中水分冻结而堵塞管路,要求仪表空气必须经过干燥,露点不高于 -40°C 或 -50°C 。

E 工厂用普通压缩空气

无特殊要求,一般压力在0.6MPa(G),温度为环境温度。

F 氮气

(1)纯度 对于易燃易爆物质的生产装置在开车前和停车后要用氮气置换设备和管道中的物料。根据不同的物料爆炸极限范围,要求置换的清净程度也不同,对于不少石油化工装置,要求置换后系统中氧的含量低于0.5mol%,因此要求氮气的纯度一定要大于99.5mol%,一般为99.9mol%。

(2)压力 0.5~0.7MPa(G)。

(3)温度 无特殊要求,为环境温度。

(4)露点 等于或小于 -40°C 。

其他公用工程系统如火炬,冷冻,蒸汽冷凝液和锅炉给水等的要求与装置特性有更密切的关系,介绍某一种规格没有普遍意义,不再一一叙述。

1.5.2.7 公用工程消耗

根据系统模拟计算结果,汇总公用工程消耗,列出单位时间和单位产品的消耗量。

1.5.2.8 催化剂、干燥剂、助剂及其他各种化学品用量

根据反应器、干燥器等单元过程计算结果和工艺要求决定。

1.5.2.9 三废的来源、数量、组成和建议的处理方法

三废是指废气、废水和废渣。三废必须处理是为了保护大气、水源和土壤。

废气的来源有反应器、吸收塔、分离器等工艺设备的排放气,安全阀起跳或泄漏的排放气,火炬废气和各种加热炉及锅炉的烟

道气。

废水是指生产过程排放的有害液体,如酸性或碱性废水,含油污水,高温排水和有毒废水。

废渣指废催化剂,废干燥剂,煤渣,结焦聚合物物质等各种废固体物。

三废处理方法见1.6节。

1.5.3 物料流程图

物料流程图简称 P.F.D(Process Flow Diagram),是系统合成(结构优化)和过程分析(参数优化)的结果。它表示了流程、主要工艺操作条件、物流组成、主要设备特性和主要控制要求,是所有成品中最重要、最本质、最基础性的图纸。学习正确设计 P.F.D 是化工设计的重要内容,见第3~7章。

1.5.4 带控制点管道流程图

带控制点管道流程图简称 P.I.D(Piping and Instrumentation Diagram)。它和物料流程图虽然都称为流程图,并且表达的内容部分相同,但是两者在设计中的作用是不相同的。

PID 的工作重点顾名思义是管道流程和控制方案。虽然在 PFD 上有主要控制要求和主要工艺管道,但是补充所有开停车和正常操作所需的管道,联系操作和控制,对生产的安全性和稳定性进行分析,决定所有开停车和正常操作所需的检测、控制、报警、切断仪表和联锁系统都是 PID 的主要任务,其主要工作内容如下。

1.5.4.1 详细管道流程的确定

为了不漏掉所需要的管道阀门,必须掌握 PFD 和有关设计基础的内容,并熟悉生产操作和事故操作的一切要求和步骤,并按这些步骤,逐项进行演习,检查是否有遗漏的管道和阀门。

1.5.4.2 管道直径的确定^{[1][3][5]}

管径的选择在一般情况下是个经济问题,管道费用在装置投资中占相当比例。对流体加工厂而言,约为设备投资的 40%~

50%，占装置总投资的10%左右。若管径取得过大，将显著影响投资，但管径过小，又将使动力费用增加。要取一个管径，使生产成本最低，这个管径就称为经济管径。根据设计进度，管道的价格，有无可靠的经济数据等条件，决定究竟是根据项目的具体情况计算出经济管径，或是参考其他工业实践的经验总结，用共性规则或经验数据决定管径。

根据经验估算管径或管道流速的方法如下：

(1) 根据单位长度管道的允许压降决定流速

	压降 kPa/m	相应的流速 m/s
泵送、非粘性液体	0.5	1~3
重力流液体	0.05	
气体	管道压力的 0.02%	15~30
高压(大于 0.8MPa)蒸汽		30~60

(2) 根据流体密度决定流速

流体密度 kg/m ³	流速 m/s
1600	2.4
800	3.0
160	4.9
16	9.4
0.16	18.0
0.016	34.0

(3) 一些流体的常用流速范围

流体名称	流速范围 m/s
饱和蒸汽(大于 0.6MPa)	
管径 $D \geq 50\text{m/m}$	30~60
$D < 50\text{m/m}$	20~30
压缩空气, 氮气	
0.1~0.2MPa	8~12
$\leq 0.6\text{MPa}$	10~20
0.6~1.0MPa	10~15

工业供水	1.5~3.5
工业有压回水	0.5~2
离心泵入口物料	1~2
出口物料	1.5~3
泥浆	0.5~0.7

如有现成的经济数据,宜进行优化计算以得到结合项目具体情况的经济流速。若对数学模型作适当简化,可得最佳管径 D_{opt} 的解析式,其计算方法如下:

输送流体的年生产费用 C 由两部分组成,即固定费用 C_{inv} 和操作费用 C_{op} 。固定费用等于管道的投资费用乘以折旧率,操作费用为运转泵(压缩机)的费用。其计算式为:

$$C_{inv} = C_1 D^n L \quad (1-1)$$

$$C_{op} = \frac{C_0 m \Delta p}{\rho \eta} \quad (1-2)$$

$$C = C_{inv} + C_{op} = C_1 D^n L + \frac{C_0 m \Delta p}{\rho \eta} \quad (1-3)$$

式中 D ——管径;

L ——管长; \checkmark

n ——计算投资费用的指数,可假设为 1.3;

η ——泵的效率;

C_1 ——计算单位长度管道折旧费的系数;

C_0 ——将功率折合成金钱的系数;

m ——质量流率;

Δp ——管道阻力;

ρ ——密度。

计算管道阻力的公式为

$$\Delta p = \frac{2f\rho V^2 L}{D} \quad (1-4)$$

$$f = 0.046 Re^{-0.2} = \frac{0.046 \mu^{0.2}}{D^{0.2} V^{0.2} \rho^{0.2}} \quad (1-5)$$

式中 f ——摩擦系数;

μ ——粘度;

V ——流速。

m 和 V 的关系式为

$$m = \left(\frac{\pi}{4} D^2 \rho \right) V \quad (1-6)$$

将式(1-4)、(1-5)、(1-6)、代入(1-3),消去 Δp 、 V 和 f ,可得

$$C = C_1 D^{1.3} L + 0.142 \frac{C_0}{\eta} m^{2.8} \mu^{0.2} \rho^{-2.0} D^{-4.8} L \quad (1-7)$$

将 C 对 D 微分,并令导数等于零:

$$\frac{dC}{dD} = 1.3 C_1 D^{0.3} - 0.682 \frac{C_0}{\eta g_c} m^{2.8} \mu^{0.2} \rho^{-2.0} D^{-5.8} = 0 \quad (1-8)$$

$$D_{\text{opt}} = 0.900 \left(\frac{C_0}{C_1 \eta g_c} \right)^{0.164} m^{0.459} \mu^{0.033} \rho^{-0.328} \quad (1-9)$$

式(1-8)中的 g_c 是为了单位一致而引入的,因为 C_0 的单位是 $[(元/a(年))]/[(kg \cdot m^2)/s^3]$ 。

从式(1-9)可知质量流速 m 和密度 ρ 对管径的选择最重要,粘度和 C_0/C_1 的影响就小得多,若质量流率增加一倍,最优管径增加 1.4 倍;若密度增加一倍,最佳管径增加 1.25 倍。

也可用式(1-6)将式(1-8)变换一下,得最佳流速 V_{opt} :

$$\begin{aligned} V_{\text{opt}} &= \frac{4}{\pi \rho \left[0.900 \left(\frac{C_0}{C_1 \eta g_c} \right)^{0.164} \right]^2} m^{0.082} \mu^{-0.066} \rho^{-0.344} \\ &= C_2 m^{0.082} \mu^{-0.066} \rho^{-0.344} \end{aligned} \quad (1-10)$$

因 ρ, C_0, C_1, η 都为常数,故 C_2 为常数。从式(1-10)可得出 ρ, μ, m 对最佳流速的影响。

1.5.4.3 确定控制方案

详见第 7 章过程控制。

1.5.4.4 安全和操作性能分析

联系管道流程和控制方案,进行安全和操作性能分析,其内容包括可操作性、可控制性和可靠性检查。

可操作性是指远离常态操作条件下,例如在系统开停车和反应器和干燥器等操作周期小于年操作日的设备切换时的设计适应性。

可控制性是指外界有干扰时,例如进料组成和流量的变化,气象条件骤然变化引起的冷却水温度变化时设计的适应性。

可靠性是指经过安全检查,证实设计安全可靠。

怎样选择控制方案和进行安全和操作性能分析也请见第7章过程控制。

1.5.5 工艺设备设计

当工艺流程和参数决定后,设计人员的主要任务就是根据物料衡算和热量衡算的结果进行各单元设备的计算,例如根据精馏塔平衡级计算所得汽液相负荷进行塔板流体力学计算;根据热交换器的热负荷和物流数据进行传热面的计算。各单元设备的计算方法涉及内容极其广泛,化工原理的全部内容都是属于这一范畴的,无法用简短的篇幅叙述如此浩瀚的内容,路德维希(Ludwig E. E)的《化工装置工艺设计》(Applied Process Design for Chemical Petrochemical Plants)和 Sinnott R K 的 Chemical Engineering Vol. 6 是这个领域两本详细、全面、实用的参考书,需要时可参阅。

单元设备设计有下列几个共性问题需要考虑,下面分别介绍。

1.5.5.1 安全系数

安全系数不是一个可以任意选定的数值,它的正确选定取决于对设计中有可能出现精确度不够的计算结果和生产情况波动所引起后果的深刻认识。选用安全系数的数值得当与否是设计水平高低的标志之一。

选取安全系数要考虑下列诸因素:

(1)计算精度:包括物性数据的精度和数学模型或关联公式的精度。

(2)在操作过程中各种可能变化的因素及后果,常见的有:

- ①进口物料的流率、组成、压力、温度等参数可能有的波动。
- ②结垢情况。
- ③全年气象条件的变化。

④设备本身对工艺参数变化敏感的程度。

(3)由市场供求情况决定的增加生产能力的可能性。

(4)设备价格及其出口条件的变化对整个工艺过程的影响。

(5)装置工艺技术的成熟程度。

(6)管理和操作人员的素质。

设计是由从事不同工作的设计人员共同完成的,如果每个设计人员都在自己的成品中加一个安全系数,就会造成最终成品有过大的裕量,这不仅使投资增加,还有可能出现质量问题。因此,应对共性的问题作出统一规定。如无特殊情况,可以采表 1-1 所推荐的安全系数。

1.5.5.2 设计温度

材料的强度随温度的升高而降低,有的材料在温度低于一定值时会冷脆。因此,最大许用应力取决于温度。设计温度不一定是物料的正常操作温度,要考虑到各种生产波动和不正常操作情况下的最高温度和最低温度。例如某反应器的正常操作温度为 400°C ,而催化剂在反应器内再生时,再生温度为 550°C ,这时反应器的设计温度应是 550°C ,对于传热设备,要考虑由于传热面两侧结垢所引起的壁温变化。

1.5.5.3 设计压力

压力容器必须设计成能经受得起各种操作状态下可能出现的最大压力,设计压力不等于正常操作压力。一般根据以下两条原则,取其中大者作为设计压力:

(1)操作压力的 1.1 倍。

(2)操作压力加 0.18MPa 。

设计压力的选取也有个别特殊情况例外,如低沸点的液态烃贮罐。由于阳光的作用罐内液体的温度可能升高到 50°C ,若设计压力低于该液体 50°C 下的饱和蒸汽压,需要对贮罐外壁采取水喷淋冷却措施。为减少水喷淋冷却的麻烦,有时采取提高贮罐设计压力,按 50°C 下该液体的饱和压力设计。

对于真空设备,应按照能经受最大内外压差的要求即按能承受

受 0.1MPa 的负压的要求进行设计,除非采取有效和可靠的真空破除措施。

1.5.5.4 设备的放大设计^[8]

当过去的经验或现有的数据不足以提供可靠的设计依据时,必须从中间试验工厂取得数据,并据此放大到工厂规模。因此,设计人员必须认识放大的限度,懂得怎样选择最主要的设计变量。Peters 和 Timmerhaus^[8]提出了放大和设计各种类型的设备时所需考虑的主要因素,见表 1-1。

表 1-1 设备设计的放大倍数和安全系数

设备型式	是否需要中试	除流率以外的主要设计参数 A	决定设备尺寸的主要参数 B	B 的放大倍数	建议的安全系数%
间歇反应器	是	反应速率,平衡状况	容积,停留时间	$>100:1$	20
连续反应器	是	反应速率,平衡状况	流率,停留时间	$>100:1$	20
板式塔	否	相平衡数据,空塔流速	流率 直径	$>100:1$ $10:1$	15
填料塔	否	相平衡数据,空塔流速	流率 直径 高度与直径比例	$>100:1$ $10:1$	15
喷洒塔	否	气体溶解度	流率 输入功率	$10:1$	20
喷淋冷凝器	否	汽化潜热,温度	流率 高度与直径比例	$10:1$ $12:1$	20
管壳式换热器	否	温度,粘度,导热系数	流率 传热面积	$100:1$ $100:1$	15
再沸器	否	温度,粘度	流率 传热面积	$>100:1$ $>100:1$	15
蒸发器	否	汽化潜热,温度	流率 传热面积	$>100:1$ $>100:1$	15

续表

设备型式	是否需要试	除流率以外的主要设计参数 A	决定设备尺寸的主要参数 B	B 的放大倍数	建议的安全系数 %
间歇搅拌结晶器	是	溶解度—温度关系	流率 传热面积	$>100:1$	20
迴转过滤器	是	滤饼阻力或可渗透性	流率 过滤面积	$>100:1$ $25:1$	20
沉降槽	否	沉降速度	容积 停留时间	$>100:1$	15
沉降式离心机	否	出料方法	流率 输入功率	$10:1$ $10:1$	20 20
旋风分离器	否	颗粒尺寸	流率 筒体直径	流率 $10:1$ $3:1$	10
离心泵	否	扬程	流率 输入功率 叶轮直径	$>100:1$ $>100:1$ $10:1$	10
往复式压缩机	否	压缩比	流率 输入功率 活塞行程	$>100:1$ $>100:1$ $>100:1$	10
螺旋输送机	否	堆积密度	流率 直径 驱动功率	$90:1$ $8:1$	20
螺旋挤出机	否	剪切力	流率 输入功率	$100:1$ $100:1$	20 20
锤磨	是	物料尺寸缩小程度	流率 输入功率	$60:1$ $60:1$	20

1.5.6 设备布置^{[3][7]}

设备布置的任务是在节约用地和安全的前提下确定生产过程中各种机器设备的平面和空间位置,以满足安装、生产、维修的需

要和物料与人员流动的路线合理。布置应遵循下列原则：

(1) 必须遵守防火规范。

化工生产具有易燃、易爆和有毒等特点，应了解所处理物料的物理化学性质和由此决定的燃烧、爆炸和中毒的危险程度。在布置时应充分考虑安全要求，防止火灾和爆炸的发生。万一发生，应便于救灾，减少灾害造成的损失。

① 建筑设计防火规范定了生产和贮存物品和火灾危险类别，应根据生产的危险性分类，决定建筑耐火等级、防火间距和建筑物构件的燃烧性能及耐火极限。

② 对于一些危险物品，不准和其他物品共同贮存，并对贮存条件有特殊要求。

③ 易燃、可燃液体的贮罐容量有限制，以降低万一着火燃烧时的危害程度。

④ 同一组易燃液体贮罐之间的间距，易燃和可燃液体的贮罐与其他建筑物或设施的间距，液化石油气贮罐与其他建筑物的间距以及水槽式可燃气体贮罐和水槽式氧气贮罐与建筑物及堆场的防火间距均应根据建筑设计防火规范确定。

(2) 根据装置所在地的全年主导风向，决定各单元的相对位置。

① 为了减少火灾和爆炸的机率，应将各类明火源布置在主导风向的上风侧，而将可能散发可燃气体的贮罐或设备布置在下风侧。

② 应将有可能溢出有毒物质的装置和设备设置在下风向，控制室、办公室布置在上风向。

(3) 易燃可燃液体贮罐应尽可能布置在地势较低的地带。对于闪点小于 120°C 的物料贮罐，其周围应设置防火堤，防火堤内空间容积不应小于贮罐地上部分总贮量的一半，且不小于最大罐的地上贮量部分。防火堤内侧基脚线至贮罐外壁的距离不应小于贮罐的半径，防火堤的高度以 $1\sim 1.6\text{m}$ 为宜。

(4) 设备应尽可能露天布置，以降低建筑物的投资，而又能防

止或减少有毒或易燃易爆气体的积聚,降低灾害发生的机率。在冬天温度低于 -40°C 的严寒地区,机泵等设备可布置在厂房内;在其他地区大型往复式压缩机可布置在半敞开的厂房内,其他设备如塔、反应器、炉子、换热器等都可露天布置。

(5)按工艺流程的次序布置工艺设备,避免不必要的交叉和迂回。缩短输送物料的管道长度,以降低投资、阻力和热(冷)量损失。特别注意缩短高温、低温、高压和大直径管道的距离。

(6)在按工艺流程次序布置工艺设备的前提下,采用分区集中同类设备的方法以方便操作、维修和安全,例如把塔设备相互靠近,泵相对集中在管廊下面等。

(7)设备之间的距离和道路宽度及转弯半径应满足设备运输起吊和安装的要求。

(8)为了安全生产、巡回检查和维修的要求,静止设备之间距离不小于 0.7m ;转动设备与其他设备的距离不小于 1m 。

(9)设备的相对标高要满足工艺的需要,如满足泵的NPSH,热虹吸式再沸器的釜液循环和无压差设备之间的物料流动等要求。

(10)由于生产水平的提高或市场需要,工厂可能变化产品品种或工艺流程,设备有可能需要更新或增添,因此,工厂的布置应留有发展余地。

节约土地是工厂布置的根本要求,在满足安全生产和检修方便的条件下应尽量使布置紧凑,少占用我国按人口计算本来就不多的土地。

1.5.7 管道工程

蔡尔辅的《石油化工管线设计》详细介绍了管线设计的基本原理和管子及附件的材质和型式的选择等,内容全面而实用,对从事管道工程设计的专业人员是一本很好的参考书。而本文是从工艺工程师的需要出发,仅简单介绍管道及管件的选材和管道布置设计的注意点。

1.5.7.1 管道等级

把管道按不同的材质、压力和温度等要求分成不同的等级,编入同一等级的管道使用相同材质、型号或形式的管子和附件,这样可以统一各种管道的设计要求,而且可以用最简洁的方式在图纸上表达各种必要的信息。规定各种不同等级管道所使用的管子及其附件的材质、型号或型式要求的表称为管道等级表。

A 材料选择

对于非腐蚀性介质的管子及附件,主要根据设计温度选用相应的材质,材料的许用应力根据温度决定。管子及其附件可初步根据表 1-4 选用材质。

表 1-2^① 各种管材使用温度范围

钢 种	中国牌号	JIS (日本)牌号	ASTM (美国)牌号	使用温 度范围
低碳素钢	A3F	SGP,SS41	A120	0~250
低碳素钢	A3	STPG38, SM41B	A135Gr-A	0~350
低碳 Si 镇静钢	20	STPT38	A106Gr-B	-15~450
高温用合金钢 Cr0.5Mo	Cr0.5Mo	STPA12	A335Gr-P1	-15~450
1¼Cr0.5Mo		STPA23	A335Gr-P11	-30~500
2¼Cr1Mo	15CrMo	STPA24	A335Gr-P22	-30~600
低温用钢 3.5Ni		STPL46	A333Gr 3	-100~350
不锈钢 18Cr8Ni	0Cr18Ni9	SUS304	TP304	-196~800
18Cr12Ni+3Mo		SUS316L	TP316L	-196~800
25Cr20Ni	Cr25Ni20	SUS310	TP310	-196~900

①本表参考了某引进装置的材料使用说明。

对于阀门,除上述材料外尚可使用灰铸铁和可锻铸铁。灰铸铁价格低廉,但其使用温度必须低于 250℃,使用压力不大于 1MPa,可锻铸铁强度高,耐磨性好,抗冲击能力比灰铸铁好,可使用于温度低于 350℃,并压力不大于 1.6MPa 的场合。

法兰、螺栓和螺母的材质选择可参考表 1-3。

温度低于 0℃或高于 450℃的管道,其垫片材质选用可参表 1-4。

表 1-3^① 我国常用中低压法兰及其紧固件材料表

零 件 名 称	公称压力 MPa	在下列温度(℃)时所用钢号						
		30 以下	35 以下	40 以下	42 以下	45 以下	45~52	52~60
法 兰 HG5001 ~ 5028-58	16、25	钢 3					15MnMoV	12MoVWBSiRe
	40、64						Gr5Mo	Cr5Mo 12Cr1MoV
螺 栓 及 双头螺柱	16、25	钢 3、4	钢 25、35		40MnVB 30CrMoA		37SiMn2MoV	37SiMn2MoWVA
	40、64	钢 35、40			40MnVB 30CrMoA 35CrMoA		25Cr2MoVA	25Cr2Mo1VA
螺 母	16、25	钢 3、4	钢 20、30	钢 35、45、40Mn		40MnVB	37SiMn2MoV	
	40、64	钢 25、35		钢 35、45、40Mn		35CrMo	25Cr2MoVA	

①引自参考文献[7]。

表 1-4^① 各种垫片的使用范围

材 质	使 用 范 围		材 质	使 用 范 围	
	温度℃	压力 MPa		温度℃	压力 MPa
橡胶	-10~100	<1.0	金属垫片		根据温 度决定
石棉	-50~350	<4.5	纯铁	-10~540	
石棉+氯丁橡胶	-200~350	<4.5	合金钢 Cr-5MoCrSMo	-10~600	
石棉+四氟乙烯	-260~260	<2.0	SUS304	-200~540	
金属缠绕式垫片	-200~500	<10.0	SUS321	-200~800	

①引自内部设计资料。

B 管道壁厚

管道壁厚 t 根据下式计算：

$$t=\frac{pd}{20\sigma_d+p} \tag{1-11}$$

式中 p ——管内压力,MPa;

d ——管外径, mm;

σ_d ——在工作温度下的设计应力, 等于材料在标准试验状况下能承受的最大应力除以安全系数, 单位同 p 。

国外, 常用管子规范号 SCH (Schedule number) 来表示管子的规格, SCH 的定义是

$$\text{SCH} = \frac{p_s \cdot 1000}{\sigma_s} \quad (1-12)$$

式中 p_s ——安全工作压力;

σ_s ——安全工作应力。

例如管材的安全工作应力为 40MPa, SCH 为 40, 则可以非常方便地算出管子的安全工作压力

$$p_s = \frac{40 \cdot 40}{1000} = 1.6 \text{ MPa}$$

C 法兰选型

法兰的密封面有平面, 凸凹面和榫槽面三种, 其密封性能和价格均按次序递增。对于一般性介质可用平面法兰, 易燃易爆介质采用凸凹面法兰。由于榫槽面法兰加工制造和维修都比较困难, 仅在密封要求很高的情况, 例如对剧毒介质才采用。

法兰与管道连接方式有螺纹, 平焊和对焊。螺纹连接一般用于低压、小口径、焊接不方便的情况; 平焊法兰用于压力低于 2.5MPa 的场合。压力等于或高于 4.0MPa 时, 一律采用对焊法兰。

对于腐蚀性介质, 为了节省耐腐蚀材料, 尽量采用翻边法兰或焊环法兰, 仅对那些腐蚀性极强的介质才采用耐酸钢法兰。翻边法兰由于对加工技术要求较高, 适用于管径较大、压力较低的情况。

D 阀门选择^{[1][7]}

根据阀门的用途, 常规阀门可以分为两大类:

(1) 切断阀: 主要用于停启物料流动。

(2) 调节阀: 用于人工或自动调节物料的流量。

闸阀、柱塞、球阀 (ball valve) 常用作切断阀; 截止阀 (globe

valve)用作调节阀,蝶阀常用作大口径气体管道的调节阀。这些阀门的特性如下:

(1) 闸阀。

闸阀的密封性能较好,流体阻力小,大口径闸阀的价格较截止阀的价格低,适用于一般性介质及粘度较大的介质,由于阻力低,还适宜于用作放空阀和低真空系统阀门。要注意,闸阀不宜作调节流量用,因为当部分开启时在闸板背面产生涡流,易引起闸板的侵蚀和振动,也易损坏阀座的密封面。

(2) 旋塞和球阀。

旋塞和球阀有相似的特性,都结构简单,开关迅速,操作方便,流体阻力小,另部件少,重量轻。但球阀的密封面比旋塞易加工且不易擦伤,是比旋塞更理想的切断阀。

(3) 蝶阀。

蝶阀的结构简单,阻力低,连接尺寸小,重量轻,开闭迅速,在圆盘开启角在 $20^{\circ} \sim 75^{\circ}$ 间时具有良好的调节性能广泛用于压力在 1.6MPa(G) 以下的各种管线的启闭和调节流量。

(4) 截止阀。

截止阀具有较好的调节性能。从阀门全开到全闭,流量变化比较均匀。与闸阀相比,其密封性能较差,流体阻力较大,不能用于有悬浮固体的流体,在公称直径小于 150mm 时,其价格较便宜,适宜用于一般性介质,是一种使用广泛的阀门。

(5) 止回阀。

止回阀用于阻止物料向反方向流动,但应注意的是止回阀的密封性能并不强,不能完全阻止物料倒流。它的作用是防止物料突然大量倒流引起设备破坏或生产事故,因此在它的上游一端仍需设置切断阀。

(6) 疏水阀。

疏水阀又名疏水器、阻汽排水阀,其作用是自动排泄蒸汽冷凝液,而又能阻止蒸汽的逸出,对于本身不带过滤器的疏水器应在其进口加过滤器,在两端加切断阀,以延长使用寿命和便于

检修。

(7)隔膜阀。

隔膜阀结构简单,阀门的启闭件是一块橡胶隔膜,位于阀体和阀盖之间,介质不进入阀盖内腔,因此无需填料箱。隔膜阀结构简单,密封性能好,适宜用于温度小于 200℃、压力小于 1MPa(G)的酸性腐蚀介质。

(8)安全阀。

安全阀用在受压设备、容器或管路上,作为超压保护装置。当设备压力升高超过允许值时,阀门自动开启排放,防止系统内压力继续升高,从而保护设备免受超压破坏;当压力降低到一定值时阀门会自动关闭。但值得注意的是,阀座复位后往往不能密封,应在停车时修复。

选择那一种类型的阀门,应根据生产要求,调节性能,价格高低,阻力大小和维修是否方便等因素决定。

1.5.7.2 管道布置^[3]

在设计和绘制管道布置图时要注意下列问题:

(1)管道应力。

管道设计应避免管道对相连的设备施加超出该设备能承受的压力,引起应力的原因为:

- ①管路和设备的热膨胀;
- ②管道及其中物料、保温材料的重量;
- ③管路的振动。

后两种原因可以通过设置适当的管架的办法解决,第一个原因最重要也最复杂,一般来说管道系统总有一些弯头或回路,有一定的弹性,可以吸收部分热膨胀应力,但是对于温度变化很大、直径较大或者直管段很长的管道应进行应力分析,若设备和管道所承受的应力大于允许值,要采取增加膨胀弯头或波纹膨胀节等补偿措施。

(2)管道支架。

对于长管道,为了防止管道的挠度过大(一般不宜超过

2mm), 需要设置管道支架。支架的形式有多种, 如三角架、门字架、吊架、抱箍等。按类别分有滑动式支架和固定式支架。滑动式支架只限制管道一个方向移动而不影响另一方向的移动, 设置这种管架主要为了减少管路的热膨胀应力, 但是必须有一定的固定式支架, 以免一个方向没有固定点, 引起管道过大的移位。究竟设置固定管架还是滑动支架应和管路应力分析结合后决定。常用管架间距见表 1-6。

表 1-5(A) 当管道并排而法兰错排时的管道间距

单位: mm

公 称 直 径 D_n																								
公称直径 D_n	25		40		50		70		80		100		125		150		200		250		300		d	
	A	B	A	B	A	B	A	B	A	B	A	B	A	B	A	B	A	B	A	B	A	B	A	B
25	120	200																					110	130
40	140	210	150	230																			120	140
50	150	220	150	230	160	240																	150	150
70	160	230	160	240	170	250	180	260															140	170
80	170	240	170	250	180	260	190	270	200	280													150	170
100	180	250	180	260	190	270	200	280	210	310	220	300											160	190
125	190	260	200	280	210	290	220	300	230	310	240	320	250	330									170	210
150	210	280	210	300	220	300	230	300	240	320	250	330	260	340	280	360							190	230
200	230	310	240	320	250	330	260	340	270	350	280	360	290	370	300	390	300	420					220	260
250	270	340	270	350	280	360	290	370	300	330	310	390	320	410	340	420	360	450	390	480			250	290
300	290	370	300	380	310	390	320	400	330	410	340	420	350	440	360	450	390	480	410	510	400	540	280	320
350	390	400	330	410	340	420	350	430	360	440	370	450	380	470	390	480	420	510	450	540	470	570	310	350

- 注: 1) 不保温管与保温管相邻排列时, 间距 = (不保温管间距 + 保温管间距) / 2。
 2) 若系螺纹连接的管子, 间距可按上表减去 20mm。
 3) 管沟中管壁与管壁之间的净距在 160~180mm, 管壁与沟壁之间的距离为 200mm 左右。
 4) 表中 A 为不保温管, B 为保温管, d 为管子轴线离墙面的距离。

表 1-5(B) 当管道并排且阀的位置对齐时的管道间距

单位: mm

公称直径 D_n	25	40	50	80	100	150	200	250
25	250							
40	270	280						
50	280	290	300					
80	300	320	330	350				
100	320	330	340	360	375			
150	350	370	380	400	410	450		
200	400	420	430	450	460	500	550	
250	430	440	450	480	490	530	580	600

本表引自参考文献[3]第一版(修正)。

(3)管道坡度。

对于停止生产时要求靠重力排净积存介质的管道,敷设时应有坡度,按介质流动方向倾斜,倾斜度可取 $1/1000 \sim 3/1000$,对于粘性物料,坡度应更大一些。

(4)管道间距。

管道距离应考虑管道保温和拧紧法兰螺栓所需距离,常用管道间距见表 1-5。

(5)管道流孔。

当管道穿越楼板、屋顶或其他混凝土构件,在上建施工时应预留管孔,留孔的直径以比管道最大部位直径大 10mm 左右为宜。

表 1-6^① 水平管道支架间距
(A) 保温管内部流体为气体的情况 单位:m

公称直径 D_g	100℃	150℃	200℃	250℃	300℃	350℃
15	2.5	2.5	2.5	2.5	2.5	2.0
20	3.0	3.0	2.5	2.5	2.5	2.5
25	3.5	3.5	3.0	3.0	3.0	3.0
32	4.0	4.0	3.5	3.5	3.5	3.5
40	4.0	4.0	4.0	4.0	4.0	4.0
50	4.5	4.5	4.5	4.5	4.5	4.5
65	5.5	5.5	5.0	5.0	5.0	5.0
80	6.0	6.0	5.5	5.5	5.5	5.5
90	6.5	6.0	6.0	6.0	6.0	6.0
100	6.5	6.5	6.5	6.5	6.5	6.5
125	7.5	7.5	7.5	7.5	7.0	7.0
150	8.5	8.0	8.0	8.0	8.0	8.0
200	9.5	9.5	9.5	9.5	9.5	9.0
250	11.0	11.0	10.5	10.5	10.5	10.5
300	12.0	11.5	11.5	11.5	11.5	11.5
350	12.5	12.5	12.5	12.5	12.0	12.0
400	13.5	13.5	13.5	13.5	13.0	13.0
450	14.5	14.0	14.0	14.0	14.0	14.0
500	15.0	15.0	15.0	15.0	15.0	15.0

注:1)管子 STPG 38 SCH 40。

2)保温材料:碳酸钙,相对密度 0.22。

3)挠度 $\delta=2\text{mm}$ 。

①表 1-6 参考了引进装置的技术资料。

(B) 保温管内部流体为水的情况

单位: m

公称直径 D_g	100℃	150℃	200℃	250℃	300℃	350℃
15	2.5	2.5	2.0	2.0	2.0	2.0
20	3.0	3.0	2.5	2.5	2.5	2.5
25	3.5	3.0	3.0	3.0	3.0	3.0
32	3.5	3.5	3.5	3.5	3.5	3.5
40	4.0	4.0	4.0	3.5	3.5	3.5
50	4.5	4.5	4.5	4.0	4.0	4.0
65	5.0	5.0	5.0	5.0	5.0	5.0
80	5.5	5.5	5.5	5.5	5.0	5.0
90	6.0	5.5	5.5	5.5	5.5	5.5
100	6.0	6.0	6.0	6.0	6.0	6.0
125	7.0	7.0	6.5	6.5	6.5	6.5
150	7.5	7.5	7.5	7.0	7.0	7.0
200	8.5	8.5	8.5	8.5	8.5	8.5
250	9.5	9.5	9.5	9.5	9.5	9.5
300	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0
350	10.5	10.5	10.5	10.5	10.5	10.5
400	11.5	11.5	11.5	11.5	11.5	11.5
450	12.5	12.0	12.0	12.0	12.0	12.0
500	13.0	13.0	13.0	13.0	12.5	12.0

注: 1)管子: STPG 38 SCH 40。

2)保温材料: 碳酸钙, 相对密度 0.22。

3)挠度 $\delta=2\text{mm}$ 。

(C) 管子不保温的情况

单位:m

公称直径 D_g	气 体	满 水
15	3	2.5
20	3.5	3
25	3.5	3.5
32	4	4
40	4.5	4
50	5	4.5
65	6	5.5
80	6.5	5.5
90	6.5	6
100	7	6.5
125	8	7
150	8.5	7.5
200	10	8.5
250	11.5	9.5
300	12.5	10.5
350	13	11
400	14	12
450	14.5	12.5
500	17	13

注:1)管子:STPG 38 SCH 40。

2)挠度: $\delta=2\text{mm}$ 。

1.5.8 保温工程^[3]

1.5.8.1 保温目的

为了减少设备和管道向周围环境散发或吸收热量而造成能量损失,或者为了改善劳动保护条件 and 生产条件,或者为了提高设备的防火等级,需要在其表面进行保温。为了防止散发热量而进行的保温称为热保温;防止吸收热量进行的保温称为冷保温。

1.5.8.2 保温范围

(1)凡表面温度高于 333K 以上的管道,不管生产是否需要,都要保温以防止操作人员接触时被烫伤。

(2)表面温度低于周围空气的露点温度,若不保温将在其表面产生凝结水者。

(3)若管道内介质温度降低将使流动发生困难,或者产生冷凝液使管道产生腐蚀者皆应保温。如果加绝热层尚不能满足要求,需加蒸汽伴管后再外加绝热层。

(4)由于环境温度影响,可能使管道内介质汽化而影响生产者。

1.5.8.3 保温材料性能要求

保温材料应具有密度小,机械强度大,导热系数小,化学性能和耐火性能优良等要求。设备及管道保温技术通则 GB4277-84 对保温材料及其制品的性能作出了具体的规定,需要说明的是同一种类的保温材料其导热系数随原料和加工条件的不同而有显著差异,在使用某种保温材料时,应要求制造厂商提供明确的随温度变化的导热系数方程式或图表,使保温工程设计有可靠的依据。

1.5.8.4 保温厚度的计算公式和数据

在选择管道厚度时必须同时考虑绝热材料的费用和由于绝热而节省的能量的价值。绝热材料的费用随着保温厚度的增加而上升,但能量损失却下降,因此,对于某一种具体的绝热材料价格和能量价格,必然有一最经济的保温厚度。若时间紧迫或无可靠的经济数据时,可参考表 1-7 所列的常用保温层厚度数据,若有经济评

价数据可用常规的传热公式计算保温层厚度,计算所需的数据和给热系数的计算方法如下:

(1)保温层表面至周围空气之间的总给热系数 α_0

$$\alpha_0 = \alpha_r + \alpha_k \quad (1-13)$$

式中 α_r ——管道或保温层表面的辐射传热系数,

$\text{kJ}/(\text{m}^2 \cdot \text{h} \cdot ^\circ\text{C})$;

α_k ——管道或保温层表面的对流传热系数,

$\text{kJ}/(\text{m}^2 \cdot \text{h} \cdot ^\circ\text{C})$ 。

$$\alpha_r = \frac{C}{t_s - t_a} \left[\left(\frac{t_s + 273}{100} \right)^4 - \left(\frac{t_a + 273}{100} \right)^4 \right] \quad (1-14)$$

式中 t_s ——管道或保温层外表面温度, $^\circ\text{C}$;

t_a ——环境温度, $^\circ\text{C}$;

C ——辐射系数 $\text{kJ}/(\text{m}^2 \cdot \text{h} \cdot ^\circ\text{C})$ 。

对于薄铁皮或油漆表面 $C=18.84$;铝板表面 $C=1.17$

在室内无风情况下

$$\alpha_k = \frac{95}{\sqrt{397 + t_{cp}}} \times \sqrt{\frac{t_s - t_a}{D}} \quad (1-15)$$

式中 D ——管道或保温层外径, m ;

t_{cp} ——保温层的平均温度, $^\circ\text{C}$;

$t_{cp} = 1/2(t_s + t_a)$ 。

在室外有风的情况

当 $WD_1 < 0.8 \text{ m}^2/\text{s}$

$$\alpha_k = 14.55 \frac{W^{0.618}}{D^{0.382}} \quad (1-16)$$

当 $WD_1 > 0.8 \text{ m}^2/\text{s}$

$$\alpha_k = 15.26 \frac{W^{0.805}}{D^{0.195}} \quad (1-17)$$

式中 W ——风速,以当地气象资料为依据, m/s 。

(2)环境温度 t_a

室内:一般采用 12°C 左右。

通行地沟：一般采用 40℃ 以下。

室外保温：常年运行采用历年年平均温度，冬季运行采用历年冬季平均温度。

保冷：可采用历年最热月平均温度，或历年夏季平均温度，或夏季空调温度。工程上大多采用历年最热月平均温度。

(3) 相对湿度 $\varphi(\%)$ 及露点温度 $t_d(^\circ\text{C})$

保冷采用最热月相对湿度，露点温度 t_d 可根据选定的周围空气温度 t_a 及相对湿度 φ 计算或查表。

(4) 室外风速 $W(\text{m/s})$

保温采用冬季平均风速，保冷采用夏季平均风速。

(5) 被绝热物体的外壁温度 $t_w(^\circ\text{C})$

在绝热计算中，管壁的热阻一般忽略不计，因此，外壁温度可采用载热介质温度 $t_1(^\circ\text{C})$ 。

(6) 保温层外表面温度 $t_s(^\circ\text{C})$

保温：一般采用 $(t_s - t_a) = 15 \sim 20^\circ\text{C}$

保冷：可采用 $t_s = t_d + 1$ ； $t_s = t_d(1 + 5\%)$ 以及 $t_s - t_d + 2$ 等式计算。一般推荐采用 $t_s = t_d(1 + 5\%)$ 。

1.5.8.5 保温层厚度计算^[5]

为了简化数学模型以减少计算工作量，假设保温厚度远比管道直径小，管道内传热系数超过管外环境侧的传热系数很多倍，因此下式成立：

$$Q = \frac{A\Delta t}{\frac{X}{K} + \frac{1}{h_c}} \quad (1-18)$$

式中 Q ——能量损失， kJ/h ；

A ——保温层外表面积， m^2 ；

Δt ——温度差，即 $(t_1 - t_a) \sim t_a$ ， t_1 为物料温度， $^\circ\text{C}$ ；

X ——保温层导热厚度， m ；

K ——保温层系数， $\text{kJ}/(\text{h} \cdot \text{m}^2 \cdot ^\circ\text{C})$ ；

h_c ——环境侧传热系数， $\text{kJ}/(\text{h} \cdot \text{m}^2 \cdot ^\circ\text{C})$ ；

绝热材料的费用 $C = F_0 + F_1 X$ 元/m²

假设 年操作日为 Y , 时/年

能量的价格为 H_c , 元/kJ

绝热材料的年折旧率为 r , 元/m²

则 绝热材料费用 $= (F_0 + F_1 X) \cdot A \cdot r$

每年节省的能量为 $\Delta Q = h_c \cdot \Delta t \cdot A - \frac{A \Delta t}{\frac{X}{K} + \frac{1}{h_c}}$

目标函数

$$\begin{aligned} f &= \Delta Q \cdot Y \cdot H_c - (F_0 + F_1 X) \cdot A \cdot r \\ &= Y H_c (h_c \cdot \Delta t \cdot A - \frac{A \Delta t}{\frac{X}{K} + \frac{1}{h_c}}) - (F_0 + F_1 X) \cdot A \cdot r \end{aligned}$$

将 f 对 X 求导, 并令 $\frac{df}{dX} = 0$, 解之, 得最佳保温厚度

$$X_{opt} = k \left[\left(\frac{H_c \cdot r \cdot \Delta t}{10^6 K F_1 r} \right)^{1/2} - \frac{1}{h_c} \right]$$

1.6 安全与防护^{[1][3][7]}

安全是设计至高无上的原则, 一切违背安全原则的设计方案, 不论技术是多么先进, 经济指标多么吸引人, 都不能采用。安全事故引起的损失不仅是工厂本身财产损失和人员伤亡, 而且要引起原料供应工厂和产品加工厂的损失。每个设计人员应认识各种危险的来源和后果, 在设计的全过程都严格遵守各级政府和各主管部门制订的法规和标准规范, 并在各个方面采取预防和减少损失的措施。

在化工厂中影响人身安全的事故一般是燃烧、爆炸和中毒三类。美国石油协会 API RP500A 把危险性划分为第一次和第二次危险两种。所谓第一次危险是指系统或设备内潜在有发生火灾、爆炸等危险, 但在正常状态下不会危害人身安全或设备。例如加工或贮存可燃或易燃易爆、有毒物质的系统或设备, 属于火源的设备,

高温含氧或高压设备,由于误操作可能引起危险的系统或设备等。第二次危险是指第一次危险引起的后果,直接危害人身、设备以及建筑物或构筑物的危险,例如由第一次危险引起的火灾、爆炸、有毒物质的泄漏以及由此造成的跌倒、坠落、碰撞等危险。

第一次危险由过程特性所决定,无法改变。设计能采取的措施是:

- (1)预防由第一次危险产生第二次危险;
- (2)限制第二次危险的危害范围;
- (3)事故发生后能使人员及时疏散和得到抢救。

1.6.1 毒性

大部分化学品或多或少对人体有毒害作用,危险程度取决于物质的毒性强弱和接触毒性物质的持续时间和频率。物质的毒性可分成两类:一类是急性中毒,短期接触就会造成严重甚至致命的伤害,如氰化钾、氯气;另一类是慢性中毒,长期接触会危及人们的健康,如氯乙烯、稠环芳烃等。前者用 LD₅₀(Lethal dose),后者用 TLV(Threshold Limit Value)来表示其危害程度。

LD₅₀的定义是使 50%接受试验的动物死亡的致命剂量(经口吸入)。其单位是每 kg 试验动物质量的毒物毫克数。

一般认为 LD₅₀<25 剧毒物质
 LD₅₀>25 相对低毒物质

下面介绍几种物质的 LD₅₀值

物质名称	LD ₅₀ mg/kg
氰化钾	10
四乙基铅	35
铅	100
DDT	150
阿司匹灵	1500
食盐	3000

TLV 是指人们长期接触后,虽无明显感觉却能慢性中毒的空

气中有害物质浓度,用每立方米空气中有害物质的毫克数表示。根据我国工业企业设计卫生标准,车间内各种有毒物质的 TLV 如附录二中的表 2-1 所示。各种物质的毒性,见参考文献[9]。

设计中应采取的措施是:

(1)设备和管道的连接应尽量采用焊接方式,减少法兰,必须用法兰时采用榫槽面法兰。

(2)含有毒物质的气体排放前应经过洗涤,或者用烟囱排至高空,使其扩散后降低浓度。其排放标准见附录 2 中的附表 2-2。

(3)从装置排放含有汞、镉等毒性物质的液体,在排放前应尽量从工艺上采取措施,使其符合附录 2 中的附表 2-3 所列要求。若不可能,必须采取浮选撇油、曝气和生化处理等办法使其合格,并不得采用稀释的方法。对于含有毒性较低的硫、磷等化合物的液体,在工厂排出口的水质应符合附录 2 中的附表 2-4 所列要求。

值得注意的是污水中若有某些物质浓度过高,会抑制生化处理的能力。室外排水设计规范提出了这些有害物质的名称和允许浓度,见附录 2 中的附表 2-5。

(4)对于含有有害物质的固体,应尽可能采用燃烧的办法,使有害物质分解后排空。对于有毒而又无法改变其毒害性的废渣只能采取埋地的办法,但这种情况只能适用于极少量的废渣。若工艺过程产生大量有毒而又无法处理的废渣,则这种工艺过程应当禁止采用。

(5)设备采用露天布置。若不可能,要配备足够的通风设施。

(6)要保证毒气散发时现场人员能安全撤离,设置安全梯、紧急出口,并有急救设备、淋浴和洗眼设施。

1.6.2 燃烧与爆炸^[1]

1.6.2.1 燃烧与爆炸的原因

(1)燃烧。

物质的燃烧危险程度和四个因素有关,即闪点、自燃点、爆炸极限(燃烧)和燃烧热。

①闪点。

闪点是液体是否容易着火的标志,它是物质在明火中能点燃的最低温度。闪点等于或低于环境温度的液体称为易燃液体。

②自燃点。

自燃点是物质在没有外界引燃因素的条件下在空气中能自燃的温度。它表明该物质在空气中能加热的极限温度。

③爆炸极限。

爆炸极限是指在常温常压条件下该物质在空气中能燃烧的最高、最低浓度范围,即在该浓度范围内,火焰能在空气混合物中传播。

每种物质的爆炸极限相差很大,例如氢为 1.7%~74.2%,而汽油为 1.4%~7.6%。贮存易燃烧液体的贮罐需要充氮,或者采用浮顶结构,消除气相空间。

(2)爆炸。

爆炸是指由于巨大能量的突然释放造成的一种冲击波。燃烧和爆炸是紧密联系的,当燃烧剧烈进行时,燃烧物释放出大量能量使体积急剧膨胀而引起爆炸;由其他原因引起爆炸时,逸出的可燃性气体遇见火种就会燃烧。因此,要减少爆炸和燃烧危险就应消除引起爆炸燃烧的直接原因和间接原因。

直接原因是:

①明火:如开式的工业炉和焚烧炉,这种设备本身有明火。

②静电:非导电物质的流动产生静电而导致火花。

③电气设备如马达可能产生火花。

④设备或管道的操作压力超过设计允许值。

间接原因是反应器或加热器的温度失去控制,超过该设备的设计温度,使结构遭到破坏,或者放热副反应速度急剧增加导致爆炸。

1.6.2.2 燃烧与爆炸的危险程度估计

美国道(Dow)化学工业公司在1980年提出了一个计算燃烧和爆炸危险程度的指数,称为道(Dow)燃烧与爆炸指数,以下简称

为 F、E 指数,用以研究一个生产过程的潜在危险程度和评价所需采取的安全措施。这个指数是根据物性和生产过程的性质计算得到的,可根据指数值和表 1-7 估计生产的危险性。在评价工艺流程方案时,可以指出哪一个方案的危险程度较小。在设备布置图和带控制点管道流程图完成后,用以指导决定安全措施。F、E 指数的计算方法如下:

决定 F、E 指数的基本因素是主要工艺物料的燃烧热。道指数等于物料因子乘以物料危险性因子,再相继乘以过程共性危险因子和过程特性危险因子。

表 1-7^① 危险程度的估计

燃烧与爆炸指数	危 险 程 度
0~20	轻 微
20~40	轻
40~60	中 等
60~75	较 重
75~90	严 重
> 90	极严重

①表 1-7 引自参考文献[1]。

(1)单元的划分。

把整个生产过程分成若干个单元,每个单元作为一个独立的整体来考虑。单元的选择是根据:

- ①单元之间相距一定的距离。
- ②有围墙隔开。
- ③该单元具有特殊危险性。

(2)物料因子 MF。

物料因子的数值范围是 0 到 60,它表示在燃烧或爆炸过程中所释放能量的大小。对于非燃烧物质如水、四氯化碳,其数值为零。

对于燃烧物质其数值由下列公式计算：

$$MF = -\Delta H_c \times \frac{4.3 \times 10^{-4}}{M} \quad \text{kJ/kmol} \quad (1-17)$$

式中 ΔH_c ——物质燃烧热；

M ——摩尔质量。

例如 甲烷的物料因子，其标准燃烧热为 801700kJ/kmol

$$MF = 801700 \times \frac{4.3 \times 10^{-4}}{16} = 21.6$$

当有高活性物质同时存在时，例如氧化剂和还原剂的混合物，这时用生成热计算能量释放较合适。

若生产过程中有多种物质，则应研究每一种有足够数量能产生危险的物质的物料因子，并决定哪一种物质起决定性作用。

(3) 物料危险性因子。

物料危险性因子是考虑与生产过程中任何一种有足够数量的物质相联系的特殊危险性。这些物质是：

- ① 氧化物：在火焰中会释放出氧气。
- ② 与水作用会生成可燃性气体的物质，如碳化钙。
- ③ 能自动氧化发热的物质，如煤炭。
- ④ 可能分解，而分解时伴随爆炸的物质，如乙炔。
- ⑤ 当加热时能自动聚合的物质，如丁二烯。
- ⑥ 当保护系统失灵，在工艺过程中会起爆的物质，如硝化纤维。
- ⑦ 其他必须适当考虑的特殊危险。

(4) 过程的共性危险因子。

这是一种考虑常规化工过程危险程度的因子，要考虑的因素是：

- ① 仅有物理处理过程：若连续或间歇流动的管道内流动的是可燃性液体，那就要采用一个较大的系数。
- ② 连续反应：若反应失控不会引起反应温度的飞速上升则用较低的系数，若是放热反应，则采用系数值等于 50%。
- ③ 间歇反应：除了②所采用的系数，另加由于间歇操作而引起

的危险因素。

④多种反应：这是一个如果在同一个设备中交替进行多种反应，彼此间的污染有可能构成危险时需考虑的因素。

(5)过程的特性危险因子。

当过程在下列情况下操作时，F. E. 指数的计算需乘以过程的特性危险因子。

①真空：如果漏入空气有可能造成危险。

②在爆炸范围内操作：如果在正常操作条件下有可能在爆炸范围内操作，或者是依靠仪表控制才能避免达到爆炸范围的过程都要增加这项因素。如果过程一直在爆炸范围内操作，这个因素要取 150%。

③低温：考虑到低温可能引起结构材料的冷脆。

④高温：当操作温度高于物料的沸点、闪点、自燃点时产生的危险。

⑤高压：对于操作压力大 1.5MPa 的过程。

⑥难控制的反应：对于放热反应，很可能温度超出规定的范围。

⑦粉尘爆炸危险：对于那些设备误操作时有可能引起粉尘爆炸的过程。

⑧大于平均爆炸危险性的过程：指那些设备误操作引起的爆炸危险性比通常过程要大的过程，例如在操作温度和压力条件下含有可燃性液体的过程。当该液体自系统逸出时会迅速汽化，形成一片爆炸性云层。

⑨大量的可燃性液体：由于大量液体贮存而引起火灾危险程度增加的因素。

⑩其他：对于当邻近单元产生事故时，可能波及本单元者需要增加的系数。

表 1-8 列出了危险因素的数值作为参考，但参考值是个范围，在这范围内选用什么数值取决于设计师对危险程度的判断。

表 1-8^① 燃烧与爆炸指数计算表

(1) 物料因子	
<hr/>	
(2) 物料危险性因子	因子%, 建议值
① 氧化剂	0~20
② 与水反应产生可燃性气体	0~30
③ 自发加热	30
④ 自发快速聚合	50~75
⑤ 有分解爆炸危险性	125
⑥ 爆炸性物质	150
⑦ 其他	0~150
累加 A~G 项的百分数值 = SMH 合计值	
[(100 + SMH 合计值) × 100] × 物料因子 = SN 2	
<hr/>	
(3) 过程的共性危险因子	因子%, 建议值
① 仅有可燃性液体的物理变化过程	0~50
② 连续反应	25~50
③ 间歇反应	25~60
④ 多种反应	0~50
累加①~④项的百分数值 = GPH 合计值	
[(100 + GPH 合计值) / 100] × SN 2 = SN 3	
<hr/>	
(4) 过程的特性危险因子	因子%, 建议值
① 低压 (低于 0.1MPa)	0~100
② 在爆炸范围内或附近操作	0~150
③ 低温 1, 碳钢温度 10~-30℃, 温度 < -30℃	15 25
④ 高温 (仅用其中之一)	
1) 高于闪点	10~20
2) 高于沸点	25
3) 高于自燃点	35
⑤ 高压	
1) 1.5~20MPa	30
2) >20MPa	60
⑥ 难于控制的反应过程	50~100
⑦ 粉尘或雾状物危险	30~60
⑧ 大于平均爆炸危险性	60~100
⑨ 大量可燃性液体 (仅用其中之一)	
1) 10~25m ³	40~55
2) 25~75m ³	55~75
3) 75~200m ³	75~100
4) >200m ³	100+
⑩ 其他	0~20
累加①~⑩项百分数值 = SPH 合计值	
[(100 + SPH 合计值) / 100] × SN3 = 燃烧与爆炸指数	

①表 1-8 引自参考文献[1]。

例 1-1 请以乙烯装置中的乙炔加氢系统为例计算燃烧爆炸指数。

解:(1)单元的决定:以乙炔加氢系统及其周围的脱甲烷塔、脱乙烷塔。乙烯塔系统为一个单元。

(2)物料因子:系统中组分有氢、甲烷、乙烷、乙烯、乙炔、丙烯等。

其主要反应为 $\text{C}_2\text{H}_2 + \text{H}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4$

副反应为 $\text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_6$

把乙炔作为主要物料

$$\text{C}_2\text{H}_2 \text{ 物料因子} = \frac{4.3 \times 10^{-4}}{26.04} \times 1306000 = 21.57$$

(3)物料危险性因子:有分解爆炸危险性,取 125%。

(4)过程的共性危险因子。

②连续反应:主、副反应都为放热反应,取 50%。

(5)过程的特性危险因子

④高温:高于沸点温度,取 25%

⑤高压:操作压力为 2.5MPa 左右,取 30%

故燃烧与爆炸指数为 $21.57 \times 2.25 \times 1.5 \times 1.55 = 112.8$ 。属于燃烧与爆炸危险性极严重的生产过程,必须采取严密的安全措施。

1.6.2.3 基本安全措施^[6]

安全措施的原则是杜绝灾害产生的根源,减轻灾害造成的损失,对于所有化工厂都应采取的基本安全措施如下:

(1)防止明火的产生。

①对于开式的工业炉或焚烧炉这种有明火的设备必须根据防火规范与有易燃易爆物质或爆炸性粉尘混合物的区域保持足够的安全距离,并应将其布置在主导风向的上风侧。

②有可能产生静电的管道和设备必须接地。

③如果在正常操作情况下有可能存在爆炸物质,则必须使用本质安全型防爆马达或者把马达密封,通氮气。

若在不正常情况下有可能存在爆炸性物质,则应采用不发火花的电气设备,这种设备仅在事故情况下才产生火花。采用这种设备还是存在一定程度的危险性,但机率大大降低,要两种不正常情况同时发生才会导致火灾或爆炸。

(2)避免由于材质选择不当而引起的意外事故。

①对于易燃易爆或其他危险物质,不能采用玻璃设备,除非没有其他方案可供选择。

②对于低温设备或者露天安装于严寒地区的设备要考虑到低温可能引起结构材料的冷脆。

③对于腐蚀性介质应采用耐腐蚀材料和(或)有足够的腐蚀裕度。

(3)防止超温:金属材料的机械强度随着温度的升高而降低,因此由于某种原因使温度超过设计值时,有可能使设备结构破坏导致爆炸。在设计上应采取的措施是:

①除了正常的温度控制外,应有高温报警和极高位联锁切断控制。联锁动作可以是:

- 1)切断反应器进料;
- 2)停止加热介质;
- 3)物料紧急排放;

②备有事故冷却水系统,当停车后仍然能继续冷却。

③设备的设计温度不应按正常操作温度考虑,而应考虑恶劣操作条件下可能达到的最高温度。

④对于危险物质,采用本质上就是安全的加热介质,例如蒸汽,因为它的温度不会超过该压力下的饱和温度。使用其他加热介质时,物料的温度取决于它被加热的速率,温度不受到限制,例如电加热,是特别危险的。

(4)避免设备或管道的操作压力超过设计允许值,可采取的措施是:

①设置压力调节阀,自动调切系统的压力。

②设置安全阀,当系统压力超过某一指定值时,安全阀自动起

跳,当压力恢复后自动复位。安全阀的设定压力取设备的设计压力。

③设置紧急动作阀门,当压力超过一极限值后,紧急动作阀门作用。全程打开阀门泄压。

④设置爆破膜:当压力超过一定值时,爆破膜破裂,使系统内压力迅速降低。

由于爆破膜在爆破后系统必须停车,因此除非系统内介质有腐蚀性,或者系统可能爆炸必须用爆破膜,在一般情况下,为预防由于操作控制失误引起压力偏离设计值应采用前三种措施。

(5)设计应采取下列措施,使火灾或爆炸万一发生时能减轻其危害程度。

①设置充分的、有保证的消防水源,并有足够容量的消防水和喷淋用水的排水系统。

②保护管架和电缆槽免受火灾的威胁,采取防火披覆。

③进出口主要物料管线加截止阀。

④当仪表动力源(仪表空气或电源)失效时,要使调节阀处于安全所需要的开闭状态。

⑤设置处理易燃可燃排放物料的火炬系统。

⑥对于防爆车间,其建筑物应有足够的泄压面积,并采用轻质屋顶等防爆措施。

⑦对危险设备要保持足够的安全距离,并根据需要采取隔离措施,如防爆墙、上围、筑堤、全部遥控操作等。

(6)事故发生时为了便于人员疏散,应采取以下措施:

①将控制室布置于上风向。如界区内有易燃易爆物质,控制室应采取正压密闭通风。

②对占地面积 3000m^2 以上的设备区周围应设置宽度不小于 5m 的直通式或环形通道,以保持紧急用车辆例如救护车和消防车的通道畅通。

③对建筑物、构筑物 and 平台等面积超过一定数值者均需有两个或两个以上的进出口,使一个通道因火焰或毒气而不能通行时

人员能及时从另一个通道疏散。

(7)其他安全措施

①温度高于 333K 的设备和管道的表面必须加设防烫伤隔热层。

②对于有自聚倾向的反应器应加阻聚剂,并设置冷却、泄压、高温报警措施。

③对于接近爆炸范围的操作:采取安全泄压措施或者使容器能承受爆炸压力,并设置分析控制仪表以及置换和惰性气稀释系统。

1.6.2.4 安全措施的选择

上文 1.6.2.3 节所述措施皆属于设计应该遵守的规定。表 1-9 所列措施属于根据生产的危险程度加以选择的措施。

表 1-9^① 根据生产危险程度决定的安全措施

燃 烧 与 爆 炸 指 数						
	0~20	20~40	40~60	60~75	75~90	>90
防火披覆	1	2	2	3	4	4
水喷淋						
(1)单方向	1	2	3	3	3	4
(2)全方位	1	2	3	3	4	4
(3)水帘	1	1	2	2	2	4
仪表控制						
(1)温度	1	2	3	3	4	4
(2)压力	1	2	3	3	3	4
(3)流量	1	2	3	4	4	4
紧急排放控制	1	1	2	3	3	4
内部爆炸保护	1	2	3	3	4	4
可燃气体报警						
(1)信号报警	1	1	2	3	3	4
(2)联锁动作	1	1	2	2	3	4

续表

燃 烧 与 爆 炸 指 数						
	0~20	20~40	40~60	60~75	75~90	>90
遥控	1	1	2	3	3	4
筑堤	1	4	4	4	4	4
防爆墙、土围隔离	1	1	2	3	4	4

①本表引自参考文献[1]。

表中 1——表示可采取也可不采取的措施,2——表示建议采取,

3——表示推荐采取, 4——表示需要采取。

1.6.3 噪声^{[1][3]}

噪声对人体的健康和安全都是有害的,长期处于高强度噪音的环境能损坏一个人的听觉。对于强度不高的噪声,能使人心烦和疲劳。

噪声用分贝数来表示。

当噪音达到 90 分贝以上时会损害人的听觉,一般情况下,当分贝数高于 80 时,应对耳朵采取保护措施。工厂中产生噪声的来源可能是压缩机、鼓风机、炉子的烧嘴及放空阀。离开上述声源一米处,其噪音可能高到 90~110 分贝,压缩机的噪音甚至高达 120 分贝。在订购设备时除了对制造厂商提出最高允许噪音的要求外,还可以采取加消噪音材料、隔离声源和限制最高流速等措施。我国现行工业企业允许噪声值见表 1-10。

表 1-10^① 新建、扩建、改建企业允许噪声参照值

每个工作日接触噪声时间(时)	允许噪声(分贝)
8	85
4	88
2	91
1	94
最高不得超过 115 分贝	

①本表引自参考文献[3]所列设计规范。

参 考 文 献

1. Sinnott R K. Chemical Engineering. Vol 6. London Pergamon Press, 1983
2. Westerberg A W, Hutchison H P, Motard R L. Process Flowsheeting. Cambridge Univer Press, 1979
3. 上海医药工业设计院 化工工艺设计手册。
4. Ulrich G D. A Guide to Chemical Engineering Process Design and Economics. John Wiley & Sons Inc, 1984
5. Edgar T F, Himmelblau D M. Optimization of Chemical Processes. McGraw-Hill Book Company, 1988
6. 路德维希 (Ludwig E E). 化工装置工艺设计 (Applied Process Design For Chemical and Petrochemical Plants). 第二版. 化学工业部化工设计公司翻译. 北京: 化学工业出版社, 1983
7. 蔡尔辅. 石油化工管线设计. 北京: 化学工业出版社, 1986
8. Peters, Timmerhaus K D. Plant Design and Economics For Chemical Engineers. 3rd ed. McGraw-Hill Book Company New York: 中国化工咨询服务公司译. 1980
9. 曹炳炎. 石油化工毒物手册, 北京: 中国劳动出版社, 1992

第2章 经济分析与评价

在1.2设计性质这一节中已经说明：在设计过程中设计师需要作出大量决策，例如是否应该建设生产装置，装置的规模以及某个具体工艺方案。初步决策的依据通常是某个经济指标，最终的决策还必须考虑安全以及对环境和社会的影响等不能用金钱定量表示的因素，这种决策过程常称经济分析与评价。只有对上一阶段的经济评价作出肯定的结论后，才能继续开展下一步的工作，否则项目就要中止。

进行经济分析与评价时必须确定下列诸要素：

- (1)投资、操作费用、产品数量和价格；
- (2)在项目寿命期内上述因素的变化情况；
- (3)评价采用的经济指标。

2.1 装置投资估算

2.1.1 投资组成^[1]

投资是建设一个工厂或生产装置，并使之投入生产和运行下去所需的资金，投资由固定资本和流动资本两部分组成。

2.1.1.1 固定资本

固定资本是指工厂(或装置)从设计开始到投入生产为止所需的一切费用，它包括下列费用。

A 直接费用

直接费用即为建设所需的设备材料和劳动力费用，具体的有如下九项：

- (1)设备及其备品备件的采购费用。以此费用为100%作为下

列各项费用的基准。

(2)设备安装:约为 39%~47%。

(3)控制仪表及安装:约为 9%~18%。

(4)管道工程:包括管道、管件、管架、保温和阀门,约为 16%~66%。

(5)电气工程:包括电动机、开关、电源线、配电盘、照明和接地等,约为 8%~20%。

(6)土建工程:包括办公楼、食堂、车库、仓库、消防、通讯和维修等费用,约为 15%~30%。

(7)场地建设:包括场地清理和平整、道理、铁路、码头、围墙、停车场和绿化等,约为 10%~20%。

(8)公用设施费用:包括所有生产、分配和贮存公用工程以及原料和产品的贮存设施,其所需投资视装置和现场条件的不同而有很大差异,在 30%~140%范围内变化。

(9)土地购置费:约为 4%~8%。

B 间接费用

(1)工程设计和监督费:包括管理、设计、投资估算以及咨询费等,约为直接费用总数的 5%~15%。

(2)施工费用:包括临时设施,购置施工机具和设备,施工监督,现场检验和医疗保健费等,约为直接费用总数的 5%~15%。

(3)承包管理费:约为直接和间接费用的 5%。

(4)未可预见费:这是一项考虑到在建设过程中可能有未估计到的事件产生,例如:自然灾害,超过预期的通货膨胀,设计修改,投资估算错误等因素而必须增加的费用。随着估算精度的提高,未可预见费减少,其数值约为直接费用的 5%~20%。

2.1.1.2 流动资本

流通资本是指开始生产后为使工厂(或装置)能继续运转下去所需的资金,它在工程项目结束时可以收回,它包括下列几部分:

(1)原料库存:视原料供应可靠程度而定,通常等于一个月的各种原料费用。

(2)产品贮存和在生产过程中半成品的费用:大约等于一个月的生产成本。

(3)应收帐款:给客户延期付款的时间一般为 30 天,因此自产品发出到收回售款需一个月左右时间,应准备一个月销售金额的流动资金。

(4)应付帐款:按一个月的原材料,辅助材料,公用工程费用和工资之和计算。

(5)税金:根据税金上缴的数额决定。

各种不同性质的工厂的流动资金与总投资的比例相差很大,一般占总投资的 10%~20%。如果有的装置是设计成生产多种产品的,其产品销售有季节性,需要大量的库存,这时流动资金所占比例可能高达 50%。

2.1.2 估算种类^{[1][3]}

投资估算的精度取决于设计资料的正确性和投入估算工作的力量多少。估算可分成以下五类。

A 数量级估算

这种估算用于项目正在酝酿和初步筛选方案的阶段,我国称为风险估算。它用以往类似的费用数据为基础,估算的误差可能高达 50%,但估算所需的费用很少,约占投资总数的 0.1%,对于投资几亿元的大型项目,其费用为投资总数的万分之一或更小。

B 研究估算

这是一种可行性研究或方案研究估算,估算基于概略工艺流程图、设备一览表、主要设备的初步规格、公用工程用量、建筑物和构筑物的近似尺寸和结构类别、初步的电气设备和仪表一览表等资料,其误差小于±30%。我国领导部门有时根据可行性研究得出的投资数字作为拨款依据,并要求误差小于±10%,此时可行性研究的设计深度必须提高。

C 初步估算

初步估算根据初步设计的资料编制,又名概算,用于申请贷

款,估算的误差小于 $\pm 20\%$ 。审批者若认为概算所示投资过大,可以要求修改设计,但在此阶段停止建设工作的情况是很少有的。

D 定局估算

在详细设计阶段,以接近完整的数据为依据进行的估算称为定局估算,其误差在 $\pm 10\%$ 以内,用于控制投资。

E 详细估算

在详细设计结束后,以完整的工程图纸和规格说明书为依据编制详细估算,这种估算又名预算,其误差小于 $\pm 5\%$ 。

不同的估算类别其估算费用和精度不相同,因此允许的遗漏项和未可预见费也不相同,可参考表 2-1 所列数字。

表 2-1^① 投资估算的分类

估算类别	估 算 精 度		允许遗漏项	未可预见费	估算费用
	误差范围	目标值			
数量级估算	$\pm 30\% \sim \pm 50\%$	$\pm 40\%$	25%~50%	10%~25%	0.01~0.1%
研究估算	$\pm 20\% \sim \pm 30\%$	$\pm 25\%$	20%~30%	10%~20%	0.05~0.5%
初步估算	$+ 10\% \sim \pm 25\%$	$\pm 12\%$	10%~20%	5%~10%	0.1~1.0%
定局估算	$+ 5\% \sim \pm 10\%$	$+ 6\%$	5%~15%	2%~5%	0.2~2%
详细估算	$\pm 2\% \sim \pm 5\%$	$\pm 3\%$	2%~5%	2%~5%	0.6~6%

①表 2-1 根据参考文献[1]和[3]的数据综合而成。

2.1.3 估算方法

2.1.3.1 比例法

比例法用于数量级估算,是一种最简单,最快速但最不精确的估算方法。

当无任何类似数据可参考时,只能采用销售额之比法,销售额之比的定义是年销售毛收入与固定投资的比值。

$$\text{销售额之比} = \frac{\text{年销售毛收入}}{\text{固定投资}}$$

式中的年销售毛收入是年销售量与平均销售价格的乘积。对于不同的工业部门,销售额之比相差悬殊,其范围在 0.2~5。对于化学工业,不少企业的销售额之比接近于 1。

当已知某一种生产能力的装置或设备的价格时,欲求另一种生产能力的价格,可应用“十分之六指数法则”,提出这种法则是基于这样的观察结果:在双对数坐标上将生产能力对设备或过程的成本作图时,得到的函数是一条直线,其斜率为 m ,称作能力指数:

$$C_2 = C_1 \left(\frac{P_2}{P_1} \right)^m \quad (2-1)$$

C_1 为生产能力 P 的成本, C_2 为同一设备或同样产品的装置但规模为 P_2 的成本, m 在通常情况下对设备为 0.6,对整个装置为 0.7。然而若将各种装置和设备的投资估算都用同一个数值,则误差较大,应采用不同的系数。不同性质装置的能力指数可参考表 2-2,不同设备的能力指数可参考表 2-3。

表 2-2^① 一些化工装置的规模指数

装置产品	能力指数	装置产品	能力指数
醋酸	0.68	异戊二烯	0.55
丙酮	0.45	甲醇	0.60
丁二烯	0.68	磷酸	0.60
环氧乙烷	0.78	聚乙烯	0.65
甲醛	0.55	尿素	0.70
过氧化氢	0.75	氯乙烯	0.80
合成氨	0.53	乙烯	0.83

①引自参考文献[1]。

2.1.3.2 因子法

因子法估算是指固定资本的估算以设备价格为基础,其他各项费用都与设备价格成比例的估算方法,它的精度取决于设备估算价格的精确性和各种比例系数的详细程度和正确性。

表 2-3^① 设备能力指数

设 备 名 称	表征生产能力的参数	参 数 范 围	能力指数
离心压缩机	功率	20~100kW	0.8
		100~5000kW	0.5
往复式压缩机	功率	100~5000 kW	0.7
泵	功率	1.5~200 kW	0.65
离心机	直径	0.5~1.0 m	1.0
板框式过滤机	过滤面积	5~50 m ²	0.6
彭式过滤机	过滤面积	1~10 m ²	0.6
塔设备	产量	1~50 t	0.53
加热炉	热负荷	1~10 MW	0.7
管壳式换热器	传热面	10~1000 m ²	0.6
空冷器	传热面	100~5000 m ²	0.8
板式换热器	传热面	0.25~200 m ²	0.8
套管式换热器	传热面	0.25~200 m ²	0.65
翅片套管换热器	传热面	10~2000 m ²	0.8
夹套反应釜	体积	3~30 m ³	0.4
球缶	体积	40~15000 m ³	0.7
贮槽(锥形)	体积	100~500000 m ³	0.7
压力容器(立式)	体积	10~100 m ³	0.65

①表 2-3 引自参考文献[2]。

A Lang 因子法

Lang 在 1947 年首先提出了因子法这个简单的假定,他将总的设备成本作为 100%,然后根据不同的装置特点乘以一个合适的因子,就能估算出固定投资和总投资,这种方法适用于数量级估算。Lang 因子数值见表 2-4。

表 2-4 Lang 因子表^①

装置类型	因 子	
	固 定 投 资	总 投 资
液 体 加 工	4.8	5.7
固体和流体加工	4.1	4.9
固 体 加 工	3.9	4.6

①引自参考文献[1]。

以上方法虽然区分了过程物料为流体或固体,但各种流体或固体装置构成投资的因素并不相同。若能将投资分解成各个组成部分,然后根据工艺类别,设计复杂性,施工所需材料,建厂地点及各种特定因素决定其费用与设备购置费的比例,就能提高精度,使之适用于研究估算或初步估算。表 2-5 列出了几种工厂(装置)的典型投资成分,这种方法通常应用于研究估算和初步估算,但如果性质相同,仅规模不同的类似的工程项目可参考时,有时可能得到定局估算的精确度。

表 2-5^① 以交付设备费用作为依据估算投资时的比例系数

投 资 项 目	交付设备费用的百分数		
	固体工厂	固体— 流体工厂	流体工厂
直 接 费 用			
已交付的购置设备	100	100	100
购置设备安装	45	39	47
仪表和控制(安装完毕)	9	13	18
配管(安装完毕)	16	31	66
电气(安装完毕)	10	10	11
建筑物(包括公用设施)	25	29	18
场地开拓	13	10	10
辅助设施(完装完毕)	40	55	70
土地(如果需要购置)	6	6	6
工厂总直接费用	264	293	346
间 接 费 用			
工程设计和监督	33	32	33
施工费用	34	34	41

续表

投 资 项 目	交付设备费用的百分数		
	固体工厂	固体— 流体工厂	流体工厂
直 接 费 用			
装置总直接与间接费用	336	359	420
包工费(约为直接、间接费用的 5%)	17	18	21
未可预见费(约为直接、间接费用的 10%)	34	36	42
固定资产投资	387	413	483
流动资金(约为总投资 15%)	68	74	86
总投资	455	487	569

①表 2-5 引自参考文献[1]。

注:表中数值适用于在老厂址增建新的工艺车间,倘若在未开拓厂址建新装置,则其所需的固定资产投资可能比在老厂址建设增大 100%。

B 改进的因子法^[12]

以上方法是根据设备总价和装置类型来计算安装、管道、电气、土建等各组成部分的费用,但是实际上每一种类型的设备所需的安装等费用与设备购置费的比例是不相同的,如果按照设备类型确定其比值就能得到较大的精度。除安装和管道等费用外,仪表与所属设备的购置价并无直接关系。例如有两个除塔径外其他参数都相同的精馏塔,若两者购置价格相差四倍,其仪表费用可能仅相差一倍,间接费用则差别更小。因此,合理的结论是把固定资本分成四个部分,即

- (1)设备购置费及与购置费直接相关的费用;
- (2)仪表费用;
- (3)场地建设、公用工程设施费和土地购置费;
- (4)间接费用。

$$\begin{aligned} \text{装置固定资本} = & \Sigma(EF_E) + IF_1 + (F_C + UI + L) + \\ & [\Sigma(EF_E) + IF_1]F_D \end{aligned} \quad (2-2)$$

式中 E ——设备费用;

F_E ——由设备的安装、管道、电气、土建等费用所决定的设备直接费用因子,见表 2-6;

I ——仪表购置费；

F_1 ——仪表直接费用因子，通常可取 2.5；

F_c ——场地建设费，可参考表 2-7；

UI ——公用工程设施费用，可参考表 2-8；

L ——土地购置费；

F_D ——间接费用因子，其中工程设计和监督费可参考表 2-9，施工费用可参考表 2-10。

用上述方法估算的投资可用于初步估算。

表 2-6²⁾ 设备直接费用因子 F_1

设备名称	F_E	设备名称	F_F
搅拌器			
碳钢	1.3	旋风分离器	1.4
不锈钢	1.2	干燥器	1.6
空气加热器	1.5	喷射器	1.7
打浆机	1.4	蒸发器	1.5
鼓风机	1.4	薄膜蒸发器	1.9
锅炉	1.4	挤出机、捏和机	1.5
离心机			
碳钢	1.3	风扇	1.4
不锈钢	1.2	过滤机	1.4
烟囱	1.2	加热炉	1.3
塔			
不锈钢	2.7	气柜	1.3
碳钢	3.0	切粒机	1.5
压缩机			
电动	1.3	换热器	
蒸汽驱动	1.5	空冷	2.5
燃气驱动	1.5	不锈钢盘管	1.7
输送机/升降机	1.4	玻璃	22
冷却塔	1.2	石墨	2.0
破碎机/研磨机	1.3	板式，不锈钢	1.7
结晶器	1.5	板式，碳钢	1.7

续表

设备名称	F_E	设备名称	F_E
换热器		冷冻装置	1.5
管壳式,碳钢/铝	2.2	蒸汽炉	2.0
换热器	-	槽	1.8
管壳式,碳钢/铜	2.0	工艺,不锈钢	1.9
管壳式,碳钢/蒙乃尔	1.8	工艺,铜	2.0
管壳式,不锈钢/不锈钢	1.9	工艺,铝	1.5
管壳式,碳钢/不锈钢	2.1	贮存,不锈钢	1.7
泵		贮存,铝	
离心式,碳钢	2.8	贮存,碳钢	2.3
离心式,不锈钢	2.0	现场制作,不锈钢	1.2
镍钢	1.7	现场制作,碳钢	1.4
蒙乃尔	1.8	透平	1.5
钛钢	1.4	压力容器	1.7
其他型式,不锈钢	1.4	不锈钢	2.8
其他型式,碳钢	1.6	碳钢	
釜式反应器		各种设备总和	
碳钢	1.9	碳钢	1.8
衬玻璃	2.1	不锈钢	2.0
管式反应器			
不锈钢	1.6	各种零星设备	
铜	1.8	碳钢	2.0
碳钢	2.2	不锈钢	1.5

(1)表 2-6 引自参考文献[12]。

表 2.7^① 厂址开拓占固定资产投资百分数的典型变化范围

厂址开拓项目	范围, %	典型数值 %	厂址开拓项目	范围, %	典型数值 %
场地清理	0.4~1.4	0.8	院内和围墙照明	0.1~0.3	0.2
道路和人行道	0.2~1.2	0.6	停车场	0.1~0.3	0.2
铁路	0.3~0.9	0.6	绿化	0.1~0.2	0.1
围墙	0.1~0.3	0.2	其他	0.2~0.6	0.3

(1)表 2.7 引自参考文献[1]。

表 2-8^① 辅助设施费用在固定资产投资中所占百分数的典型变化范围

辅助设施项目	范围, %	典型数值 %	辅助设施项目	范围, %	典型数值 %
蒸汽发生	2.6~6.0	3.0	冷冻(包括分配)	1.0~3.0	2.0
蒸汽分配	0.2~2.0	1.0	工艺废物处理	0.6~2.4	1.5
冷却水供给和输送	0.4~3.7	1.8	生活废物处理	0.2~0.6	0.4
水处理	0.5~2.1	1.3	通讯	0.1~0.3	0.2
水分配	0.1~2.0	0.8	原料贮存	0.3~3.2	0.5
变 电	0.9~2.6	1.3	最终产品贮存	0.7~2.4	1.5
配 电	0.4~2.1	1.0	消防系统	0.3~1.0	0.5
气体供应和分配	0.2~0.4	0.3	安全装置	0.2~0.6	0.4
空气压缩和分配	0.2~3.0	1.0			

表 2-9^① 工程设计和监督费用在固定资产投资中所占百分数的典型变化范围

组 成	范围, %	典型数值 %	组 成	范围, %	典型数值 %
工程设计	1.5~6.0	2.2	会计、施工规划	0.2~1.0	0.3
制图	2.0~12	4.8	和费用估算		
采购	0.2~0.5	0.3	旅费和生活费	0.1~1.0	0.3
			复制和通讯	0.2~0.5	0.2
工程设计和监督的总费用(包括管理费)				4.0~21	8.1

表 2-10^① 施工费用在固定资产投资中所占百分数的典型变化范围

费 用 名 称	范围, %	典型数值, %
临时设施费	1.0~3.0	1.7
施工工具和租金	1.0~3.0	1.5
设备办公费	0.2~2.0	0.4
施工人员工资	0.4~4.0	1.0
旅费和生活费	0.1~0.8	0.3
税金和保险金	1.0~2.0	1.2
开工原材料和劳动力	0.2~1.0	0.4
管理费	0.3~0.8	0.5
总施工费	4.2~16.6	7.0

① 表 2-8、表 2-9、表 2-10 引自参考文献[1]。

2.1.3.3 详细估算法

项目详细估算要确定投资组成中每一项费用的数值,所以设备、材料的规格和数量要根据完整的图纸及规格说明书确定,然后根据当时的单价数据计算价格,最好能从制造商那里取得报价单。设备安装的人工费是按交付设备费用的百分数来估算的,而混凝土、钢材、管道、保温等材料的数量都是根据图纸计算,然后再根据单位材料的人工单价计算人工费。这种投资估算方法需要大量的时间,适用于定局估算和详细估算。

2.1.4 费用指数^{[1][3]}

上述各种估算方法都是以过去的费用数据或资料为依据的,但是任何一个国家,每年都有大小不等的通货膨胀。因此,必须采用一种方法来修正过去的数据,使之适用于目前情况,利用费用指数可达到此目的。

费用指数是一个表示已知时刻的费用与某一基准时刻的费用的比值。即

$$\text{目前费用} = \text{过去费用} \times \frac{\text{目前的指数值}}{\text{过去的指数值}}$$

我国过去并没有发表过适用于某一工业的费用指数,而费用数据又不可能每年都重新收集和编辑,因此要准确估算投资费用是很困难的,常用的处理方式是注明估算是根据哪一年的费用数据编制的,由领导部门审批总投资数。

对于化学工业而言,美国的《化学工程》杂志发表了两种很有用的费用指数,一种是 Marshall 和 Stevens 指数,它以八种化学工业为基础,这些工业在指数中的权重决定于该工业的产品总值,此指数以 1926 年的价格为基准。一个典型年份的加权百分数如下:

水泥	2	油漆	5
化工	48	造纸	10
陶瓷	2	石油	22
玻璃	3	橡胶	8

化工厂成本指数(C. E. 指数)以工厂成本的四个成分为基础,这些成分的权重为设备、机器及支架 61%,建设人工费 22%,建筑物 7%,工程及管理人员费用 10%,此指数以 1957~1959 年的价格为基准。

近年来上述两种指数值见表 2-11。

表 2-11^① 成本指数

年 份	化工厂成本指数 (以 1957~1959 年为 100)	Marshall & Stevens 已安装设备成本指数 (以 1926 年为 100)
1968	114	273
1969	119	285
1970	125.7	303.3
1971	132.2	321.3
1972	137.2	332.0
1973	144.1	344.1
1974	165.4	358.4
1975	182.4	444.3
1976	192.1	472.1
1977	204.1	505.4
1978	218.8	545.3
1979	238.7	599.4
1980	201.2	659.6
1981	297.0	721.3
1982	314.0	745.6
1983	316.9	760.8
1984	322.7	780.4
1985	325.3	789.6
1986	318.4	797.6
1987	323.8	813.6
1988	342.5	852.0
1989	355.4	895.1
1990	357.6	915.1
1991	361.3	930.6
1992	358.2	943.1
1993	359.2	964.2

①本表数据来源于美国期刊 Chemical Engineering。

2.2 单元设备价格估算^①

单元设备价格是各种估算方法的基础。单元设备价格最可靠的来源是直接从制造厂商那里获得报价,但要得到装置全部设备的报价需要花费很大的精力,而且在可行性研究或方案比较阶段,设备机械设计尚未开始,还不具备向制造厂商询价的条件,这时可用单元设备价格估算的方法得到设备价格,其精度能满足可行性研究和方案比较的需要。

单元设备价格估算的基本方法是先根据设备的特性参数,例如对容器而言是设备质量,对热交换器是传热面积,对泵是功率,决定设备的基准价格,然后,根据不同的材质、型式和压力等级等因素加以校正。由这种估算方法得到的价格数据可比性很强,而且可以编成计算机程序,使用方便。

估算方法来源于美国期刊 Chemical Engineering,因此得到的单价为美元,在应用这些公式时需将所得价格乘以美元对人民币的汇率,将其转换成人民币元。

2.2.1 设备质量^②

容器、塔类的价格估算都以设备质量为基础,因此,首先应建立估算设备质量的方法。

设备质量 W_s 按下式计算:

$$W_s = \pi D_i (L_i + 0.8116 D_i) T_i \rho \quad (2-3)$$

式中 L_i 等于筒体长度加两边封头的直边长度,称为切线长度。 D_i 为设备内径。材料密度 ρ 决定于材料种类,为已知量。因此,计算 W_s 所需求取的唯一变量为壁厚 T_i 。 T_i 可根据容器不同的受压情况和风载,用下列公式计算:

(1) 受内压 p_k 所需的壁厚 T_i 。

① 本节符号说明详见本节结尾。

$$T_p = p_g R / (SE - 0.6 p_g) \quad (2-4)$$

式中焊接系数 E 之值是根据焊缝质量检查的严格程度决定的。 S 为许用压力。对于壁厚小于 30mm 的容器,抽 10% 焊缝进行 X 光拍片以检查焊接质量,这时 E 取 0.85;对于壁厚大于 30mm 的容器,焊缝需 100% 拍片,这时 E 可取 1.0。

(2) 承受外压所需的壁厚 T_p

T_p 由坍塌压力 p_c 所决定, p_c 应按环境压力和设备设计压力差值的 3 倍计算。

$$T_p = T_c + (T_c)_c \quad (2-5)$$

$$p_c = \frac{2.6 (T_c / D_0)^{2.5}}{(L_t / D_0) - 0.45 (T_c / D_0)^{0.5}} \quad (2-6)$$

$$(T_c)_c = L_t (7.1095 D_0 - 2.167) \times 10^{-5} - 4.826 \times 10^{-3} \quad (2-7)$$

式中 L_t 、 T_c 、 D_0 和 D_0 的单位均为 m。

(3) 考虑风载所需的壁厚 T_w

$$T_w = \rho_0 V^2 (D_0 + Z) L_t^2 / (S \pi D_0^2) \quad (2-8)$$

在 293K 和 1 大气压下,空气密度 $\rho_0 = 1.2 \text{ kg/m}^3$ 。在多数情况下,风速 v 可取 63m/s,考虑到笼式扶梯等附件使塔承受的风载面积大于设备直径乘 L_t ,取安全裕量 $Z = 0.432\text{m}$,则式(2-8)可修改成下式:

$$T_w = 1516 (D_0 + 0.432) L_t^2 / (S D_0^2) \quad (2-9)$$

(4) 当有风载荷时,设备的环向焊缝必须同时承受风载和内压的作用,因此,若环向焊缝的强度是薄弱环节时,壁厚 T_g 应按下式计算:

$$T_g = p_g R / (2SE + 0.4 p_g) \quad (2-10)$$

(5) 设备壁厚 T_s

对于立式容器,假设容器上部不考虑风载荷而下部需考虑,则下部壁厚 T_b 可用下式求得:

$$T_b = T_g + T_w \quad (2-11)$$

式中 T_g ——由环向焊缝强度决定的壁厚;

T_w ——承受风压所需的壁厚。

但是若由式(2-11)算出的壁厚 T_b 小于由式(2-4)算出的 T_p , 则 T_b 必须等于 T_p 。

容器壁厚 T_s 取顶部和底部所需厚度的平均值再加腐蚀裕度 T_c 。

$$T_s = 1/2 (T_p + T_b) + T_c \quad (2-12)$$

对于卧式容器, 不需考虑风载荷, 则

$$T_s = T_p + T_c \quad (2-13)$$

2.2.2 压力容器^[8]

压力容器的总价 C_t 按下式计算:

$$C_t = F_m C_b + C_0 \quad (2-14)$$

式中 F_m ——材质因子;

C_b ——筒体基准价格;

C_0 ——平台扶梯价格。

对于卧式容器, 当设备质量 W_s 在 369~415000kg 范围内时, 筒体基准价格 C_b 按下式计算:

$$C_b = \exp[8.114 - 0.16449(\ln W_s) + 0.04333(\ln W_s)^2] \quad (2-15)$$

当设备内径 D_i 在 0.92~3.66m 范围内, 平台和扶梯价格 C_0 按下式计算:

$$C_0 = 1288.3 D_i^{0.20294} \quad (2-16)$$

对于立式容器, 当设备质量在 2210~103000kg 范围内时

$$C_b = \exp[8.600 - 0.21651(\ln W_s) + 0.04576(\ln W_s)^2] \quad (2-17)$$

D_i 在 1.83~3.05m 范围内, L_t 在 3.66~6.10m 范围内时

$$C_0 = 1017.0 D_i^{0.73960} L_t^{0.20884} \quad (2-18)$$

式(2-14)中的 F_m 为与材料种类有关的系数, 称为材质因子, 其数值见表 2-12。

2.2.3 塔设备^[9]

2.2.3.1 精馏塔塔体及平台扶梯

A 塔体

若已知精馏塔塔体质量,可用下式估算塔体的基准价格,即材质为碳钢时的设备价格 C_b :

$$C_b = \exp[6.950 + 0.1808(\ln W_s) + 0.02468(\ln W_s)^2 + 0.01580(L_t/D_i) \times \ln(T_b/T_p)] \quad (2-19)$$

上式适用于塔体质量在 4090~1060000kg 范围内。

当材料为非碳钢时,塔体价格需将基准价格 C_b 乘以材质因子 F_m 。 F_m 的数值与压力容器的相同,见表 2-12。

表 2-12^① 压力容器材质因子 F_m

材 料 种 类	F_m
碳钢	1
不锈钢 Cr ₁₈ Ni ₁₂ Mo ₂	2.1
20CB—3	3.2
镍 200	5.4
蒙乃尔合金 400	3.6
Inconel 600	3.9
Incoloy 825	3.7
钛钢	7.7
不锈钢 18—8	1.7

①表 2-12 引自参考文献[8]。

B 平台及扶梯

平台和扶梯在设备内径 D_i 为 0.91~7.32m,切线长度 L_t 为 17.53~51.82m 范围内,其价格 C_o 为:

$$C_o = 834.86 D_i^{0.63316} L_t^{0.80161} \quad (2-20)$$

2.2.3.2 吸收塔塔体及平台扶梯

A 塔体价格 C_b

在塔体质量为 1930~445000kg 的范围内, C_b 可用下式计算:

$$C_b = \exp[6.488 + 0.21887(\ln W_s) + 0.02297(\ln W_s)^2] \quad (2-21)$$

当塔体材料为非碳钢时,其材质因子同样见表 2-12。

B 平台及扶梯价格 C_0

在 D_i 为 0.91~6.4m, L_i 为 8.23~12.19m 的范围内,

$$C_0 = 1017 D_i^{0.73966} L_i^{0.27034} \quad (2-22)$$

2.2.3.3 塔内件

塔设备有两大类型:板式塔和填料塔

A 板式塔

(1)在塔径 D_i 为 0.6~4.8m 范围内,每块塔板的基准价格 C_{br} 按下式计算:

$$C_{br} = 278.38 \exp(0.5705 D_i) \quad (2-23)$$

(2)当内件为非碳钢材料时,需考虑材质因子 F_m 其数值见表 2-13。

表 2-13^① 塔内件材质因子 F_m

材 料	F_m
不锈钢 18-8	$1.189 + 0.1894 D_i$
不锈钢 $Cr_{18}Ni_{12}Mo_2$	$1.410 + 0.2376 D_i$
Carpenter20CB-3	$1.525 + 0.2585 D_i$
蒙乃尔合金	$2.306 + 0.3674 D_i$

①表 2-13、2-14、2-15 均引自参考文献[9]。

(3)对于不同型式的塔板,其价格不同,塔板类型因子 F_{TT} 见表 2-14。

表 2-14 塔板类型因子 F_{TT}

类 型	F_{TT}
浮 阀	1.00
栅 条	0.80
泡 罩	1.59
筛 孔(有降液管)	0.85

(4)当塔板数 N_T 小于 20 时,每块塔板的制造费有所增加,要用板数因子 F_{NT} 校正。

$$F_{NT} = 2.25 / (1.0414)^{NT} \quad NT < 20 \quad (2-24)$$

$$F_{NT} = 1 \quad NT > 20 \quad (2-25)$$

B 填料塔内件的价格根据填料的体积和每立方米填料的价格 C_{ps} 决定, C_{ps} 的数值见表 2-15。

表 2-15 一些填料的价格 C_{ps}

填 料 种 类	尺 寸, cm	美元/m ³
		价 格
陶瓷拉西环, 矩鞍形填料	2.54(1 吋)	510
	5.08(2 吋)	360
金属拉西环, 鲍尔环	2.54(1 吋)	840
	5.08(2 吋)	600

2.2.3.4 塔设备总价 C_t

塔设备的总价是塔体、平台及扶梯和内件的价格之和, 因此

$$\text{板式塔总价 } C_t = C_b F_m + N_T C_m F_{TM} F_{T1} F_{NT} + C_0 \quad (2-26)$$

$$\text{填料塔总价 } C_t = C_b F_m + (\pi/4 D_i^2) H_p C_{ps} + C_0 \quad (2-27)$$

式 2-27 中 H_p 为填料总高度。

塔身上下部分的塔径不相同, C_b 和 C_0 可用下式计算后代入式(2-26)和式(2-27)。

$$C_b = (L_{t1} C_{b1} + L_{t2} C_{b2}) / (L_{t1} + L_{t2}) \quad (2-28)$$

$$C_0 = (L_{t1} C_{o1} + L_{t2} C_{o2}) / (L_{t1} + L_{t2}) \quad (2-29)$$

现举例说明上述价格估算方法。

例 2-1 设有某脱丙烷塔, 塔径为 1.7m, 内有浮阀塔板 44 块, 塔体切线高度 $L_t = 25.6\text{m}$, 塔压 $p_g = 1\text{MPa}$, 塔体材料为碳钢, 密度 $\rho = 7860\text{kg/m}^3$, 浮阀板为 18—8 不锈钢, 许用应力 S 为 10MPa , 风速 60m/s 。试估算其在 1987 年时的价格。

解: (1) 求塔体壁厚 T_v 。

承受内压所需的壁厚

$$T_v = p_g R / (SE - 0.6 p_g)$$

设 $T_v < 30\text{mm}$ 取 $E = 0.85$

$$T_p = 1 \times 10^6 \times 0.85 / (100 \times 10^6 \times 0.85 - 0.6 \times 10^6) \\ = 0.01\text{m}$$

承受风压所需的壁厚

$$T_w = \rho_0 V^2 (D_0 + 0.432) L_i^2 / (S \pi D_i^2) \\ = 1.2 \times 60^2 \times 2.132 \times 25.6^2 / (100 \times 10^6 \times 1.7^2 \pi) \\ = 0.00665\text{m}$$

由环向焊缝强度决定的壁厚

$$T_g = p_g R / (2SE + 0.4p_g) = 10^6 \times 0.85 / (2 \times 10^8 \times 0.85 + 0.4 \\ \times 10^5) = 0.005\text{m}$$

$$\text{故塔底部的厚度 } T_b = 0.005 + 0.00665 = 0.01165\text{m}$$

$$\text{取 } T_b = 0.012\text{m}$$

$$\text{取腐蚀裕量 } T_c = 0.003\text{m}$$

$$\text{塔体平均壁厚 } T_s = 1/2(0.01 + 0.012) + 0.003 = 0.014\text{m}$$

(2) 塔体价格

① 塔体质量

$$W_c = \pi D (L_t + 0.8116D) T_s \rho \\ = 1.7\pi (25.6 + 0.8116 \times 1.7) \times 0.014 \times 7860 \\ = 16310\text{kg}$$

② 塔体价格

$$C_b = \exp[6.950 + 0.1808 \ln W_s + 0.02468 (\ln W_s)^2 + 0.01580 \\ (L_t/D_t) \times \ln(T_b/T_p)] = 64718$$

因材料为碳钢, 故 $F_m = 1$

$$\text{③ 平台扶梯价格 } C_o = 834.86 D_i^{0.83316} L_i^{0.80161} \\ = 834.86 \times 1.3993 \times 13.874 \\ = 16207$$

$$\text{④ 塔板价格 } C_{bt} = 278.38 \exp(0.5705 D_i) \\ = 734.2$$

$$F_{TM} = 1.189 + 0.1894 D_i = 1.511$$

$$\text{塔板价格} = N_T C_{bt} F_m F_{TT} F_{NT} \\ = 40 \times 734.2 \times 1.511 \times 1 \times 1 = 44375$$

⑤脱丙烷塔总价

1979 年脱丙烷塔总价 $54718+16207+44375=125300$

1979 年 C·E, 指数为 238.7, 1987 年为 323.8

故 1987 年脱丙烷塔总价 $125300 \times \frac{323.8}{238.7} = 169971$ 美元

2.2.4 热交换器¹⁾

热交换器的价格 C_E 为基准价格 C_b 和型式因子 F_T , 压力因子 F_p , 材料因子 F_m 的乘积, 即

$$C_E = C_b F_T F_p F_m \quad (2-30)$$

当换热面积 A 在 $14 \sim 1100 \text{m}^2$ 范围内, C_b 及各种因子的数值可用下列各式计算:

(1) C_b 是碳钢浮头式管壳式热交换器, 设计压力为 700kPa 时的基准价格

$$C_b = \exp[8.202 + 0.01506(\ln A) + 0.06811(\ln A)^2] \quad (2-31)$$

(2) 热交换器型式因子 F_T

固定管板式换热器

$$F_T = \exp[-0.9003 + 0.09060(\ln A)] \quad (2-32A)$$

$$\text{釜式再沸器} \quad F_T = 1.35 \quad (2-32B)$$

$$\text{浮头式换热器} \quad F_T = 1.0 \quad (2-32C)$$

$$\text{U 形管式换热器} \quad F_T = \exp[-0.7841 + 0.0830(\ln A)] \quad (2-32D)$$

(3) 压力因子 F_p

对不同的设计压力范围用不同的公式计算。

$$\text{压力 } p = 700 \sim 2100 \text{kPa} \quad F_p = 0.8955 + 0.04981 \ln A \quad (2-33A)$$

$$p = 2100 \sim 4200 \text{kPa} \quad F_p = 1.2002 + 0.07140 \ln A \quad (2-33B)$$

$$p = 4200 \sim 6200 \text{kPa} \quad F_p = 1.4272 - 0.12088 \ln A \quad (2-33C)$$

(4) 材质因子 F_m

热交换器的材质因子不仅与材料种类有关,而且与换热面积大小有关。

$$F_m = g_1 + g_2(\ln A) \quad (2-34)$$

g_1, g_2 的数值见表 2-16。

表 2-16^① 热交换器材质因子系数

材 料 种 类	g_1	g_2
不锈钢 18-8	1.1991	0.15984
不锈钢 $\text{Cr}_{16}\text{Ni}_{32}\text{Mo}_2$	1.4144	0.23296
不锈钢 Sus 347	1.1388	0.22186
镍钢 200	2.9553	0.60859
蒙乃合金 400	2.3296	0.43377
Inconel 600	2.4103	0.50764
Incoloy 825	2.3605	0.49706
钛 钢	2.5617	0.42913
海氏合金	3.7614	1.51774

①表 2-16 引自参考文献[16]。

例 2-2 有固定管板式热交换器一台,材质为不锈钢 18-8,设计压力 1000kPa。传热面积 100m²,请估算其价格。

$$\begin{aligned} \text{解: } C_b &= \exp[8.202 + 0.01506 \ln 10 + 0.06811(\ln 100)^2] \\ &= 16577 \end{aligned}$$

$$F_r = \exp[-0.9003 + 0.0906 \ln 100] = 0.6169$$

$$F_p = 0.8955 + 0.04981 \ln 100 = 1.1249$$

$$F_m = 1.1991 + 0.15984 \ln 100 = 1.9352$$

$$C_E = C_b F_r F_p F_m = 22263 \text{ 美元}$$

以美元与人民币的汇率为 8.7 计,则

$$C_E = 22263 \times 8.7 = 193,688 \text{ 元}$$

2.2.5 常压贮槽^[10]

贮槽容积通常根据贮存物质的流量和贮存时间,再乘以 20% 的安全系数计算得到。对于常压容器,其高度与直径的比例在很小

的范围内变化,因此,容器的质量或基准价格 C_b 可直接用其容积求得。

对于容积在 $5 \sim 80 \text{ m}^3$, 在设备制造厂制作的小型贮槽:

$$C_b = \exp[7.994 + 0.6637 \ln V - 0.063088 (\ln V)^2] \quad (2-35)$$

对于大于 80 m^3 的贮槽,由于运输不方便,应在现场制作。

$$C_b = \exp[9.369 - 0.1045 \ln V + 0.045355 (\ln V)^2] \quad (2-36)$$

若贮槽的材料不是碳钢,同其它设备一样,其价格也需要将 C_b 乘以材质因子 F_m , F_m 的数值见表 2-17。

表 2-17 贮槽材质因子 F_m

材 料 科 类	F_m	材 料 种 类	F_m
不锈钢 18-8	2.4	饮 钢	7.70
不锈钢 C-18Ni12Mo2	2.7	砖衬橡胶或砖衬聚脂	2.75
不锈钢 SUS 347	3.0	砖衬铅	1.9
镍钢	3.5	玻璃纤维加强聚脂	0.32
蒙乃尔合金	3.3	铝	2.7
Inconel	3.8	铜	2.3
铅钢	11.0	钢筋混凝土	0.55

①表 2-17 引自参考文献[10]。

2.2.6 离心泵^[11]

2.2.6.1 离心泵泵体的价格 C_p 可用下式计算:

$$C_p = C_b F_1 F_m \quad (2-37)$$

C_p 的价格包括泵底板和联轴节,但不包括驱动器。

A 泵的基准价格 C_b

C_b 系按转速为 3550 r/min 的单级立式铸铁泵的条件回归所得:

$$C_b = \exp[7.2234 + 0.3451 (\ln P_s) + 0.0519 (\ln P_s)^2] \quad (2-38)$$

$$P_s = Q \sqrt{H} \quad (2-39)$$

式(2-39)中扬量 Q 的单位为 m^3/s , 扬程 H 的单位为 J/kg 或 m^2/s^2 。

B 材质因子 F_m

表 2-18^① 泵材质因子

材 料 种 类	F_m	材 料 种 类	F_m
铸 铁	1.35	ISO C	4.60
泵体为铸铁	1.15	钛 钢	9.70
附件为 18-8 或 $C_{13}N_{12}M_{07}$	2.20	海氏合金 C	2.95
镍 钢	3.50	球墨铸铁	1.15
蒙乃尔合金	3.30	青 铜	1.90
ISO B	4.95		

C 泵的类型

根据泵的扬程和扬量,参考表 2-19 选择泵的类型。

表 2-19^① 各种类型泵的扬量、扬程和电动机功率

泵 类 型	扬量范围(m^3/s)	扬程范围(J/kg)	最大电动机功率(HP)
单级立式 3550 r/min	0.00315~0.568	150~1200	75
单级立式 1750 r/min	0.00315~0.2208	150~600	200
单级卧式 3550 r/min	0.00631~0.0946	300~1350	150
单级卧式 1750 r/min	0.01577~0.3155	150~1500	250
双级卧式 3550 r/min	0.00315~0.0694	900~3300	250
多级卧式 3550 r/min	0.00631~0.0946	2000~9600	1450

D 泵型因子 F_T

$$F_T = \exp[b_1 + b_2(\ln P_s) + b_3(\ln P_s)^2] \quad (2-40)$$

系数 b_1, b_2, b_3 见表 2-20。

表 2-20^① 泵型因子系数

泵 型	b_1	b_2	b_3
单级 1750 r/min 立式	0.3740	0.1851	0.0771
单级 1750 r/min 卧式	0.7147	-0.0510	0.0102
单级 3550 r/min 卧式	0.4612	-0.1872	-0.0253
双级 3550 r/min 卧式	0.7445	-0.0167	0.01542
多级 3550 r/min 卧式	2.0798	-0.0946	0.0834

①表 2-18、表 2-19、表 2-20 引自参考文献[11]。

2.2.6.2 电动机价格 C_m

A 轴功率 P_B

当扬量 Q 在 $0.0012\text{m}^3/\text{s} \sim 0.32\text{m}^3/\text{s}$ 范围内时, 泵效率

$$\eta_p = 0.885 + 0.00824 \ln Q - 0.01199 (\ln Q)^2 \quad (2-41)$$

已知泵效率后, 根据扬程、扬量和液体密度计算泵所需轴功率

P_B

$$P_B = \rho Q H / \eta_p \quad (2-42)$$

B 电动机功率 P

电动机功率消耗等于轴功率 P_B 除以电动机效率 η_m 。 η_m 可按下列式计算:

$$\eta_m = 0.80 + 0.0319 \ln P_B - 0.00182 (\ln P_B)^2 \quad (2-43)$$

需要注意的是式(2-43)中 P_B 的单位是马力, 该式在轴功率为 $1 \sim 500\text{HP}$ 的范围内适用。

已知 η_m 后, 所需电动机功率 P 可方便地由式(2-44)求出

$$P = P_B / \eta_m \quad (2-44)$$

不同规格的电动机的功率变化是离散的, 因此应根据 P 向上选择离其最近的规格作为泵的电动机功率 P 。

C 电动机价格 C_m

$$C_m = \exp[a_1 + a_2 \ln P + a_3 (\ln P)^2] \quad (2-45)$$

系数 a_1, a_2, a_3 见表 2-21。

表 2-21^① 电动泵价格系数表

电动机型式	转速	系 数			适用功率范围 HP
		a_1	a_2	a_3	
防滲型	3600 r/min	4.8314	0.09666	0.10960	1~7.5
		4.1514	0.53470	0.05252	7.5~250
		4.2423	1.03251	-0.03595	250~700
	1800 r/min	4.7075	-0.01511	0.22888	1~7.5
		4.5212	0.47242	0.04820	7.5~250
		7.4044	-0.06454	0.05448	250~600
	1200 r/min	4.9298	0.30118	0.12530	1~7.5
		5.0999	0.35861	0.06052	7.5~250
		4.6163	0.88531	-0.02188	250~500

续表

电动机型式	转速	系数			适用功率范围 H_p
		a_1	a_2	a_3	
全封闭式	3600 r/min	5.1058	0.03316	0.15374	1~7.5
		3.8544	0.83211	0.02399	7.5~250
		5.3182	1.08470	-0.05695	250~400
	1800 r/min	4.9687	-0.00930	0.22616	7.5~250
		4.5347	0.57065	0.04609	
	1200 r/min	5.1532	0.28931	0.14357	1~7.5
		5.3858	0.31004	0.07406	7.5~350
防爆型	3600 r/min	5.3934	-0.00333	0.15475	1~7.5
		4.4442	0.60820	0.05202	7.5~200
	1800 r/min	5.2851	0.0048	0.19949	1~7.5
		4.8178	0.31086	0.05293	7.5~250
	1200 r/min	5.4166	0.31216	0.10573	1~7.5
		5.5655	0.31284	0.07212	7.5~200

①表 2-21 引自参考文献 [1]。

例 2-3 设泵的扬量 $Q=0.05\text{m}^3/\text{s}$, 所需压头 $H=200\text{J/kg}$, 液体密度 $\rho=970\text{kg}/\text{m}^3$, 求泵及电动机价格, 电动机必须防爆。

解: (1) 泵价格 C_b

$$P_s = Q \sqrt{H} = 0.05 \sqrt{200} = 0.707$$

$$C_b = \exp[7.2234 + 0.3451(\ln 0.707) + 0.619(\ln 0.707)^2] \\ = 1224.2$$

选择单级卧式球墨铸铁泵, 转速 1750r/min。

$$F_T = \exp[0.7147 - 0.0510(\ln 0.707) + 0.0102(\ln 0.707)^2] \\ = 2.082$$

$$F_m = 1.15$$

$$C_p = C_b \cdot F_T \cdot F_m = 1224.2 \times 2.082 \times 1.15 = 2931.1$$

(2) 电动机价格 C_m

$$\eta_p = 0.885 + 0.00824(\ln 0.05) - 0.01199(\ln 0.05)^2 \\ = 0.802$$

$$P_B = \rho Q H / \eta_p = 970 \times 200 \times 0.05 / 0.802 = 12.1\text{kJ/s} \\ = 16.23H_p$$

假设大于 $16.23H_p$ 的最小电动机规格为 $20H_p$, 用表 2-21 所

列系数求 C_m 。

$$a_1 = 4.8178 \quad a_2 = 0.51086 \quad a_3 = 0.05293$$

$$\begin{aligned} C_m &= \exp[4.8178 + 0.51086(\ln 20) + 0.05293(\ln 20)^2] \\ &= 918.9 \end{aligned}$$

设美元和人民币的汇率为 8.7。

$$\text{泵和电动机总价} = 2931.1 + 918.9 = 3850 \text{ 美元} = 33495 \text{ 元。}$$

2.2 节有关符号汇总说明：

A ——热交换器传热面，

C_A ——平台扶梯费用，

C_b ——材质为碳钢时的设备基准价格，

C_m ——电动机价格，

C_{pa} ——单位体积填料价格，

C_p ——泵价格，

C_o ——平台和扶梯价格，

C_t ——设备总价，

D_i ——设备内径，

D_o ——设备外径，

E ——焊缝系数，

E_m ——弹性模量，

F_m ——材质因子，

F_{NT} ——板数因子，

F_p ——压力因子，

F_r ——型式因子，

F_{TM} ——塔内件材质因子，

F_{TT} ——塔板类型因子，

H ——泵扬程，

H_p ——填料总高度，

L_t ——设备切线长度，
 N_T ——塔板数，
 P_B ——轴功率，
 p_c ——坍塌压力，
 p_s ——表压，
 P_M ——马达功率，
 Q ——泵扬量，
 R ——设备半径，
 S ——许用应力，
 T_b ——立式容器的底部壁厚，
 T_c ——考虑腐蚀所需附加的壁厚，
 T_e ——承受外压所需的设备壁厚，
 $(T_e)_c$ ——承受外压所需的校正设备壁厚，
 T_s ——由环向焊缝强度决定的设备壁厚，
 T_p ——由设计压力决定的设备壁厚，
 T_w ——承受风载所需的壁厚，
 V ——风速，
 W_s ——设备质量，
 Z ——裙座裕量，
 η_m ——电动机效率，
 η_p ——泵效率，
 ρ ——材料密度，
 ρ_0 ——空气密度。

2.3 总生产成本估算

总生产成本是决定工厂经济效益最重要的因素，必须正确估算，构成成本的任一组成部分都不能遗漏。表 2-22 列出了一个典型的化工厂的产品成本组成，可以参考以防止漏项。

表 2-22^① 化工厂产品成本组成表

成本组成		成本名称		
原料 辅助材料 公用工程 操作人工和管理 实验室费用 操作消耗品 专利使用费 维护检修费	直接生产费用			
折旧 资金利息 保险费	固定费用	装置成本	工厂成本	销售成本
全厂性固定资产的固定费用和经常费用 工厂管理人员办公费和差旅费 研究和开发费	工厂管理费			
销售人员费用 运输广告费 销售营业处费用	销售费用			

①本表来源于参考文献[1]。

2.3.1 直接生产成本

直接生产成本包括直接与生产操作有关的各项开支,这些费用是产量的函数,几乎随产量呈线性变化,称为可变成本。其中某些费用对产量的变化并不敏感,甚至无关,如维修费和专利使用费,这些费用在直接生产成本中仅占小部分。也有作者仅把原料、辅助材料、公用工程三项费用作为可变成本,其他项作为固定成本处理。

2.3.1.1 原料

原料是构成直接生产成本的主要单项,在我国的价格体系下,常占直接生产成本的 60%~85%。原料的消耗量可根据物料衡算和热量衡算结果决定。原料的价格按市场的实际价格加上运费计算。

2.3.1.2 公用工程

公用工程的价格随来源、消耗量和工厂地理位置的变化而有很大差异,如果按照当时不稳定情况下的价格进行方案比较,当价格调整到合理的数值时会使原有的结论发生偏差。因此,在这种情况下应进行灵敏度分析,了解价格变化的后果,以便作出正确的选择。表 2-23 列出了一套比较合理的公用工程价格,可作为方案评比时参考。

表 2-23^① 公用工程参考价格

种 类	单 位	单价,元
冷却水	m ³	0.26
电	kW·h	0.35
饱和蒸汽	t(吨)	
压 力 350 kpa		54.00
1000 kpa		65.00
1700 kpa		71.00
4200 kpa		86.00
过热蒸汽 4200 kpa	t(吨)	100.00
400℃		
锅炉给水	t(吨)	3.5
工业炉热量	10 ⁶ kJ	33
氮 气	m ³	0.9

2.3.1.3 辅助材料

辅助材料指不构成产品实体,但有助于产品形成所耗用的物料,包括催化剂、溶剂、包装材料等。溶剂、助剂和包装材料都可按每天每小时的消耗量除以产量求得消耗定额,而催化剂则根据装填量,使用寿命和使用期的产量计算。

2.3.1.4 操作人工和管理费用^[3]

当操作工人数有类似装置可以参考时,操作人工费可以根据操作工人数和月工资精确地计算得到,如果没有数据来源,可用式(2-46)或表 2-26 计算所需操作工人数。

$$\text{操作工时} = t \cdot \text{生产步骤} \cdot (\text{以吨/日计的生产能力})^{0.24} \quad (2-46)$$

① 表 2-23 来源于参考文献[13]。

式中

- $t =$
- 23 用于费工最多的间歇操作
 - 17 用于平均人工需用量的操作
 - 10 用于仪表完善的连续过程

生产步骤是指整套设备中一个或几个单元设备间断或连续进行的任何单元操作、单元过程或这些单元的组合,例如反应、蒸馏、蒸发、干燥、过滤等。

装置和工厂两级管理人员的人数可按操作工人数的 15%~20%选取,典型的数值是 18%,装置和工厂各占 50%左右。

每个人员的月工资应包括工资和工资附加费,工资附加费是指根据国家规定,按工资总额提存一定百分比的职工福利费部分,可取平均工资的 17.5%。

表 2-24^① 工艺设备或过程的典型人工需要量

设备类别	人工/单元·班	设备类别	人工/单元·班
连续反应器	1/3~1	蒸发器	1/4
间歇反应器	1/2~1	结晶机	1/4
连续操作塔系	1/4~1/3	真空过滤器	1/4~1/8
间歇操作塔系	1/2~1	回转干燥机	1/2
一组集中安装的 压缩机	1	喷雾干燥机	1
分散安装的压缩机	1/2~1	离心分离机	1/4~1/2
		罐区	1~2

①表 2-24 引自参考文献[1]、[5]。

2.3.1.5 实验室费用

这一项是控制原料质量及成品质量的分析试验费,可按操作人工费的 10%~20%计算。

2.3.1.6 操作消耗品

为了保证工艺过程顺利地进行,要供应许多消耗品,例如生产报表,化学试剂,润滑油等各种不能作为辅助材料或检修材料看待的各种消耗,可按维护检修费的 10%~15%估算。

2.3.1.7 专利使用费

随着我国专利制度的逐步建立和完善,需要支付专利的装置

必将增加。专利费有两种方法支付,一种是在装置建设时一次付清,另一种是按产品数量支付一定数额的专利费。即使是大企业单位自己的专利,也应在生产成本中加入专利权费,以利于促进采用新工艺新技术。

2.3.1.8 维护检修费

若装置要长期稳定运转,不论设备是否已有故障,必须定期维护检修,其费用占固定资本的3%~10%,复杂和有严重腐蚀的装置取上限,一般可取5%~6%。

2.3.2 固定费用

固定费用是不论工厂是否开工都要支付和固定不变的费用,例如折旧、财产税、保险费和投资的利息等。

2.3.2.1 折旧

构成一个工厂的设备,建筑物和其他物质性财产,由于磨损,破旧或者过时等原因,其价值是逐年递减的,应把这部份损失作为生产支出计入成本,称为折旧。对于化工厂而言,折旧率的范围在9%~13%,腐蚀或磨损较严重者可取上限,有代表性的值是10%,厂房的折旧率可按3%计。

2.3.2.2 资金利息

我国基本建设原来实行拨款制,即只要工程项目得到批准,企业无偿地得到国家的投资。随着经济体制改革的深入,有可能部分项目将拨款制改为贷款,有部分项目经过国家批准可直接向国外借贷资本。如果建设过程中有贷款,贷款的利息必须计入成本。

2.3.2.3 保险费

按我国现行的保险费率乘以固定投资得保险费。

2.3.3 工厂管理费

2.3.3.1 全厂性费用

工厂管理费为工厂管理和组织生产所需要的全厂性费用。工厂要作为一个整体有效地运行,除了工厂行政管理部門外,还必须

建立一些设施,如医疗机构、食堂、浴室、娱乐设施、仓库和罐区、消防、通讯、运输装卸、车库、警卫和机、电、仪表修理等,所有这些部门的固定费用和经常费用都应按一定比例分摊至各装置,计入生产成本。

在没有详细设计资料时,这部分费用可按工厂生产成本的5%~15%估计。

2.3.3.2 研究和开发费用

科学技术是第一生产力,这一名言正在逐渐被人们接受。要提高企业的经济效益,必须重视采用新工艺、新技术、新材料和新设备,因此应投入必要的研究和开发费用。研究开发费用包括有关人员的工资,研究设备和仪表的固定费用和操作费用,原材料费用,直接管理费和各杂项费用。对于重视新技术开发的国家或企业,这项费用高达销售收入的2%~5%,而不够重视的国家或企业其费用甚至不到1%。

2.3.4 销售费用

销售费用包括销售人员的工资、差旅费、广告费、运输费等。这项费用占总生产成本的1%~5%,较高值适用于新产品或者每位顾客购买量很少的产品,较低值适用于大宗产品。

2.4 税金和利润

除了极少数工厂是以社会福利或国家的其他利益为目的外,所有工厂都应有利润,工厂经营成果应以利润为其主要考核指标之一。

2.4.1 产值

产值是年产量和单位产品价格的乘积,即

$$\text{产值} = \text{产量} \times \text{单价}$$

为了避免在计划和统计工作中因各地、各时价格差异而造成

不可比的缺点,国家计委定期公布各种产品的不变价格。

2.4.2 销售收入

在商品经济规律起作用的社会中,若产品质量或规格不符合市场需要,产品会发生积压滞销的现象。因此,不是全部产品,而是只有出售的产品才会给社会和企业带来效益,销售量比产量更重要。但对一个经营正常的工厂,其产量应等于销售量,否则产品长期积压就要迫使工厂停工。

销售收入是产品出售后收入,其数值等于销售量和现行市场价格的乘积。

2.4.3 利润

销售收入减去单位销售成本和销售量的乘积就是企业的盈利。

$$\text{盈 利} = (\text{销售单价} - \text{单位销售成本}) \times \text{销售量}$$

盈利又称纯收入或毛利,它是企业为社会创造的新增价值。毛利扣除销售税金后称为销售利润,毛利扣除所有上缴给国家的税收后是企业的净收入,称为净利润。若销售单价低于单位销售成本则企业出现亏损。

2.4.4 税金

税金是国家根据税法无偿征收企业的一部分收入,以筹集财政资金,增加社会积累,并对经济活动进行调节,具有强制性的特征。税金体现了国家和企业之间的收入分配关系。

与化工企业有关的税收有下列两种,即增值税和所得税。

2.4.4.1 增值税

这是一种不管企业是盈利或亏损,都要缴纳的税收。应纳税额当期销项税额抵扣当期进项税额后的余额,进项税额等于原料和辅助材料等外购材料费乘以增值税率。销项税额等于销售额乘税率,销售额等于企业销售产品向购买方收取的全部价款和价外费

用,但不包括收取的销项税。

增值税率按照不同行业、不同产品由国家加以规定。一般生活必需品的税率低于非必需品的税率,例如对于水、电、煤、石油液化气、天然气、居民用煤炭制品、化肥、农药、饲料、农业用薄膜等产品的增值税率为 13%,其他产品为 17%。

2.4.4.2 所得税

这是一种对有盈利的企业所征收的税款。应纳税额为企业的一切收入减去准予扣除项目后的余额,税率为 33%。

收入包括生产经营收入,财产转让收入,利息、股息、租赁收入,特许权使用费收入等一切收入。准予扣除的项目是指与企业取得收入有关的成本、费用和损失,不得扣除与取得收入无关的各项支出如资本性支出,无形资产受让,开发支出和各种罚款等。

2.5 经济评价的几个基本概念和准则

所有的工程项目都要投入资金,资金的投入必须证明是合算的。在项目确立前,要比较几种方案(包括存银行和买债券)的得益大小;当项目确立后开展设计工作时,若可供选择的方案多于一个,还应对各种方案进行经济效益的比较。以上这两种过程都称为经济评价。

项目经济评价按是否考虑金钱的时间价值分为静态评价和动态评价两大类,评价的指标有时间指标,金钱指标和利润指标三种。

2.5.1 现金流通图^[3]

在工程项目寿命期内预计现金的流通情况是很有用的,可用现金流通图来表示,该图给出任一时刻项目预计的现金位值。一个工程项目,例如一个新化工厂的典型累计现金流通图示于图 2-1 曲线图中,把支出看作负现金流通,把收入看作正现金流通。工程项目从时刻 0 开始,其现金位值为 0。工程项目开始时,资金用于

勘察设计,并随着设计工作的进展,现金流通的负值逐渐增大。当大量开支用于设备、上建等建设工作时,曲线在 A 点的负斜率急剧增加。建设完成时,投入流动资金并开始投产运转。开车完成后,在 B 点开始生产和销售。随着销售收入超过生产和经营成本,曲线开始上升,在 C 点,曲线通过累计现金流通值为 0 处,即所得收入至此刚好与以前用于该工程项目的支出相平衡,这一点称为盈亏平衡点。随着项目继续进行,累计正现金流通位值持续增加。项目终止时,由于回收流动资金和工厂残值(如果有的话),还可收入一笔最后的现金流通。

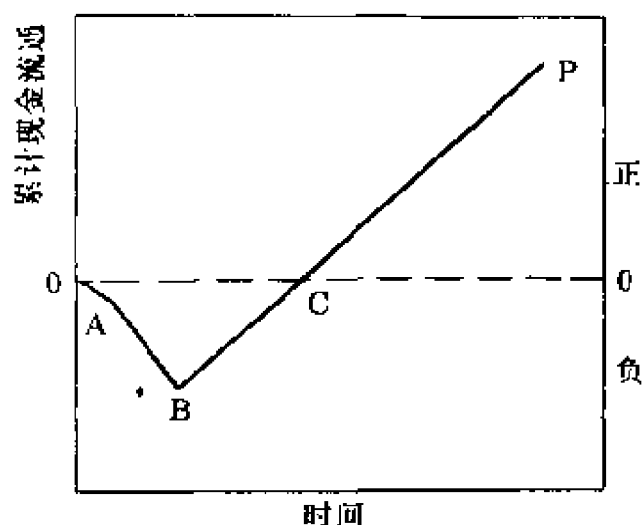


图 2-1 累计现金流通图

(本图引自参考文献[3])

最大累计负现金流通通可以看成是建厂引起的债务。随着项目的继续,此债务由正现金流通来偿还。就经济分析和评价而言,所有这些现金流通都是在该工程项目整个寿命期间发生的,即在将来发生的。因此有必要给这些现金流通以某种标准的或共同的基准,以便对发生于将来不同时刻的现金流通进行比较。

2.5.2 金钱的时间价值^[3]

2.5.2.1 利息与折现因子

将金钱存入银行,经过若干时间可以得到利息。原来存入的金钱称为本金,单位时间内利息与本金的比率称为利率。利率通常以年作为时间单位。利息有两种计算方法,即单利和复利。单利仅本金生息,到期后,利息不加入本金中再生息,而复利则是到期后利息作为下一期本金计息。

如令 P = 本金

i = 利率

s = 期末本金和利息

n = 计息周期数

对于单利 $s = P(1 + n \cdot i)$ (2-47)

对于复利 $s = P(1 + i)^n$ (2-48)

P 又称为将来付款额 s 的现值,将 s 折合成现值 P 的系数 $1/(1+i)^n$ 称为折现因子。

若计算周期不是 1 年,为方便起见,利率仍以年利率表示,这时称为名义利率,每个计息周期的利率为名义利率除以每年计息次数,若名义利率相同,则计息周期越短,按复利计算的利息越多。

由此可见,金钱随着时间的推移是增值的,若年利率为 10%,今年将 1000 元存入银行,一年后可得本息和 1100 元,两年后可得本息和 1210 元,即银行愿意用一年后的 1100 或二年后的 1210 元来换取今天的 1000 元;而存款者愿意用今天的 1000 元换取一年后的 1100 元或二年后的 1210 元。换言之,今年的 1000 元和明年的 1100 元,和后年的 1210 元是等值的,而今年的 1000 元和明年的 1000 元是不等值的。这种金钱的价值随着时间的推移而发生的变化称为金钱的时间价值。

对于企业而言,金钱几乎是连续地从企业流进和流出,因此,采用连续复利的概念更为符合实际。连续复利是假设计息周期无限小时的复利,用微积分的概念可以容易地求取连续复利时的折现因子。

表 2-25^① 基准点后某一时刻发生的现金流通的折现因子

100it = 百分率利润率 × 基准点后的年数

100it	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
0	1.0000	0.9901	0.9802	0.9704	0.9608	0.9512	0.9418	0.9324	0.9231	0.9139
10	0.9048	0.8958	0.8869	0.8781	0.8694	0.8607	0.8521	0.8437	0.8353	0.8270
20	0.8187	0.8106	0.8025	0.7945	0.7865	0.7788	0.7711	0.7634	0.7558	0.7483
30	0.7408	0.7334	0.7261	0.7189	0.7118	0.7047	0.6977	0.6907	0.6839	0.6771
40	0.6703	0.6637	0.6570	0.6505	0.6440	0.6376	0.6313	0.6250	0.6188	0.6126
50	0.6065	0.6005	0.5945	0.5886	0.5827	0.5770	0.5712	0.5655	0.5599	0.5543
60	0.5488	0.5434	0.5379	0.5326	0.5273	0.5220	0.5169	0.5117	0.5066	0.5016
70	0.4966	0.4916	0.4868	0.4819	0.4771	0.4724	0.4677	0.4630	0.4584	0.4538
80	0.4493	0.4449	0.4404	0.4360	0.4317	0.4274	0.4232	0.4190	0.4148	0.4107
90	0.4066	0.4025	0.3985	0.3946	0.3906	0.3867	0.3829	0.3791	0.3753	0.3716
100	0.3679	0.3642	0.3606	0.3570	0.3535	0.3499	0.3465	0.3430	0.3396	0.3362
110	0.3329	0.3296	0.3263	0.3230	0.3198	0.3166	0.3135	0.3104	0.3073	0.3042
120	0.3012	0.2982	0.2952	0.2923	0.2894	0.2865	0.2837	0.2808	0.2780	0.2753
130	0.2725	0.2698	0.2671	0.2645	0.2618	0.2592	0.2567	0.2541	0.2516	0.2491
140	0.2466	0.2441	0.2417	0.2393	0.2369	0.2346	0.2322	0.2299	0.2276	0.2254
150	0.2231	0.2209	0.2187	0.2165	0.2144	0.2122	0.2101	0.2080	0.2060	0.2039
160	0.2019	0.1999	0.1979	0.1959	0.1940	0.1921	0.1901	0.1882	0.1864	0.1845
170	0.1827	0.1809	0.1791	0.1773	0.1755	0.1738	0.1720	0.1703	0.1686	0.1670
180	0.1653	0.1637	0.1620	0.1604	0.1588	0.1572	0.1557	0.1541	0.1526	0.1511
190	0.1496	0.1481	0.1466	0.1451	0.1437	0.1423	0.1409	0.1395	0.1381	0.1367
200	0.1353	0.1340	0.1327	0.1313	0.1300	0.1287	0.1275	0.1262	0.1249	0.1237
210	0.1225	0.1212	0.1200	0.1188	0.1177	0.1165	0.1153	0.1142	0.1130	0.1119
220	0.1108	0.1097	0.1086	0.1075	0.1065	0.1054	0.1044	0.1033	0.1023	0.1013
230	0.1003	0.0993	0.0983	0.0973	0.0963	0.0954	0.0944	0.0935	0.0926	0.0916
240	0.0907	0.0898	0.0889	0.0880	0.0872	0.0863	0.0854	0.0846	0.0837	0.0829
250	0.0821	0.0813	0.0805	0.0797	0.0789	0.0781	0.0773	0.0765	0.0758	0.0750
260	0.0743	0.0735	0.0728	0.0721	0.0714	0.0707	0.0699	0.0693	0.0686	0.0679
270	0.0672	0.0665	0.0659	0.0652	0.0646	0.0639	0.0633	0.0627	0.0620	0.0614
280	0.0608	0.0602	0.0596	0.0590	0.0584	0.0578	0.0573	0.0567	0.0561	0.0556
290	0.0550	0.0545	0.0539	0.0534	0.0529	0.0523	0.0518	0.0513	0.0508	0.0503
300	0.0498	0.0493	0.0488	0.0483	0.0478	0.0474	0.0469	0.0464	0.0460	0.0455
310	0.0450	0.0446	0.0442	0.0437	0.0433	0.0429	0.0424	0.0420	0.0416	0.0412
320	0.0408	0.0404	0.0400	0.0396	0.0392	0.0388	0.0384	0.0380	0.0376	0.0373
330	0.0369	0.0365	0.0362	0.0358	0.0354	0.0351	0.0347	0.0344	0.0340	0.0337
340	0.0334	0.0330	0.0327	0.0324	0.0321	0.0317	0.0314	0.0311	0.0308	0.0305
350	0.0302	0.0299	0.0296	0.0293	0.0290	0.0287	0.0284	0.0282	0.0279	0.0276
360	0.0273	0.0271	0.0268	0.0265	0.0263	0.0260	0.0257	0.0255	0.0252	0.0250
370	0.0247	0.0245	0.0242	0.0240	0.0238	0.0235	0.0233	0.0231	0.0228	0.0226
380	0.0224	0.0221	0.0219	0.0217	0.0215	0.0213	0.0211	0.0209	0.0207	0.0204
390	0.0202	0.0200	0.0198	0.0196	0.0194	0.0193	0.0191	0.0189	0.0187	0.0185
400	0.0183	0.0181	0.0180	0.0178	0.0176	0.0174	0.0172	0.0171	0.0169	0.0167
410	0.0166	0.0164	0.0162	0.0161	0.0159	0.0158	0.0156	0.0155	0.0153	0.0151
420	0.0150	0.0148	0.0147	0.0146	0.0144	0.0143	0.0141	0.0140	0.0138	0.0137

续表

100it	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
430	0.0136	0.0134	0.0133	0.0132	0.0130	0.0129	0.0128	0.0127	0.0125	0.0124
440	0.0123	0.0122	0.0120	0.0119	0.0118	0.0117	0.0116	0.0114	0.0113	0.0112
450	0.0111	0.0110	0.0109	0.0108	0.0107	0.0106	0.0105	0.0104	0.0103	0.0102
460	0.0101	0.0100	0.0099	0.0098	0.0097	0.0096	0.0095	0.0094	0.0093	0.0092
470	0.0091	0.0090	0.0089	0.0088	0.0087	0.0087	0.0086	0.0085	0.0084	0.0083
480	0.0082	0.0081	0.0081	0.0080	0.0079	0.0078	0.0078	0.0077	0.0076	0.0075
490	0.0074	0.0074	0.0073	0.0072	0.0072	0.0071	0.0070	0.0069	0.0069	0.0068
100it	0	10	20	30	40	50	60	70	80	90
500	0.0067	0.0066	0.0065	0.0065	0.0064	0.0064	0.0063	0.0063	0.0063	0.0062
600	0.0025	0.0022	0.0020	0.0018	0.0017	0.0015	0.0014	0.0012	0.0011	0.0010
700	0.0009	0.0008	0.0007	0.0007	0.0006	0.0006	0.0005	0.0005	0.0004	0.0004
800	0.0003	0.0003	0.0003	0.0002	0.0002	0.0002	0.0002	0.0002	0.0002	0.0001
900	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001
1000	0.0000									

①表 2-25 引自参考文献[3]。

表 2-26^① 基准点起数年期间均匀发生的现金流通的折现因子

100it = 百分率利润率 × 基准点起期间的年数

100it	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
0	1.0000	0.9950	0.9901	0.9851	0.9803	0.9754	0.9706	0.9658	0.9610	0.9563
10	0.9516	0.9470	0.9423	0.9377	0.9332	0.9286	0.9241	0.9196	0.9152	0.9107
20	0.9063	0.9020	0.8976	0.8933	0.8891	0.8848	0.8806	0.8764	0.8722	0.8681
30	0.8639	0.8598	0.8558	0.8517	0.8477	0.8438	0.8398	0.8359	0.8319	0.8281
40	0.8242	0.8204	0.8166	0.8128	0.8090	0.8053	0.8016	0.7979	0.7942	0.7906
50	0.7869	0.7833	0.7798	0.7762	0.7727	0.7692	0.7657	0.7622	0.7588	0.7554
60	0.7520	0.7486	0.7452	0.7419	0.7386	0.7353	0.7320	0.7288	0.7256	0.7224
70	0.7192	0.7160	0.7128	0.7097	0.7066	0.7035	0.7004	0.6974	0.6944	0.6913
80	0.6883	0.6854	0.6824	0.6795	0.6765	0.6736	0.6707	0.6679	0.6650	0.6622
90	0.6594	0.6566	0.6537	0.6510	0.6483	0.6455	0.6428	0.6401	0.6374	0.6348
100	0.6321	0.6295	0.6269	0.6243	0.6217	0.6191	0.6166	0.6140	0.6115	0.6090
110	0.6065	0.6040	0.6016	0.5991	0.5967	0.5942	0.5918	0.5894	0.5871	0.5847
120	0.5823	0.5800	0.5777	0.5754	0.5731	0.5708	0.5685	0.5663	0.5641	0.5618
130	0.5596	0.5574	0.5552	0.5530	0.5509	0.5487	0.5466	0.5444	0.5424	0.5402
140	0.5381	0.5361	0.5340	0.5320	0.5299	0.5279	0.5259	0.5239	0.5219	0.5199
150	0.5179	0.5160	0.5140	0.5121	0.5102	0.5082	0.5064	0.5044	0.5026	0.5007
160	0.4988	0.4970	0.4952	0.4933	0.4915	0.4897	0.4879	0.4861	0.4843	0.4825
170	0.4808	0.4790	0.4773	0.4756	0.4739	0.4721	0.4704	0.4687	0.4671	0.4654
180	0.4637	0.4621	0.4605	0.4588	0.4571	0.4555	0.4540	0.4523	0.4508	0.4491
190	0.4476	0.4460	0.4445	0.4428	0.4414	0.4399	0.4383	0.4368	0.4354	0.4338
200	0.4323	0.4308	0.4294	0.4279	0.4265	0.4250	0.4236	0.4221	0.4207	0.4193
210	0.4179	0.4165	0.4151	0.4137	0.4123	0.4109	0.4096	0.4082	0.4069	0.4055
220	0.4042	0.4029	0.4015	0.4002	0.3989	0.3976	0.3965	0.3950	0.3937	0.3925
230	0.3912	0.3899	0.3887	0.3874	0.3862	0.3849	0.3837	0.3825	0.3813	0.3801
240	0.3789	0.3777	0.3765	0.3753	0.3741	0.3729	0.3718	0.3706	0.3695	0.3683

续表

100it	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
250	0.3672	0.3660	0.3649	0.3638	0.3627	0.3615	0.3604	0.3593	0.3582	0.3571
260	0.3560	0.3550	0.3539	0.3528	0.3517	0.3507	0.3496	0.3486	0.3476	0.3465
270	0.3455	0.3445	0.3434	0.3424	0.3414	0.3404	0.3393	0.3384	0.3374	0.3364
280	0.3354	0.3344	0.3335	0.3325	0.3315	0.3306	0.3296	0.3287	0.3277	0.3268
290	0.3259	0.3249	0.3240	0.3231	0.3221	0.3212	0.3203	0.3194	0.3185	0.3176
300	0.3167	0.3158	0.3150	0.3141	0.3132	0.3123	0.3115	0.3106	0.3098	0.3089
310	0.3080	0.3072	0.3064	0.3055	0.3047	0.3039	0.3030	0.3022	0.3014	0.3006
320	0.2998	0.2990	0.2982	0.2974	0.2966	0.2958	0.2950	0.2942	0.2934	0.2926
330	0.2919	0.2911	0.2903	0.2896	0.2888	0.2880	0.2873	0.2865	0.2858	0.2850
340	0.2843	0.2836	0.2828	0.2821	0.2814	0.2807	0.2799	0.2792	0.2785	0.2778
350	0.2771	0.2764	0.2757	0.2750	0.2743	0.2736	0.2729	0.2722	0.2715	0.2709
360	0.2702	0.2695	0.2688	0.2682	0.2675	0.2669	0.2662	0.2655	0.2649	0.2642
370	0.2636	0.2626	0.2623	0.2617	0.2610	0.2604	0.2598	0.2591	0.2585	0.2579
380	0.2573	0.2567	0.2560	0.2554	0.2548	0.2542	0.2536	0.2530	0.2524	0.2518
390	0.2512	0.2506	0.2500	0.2495	0.2489	0.2483	0.2477	0.2471	0.2466	0.2450
400	0.2454	0.2449	0.2443	0.2437	0.2432	0.2426	0.2421	0.2415	0.2410	0.2404
410	0.2399	0.2393	0.2388	0.2382	0.2377	0.2372	0.2366	0.2361	0.2356	0.2350
420	0.2345	0.2340	0.2335	0.2330	0.2325	0.2319	0.2314	0.2309	0.2304	0.2299
430	0.2294	0.2289	0.2284	0.2279	0.2274	0.2269	0.2264	0.2259	0.2255	0.2250
440	0.2245	0.2240	0.2235	0.2230	0.2226	0.2221	0.2216	0.2212	0.2207	0.2202
450	0.2198	0.2193	0.2188	0.2184	0.2179	0.2175	0.2170	0.2166	0.2161	0.2157
460	0.2152	0.2148	0.2143	0.2139	0.2134	0.2130	0.2126	0.2121	0.2117	0.2113
470	0.2108	0.2104	0.2100	0.2096	0.2091	0.2087	0.2083	0.2079	0.2074	0.2070
480	0.2066	0.2062	0.2058	0.2054	0.2050	0.2046	0.2042	0.2038	0.2034	0.2030
490	0.2026	0.2022	0.2018	0.2014	0.2010	0.2006	0.2002	0.1998	0.1994	0.1990
100it	0	10	20	30	40	50	60	70	80	90
500	0.1987	0.1949	0.1912	0.1877	0.1843	0.1811	0.1779	0.1749	0.1719	0.1960
600	0.1663	0.1636	0.1610	0.1584	0.1560	0.1536	0.1513	0.1491	0.1469	0.1448
700	0.1427	0.1407	0.1388	0.1369	0.1351	0.1333	0.1315	0.1298	0.1282	0.1265
800	0.1250	0.1234	0.1219	0.1206	0.1190	0.1176	0.1163	0.1149	0.1136	0.1123
900	0.1111	0.1099	0.1087	0.1075	0.1064	0.1053	0.1043	0.1031	0.1020	0.1010
1000	0.1000	0.0990	0.0980	0.0971	0.0962	0.0952	0.0943	0.0935	0.0926	0.0917
1100	0.0909	0.0901	0.0893	0.0885	0.0877	0.0869	0.0862	0.0855	0.0847	0.0840
1200	0.0833	0.0826	0.0820	0.0813	0.0806	0.0800	0.0794	0.0787	0.0781	0.0775
1300	0.0769	0.0763	0.0758	0.0752	0.0746	0.0741	0.0735	0.0730	0.0725	0.0719
1400	0.0714	0.0709	0.0704	0.0699	0.0694	0.0690	0.0685	0.0680	0.0676	0.0671
1500	0.0667	0.0662	0.0658	0.0654	0.0649	0.0645	0.0641	0.0637	0.0633	0.0629
1600	0.0625	0.0621	0.0617	0.0613	0.0610	0.0606	0.0602	0.0599	0.0595	0.0592
1700	0.0588	0.0585	0.0581	0.0578	0.0575	0.0571	0.0568	0.0565	0.0562	0.0559
1800	0.0556	0.0552	0.0549	0.0546	0.0543	0.0541	0.0538	0.0535	0.0532	0.0529
1900	0.0526	0.0524	0.0521	0.0518	0.0515	0.0513	0.0510	0.0508	0.0505	0.0502
2000	0.0500									

①表 2-26 引自参考文献[3]

表 2-27^{*} 基准点后一年间均匀发生的现金流通的折现因子

年	1%	2%	3%	4%	5%	6%	7%	8%	9%	10%
0~1	0.9950	0.9901	0.9851	0.9803	0.9754	0.9706	0.9658	0.9610	0.9563	0.9516
1~2	0.9851	0.9705	0.9560	0.9418	0.9273	0.9141	0.9005	0.8872	0.8740	0.8611
2~3	0.9753	0.9512	0.9278	0.9049	0.8826	0.8608	0.8396	0.8189	0.7988	0.7791
3~4	0.9656	0.9324	0.9004	0.8694	0.8395	0.8107	0.7829	0.7560	0.7300	0.7050
4~5	0.9560	0.9140	0.8737	0.8353	0.7986	0.7635	0.7299	0.6979	0.6672	0.6379
5~6	0.9465	0.8959	0.8479	0.8026	0.7596	0.7190	0.6806	0.6442	0.6098	0.5772
6~7	0.9371	0.8781	0.8229	0.7711	0.7226	0.6772	0.6346	0.5947	0.5573	0.5223
7~8	0.9278	0.8607	0.7985	0.7409	0.6874	0.6377	0.5917	0.5490	0.5093	0.4726
8~9	0.9185	0.8437	0.7749	0.7118	0.6538	0.6006	0.5517	0.5068	0.4655	0.4276
9~10	0.9094	0.8270	0.7520	0.6839	0.6219	0.5656	0.5144	0.4678	0.4254	0.3869
10~11	0.9003	0.8106	0.7298	0.6571	0.5916	0.5327	0.4796	0.4318	0.3888	0.3501
11~12	0.8914	0.7946	0.7082	0.6312	0.5628	0.5016	0.4472	0.3986	0.3553	0.3168
12~13	0.8825	0.7788	0.6873	0.6065	0.5353	0.4724	0.4169	0.3680	0.3248	0.2866
13~14	0.8737	0.7634	0.6670	0.5827	0.5092	0.4449	0.3888	0.3397	0.2968	0.2593
14~15	0.8650	0.7483	0.6473	0.5599	0.4844	0.4190	0.3625	0.3136	0.2713	0.2347
15~16	0.8564	0.7335	0.6282	0.5380	0.4608	0.3946	0.3380	0.2895	0.2479	0.2123
16~17	0.8479	0.7189	0.6096	0.5169	0.4383	0.3716	0.3151	0.2672	0.2266	0.1921
17~18	0.8395	0.7047	0.5916	0.4966	0.4169	0.3500	0.2938	0.2467	0.2071	0.1739
18~19	0.8311	0.6908	0.5741	0.4772	0.3966	0.3296	0.2740	0.2277	0.1893	0.1573
19~20	0.8228	0.6771	0.5571	0.4584	0.3772	0.3104	0.2554	0.2102	0.1730	0.1423
20~21	0.8147	0.6637	0.5407	0.4405	0.3588	0.2923	0.2382	0.1940	0.1581	0.1288
21~22	0.8065	0.6505	0.5247	0.4232	0.3413	0.2753	0.2221	0.1791	0.1445	0.1165
22~23	0.7985	0.6376	0.5092	0.4066	0.3247	0.2593	0.2071	0.1653	0.1320	0.1054
23~24	0.7906	0.6250	0.4941	0.3907	0.3089	0.2442	0.1931	0.1526	0.1207	0.0954
24~25	0.7827	0.6126	0.4795	0.3753	0.2938	0.2300	0.1800	0.1409	0.1103	0.0863
25~30	0.7596	0.5772	0.4386	0.3334	0.2535	0.1928	0.1465	0.1115	0.0849	0.0640
30~35	0.7226	0.5223	0.3775	0.2730	0.1974	0.1428	0.1033	0.0748	0.0541	0.0392
35~40	0.6874	0.4726	0.3250	0.2235	0.1538	0.1058	0.0728	0.0501	0.0345	0.0238
40~45	0.6538	0.4276	0.2797	0.1830	0.1197	0.0784	0.0513	0.0336	0.0220	0.0144
45~50	0.6219	0.3869	0.2407	0.1498	0.0933	0.0581	0.0362	0.0225	0.0140	0.0087
年	11%	12%	13%	14%	15%	16%	17%	18%	19%	20%
0~1	0.9470	0.9423	0.9377	0.9332	0.9286	0.9241	0.9196	0.9152	0.9107	0.9063
1~2	0.8483	0.8358	0.8234	0.8112	0.7993	0.7875	0.7759	0.7644	0.7531	0.7421
2~3	0.7600	0.7413	0.7230	0.7053	0.6879	0.6710	0.6546	0.6385	0.6228	0.6075
3~4	0.6808	0.6574	0.6349	0.6131	0.5921	0.5718	0.5522	0.5333	0.5150	0.4974
4~5	0.6099	0.5831	0.5575	0.5330	0.5096	0.4873	0.4659	0.4455	0.4259	0.4072
5~6	0.5463	0.5174	0.4895	0.4631	0.4386	0.4152	0.3931	0.3721	0.3522	0.3334
6~7	0.4894	0.4588	0.4299	0.4029	0.3775	0.3538	0.3316	0.3108	0.2913	0.2730
7~8	0.4385	0.4069	0.3775	0.3502	0.3250	0.3015	0.2798	0.2596	0.2409	0.2235
8~9	0.3928	0.3609	0.3314	0.3047	0.2797	0.2569	0.2360	0.2168	0.1992	0.1830
9~10	0.3519	0.3201	0.2910	0.2647	0.2407	0.2189	0.1991	0.1811	0.1647	0.1498

续表

年	11%	12%	13%	14%	15%	16%	17%	18%	19%	20%
10~11	0.3512	0.2839	0.2556	0.2301	0.2072	0.1866	0.1680	0.1513	0.1362	0.1227
11~12	0.2824	0.2518	0.2244	0.2000	0.1783	0.1590	0.1417	0.1254	0.1126	0.1004
12~13	0.2530	0.2235	0.1970	0.1739	0.1535	0.1355	0.1196	0.1055	0.0932	0.0822
13~14	0.2266	0.1981	0.1730	0.1512	0.1321	0.1154	0.1009	0.0882	0.0770	0.0673
14~15	0.2030	0.1757	0.1519	0.1314	0.1137	0.0984	0.0851	0.0736	0.0637	0.0551
15~16	0.1819	0.1558	0.1334	0.1143	0.0979	0.0838	0.0718	0.0615	0.0527	0.0451
16~17	0.1629	0.1382	0.1172	0.0993	0.0842	0.0714	0.0606	0.0514	0.0436	0.0369
17~18	0.1460	0.1225	0.1029	0.0864	0.0725	0.0609	0.0511	0.0429	0.0360	0.0303
18~19	0.1308	0.1087	0.0903	0.0751	0.0624	0.0519	0.0431	0.0358	0.0298	0.0248
19~20	0.1171	0.0964	0.0793	0.0653	0.0537	0.0442	0.0364	0.0299	0.0246	0.0203
20~21	0.1049	0.0855	0.0697	0.0568	0.0462	0.0377	0.0307	0.0250	0.0204	0.0166
21~22	0.0940	0.0758	0.0612	0.0493	0.0398	0.0321	0.0259	0.0209	0.0169	0.0136
22~23	0.0842	0.0673	0.0587	0.0429	0.0343	0.0274	0.0219	0.0175	0.0139	0.0111
23~24	0.0754	0.0596	0.0472	0.0373	0.0295	0.0233	0.0184	0.0146	0.0115	0.0091
24~25	0.0676	0.0529	0.0414	0.0324	0.0254	0.0199	0.0156	0.0122	0.0095	0.0075
25~30	0.0492	0.0374	0.0285	0.0217	0.0165	0.0126	0.0096	0.0073	0.0056	0.0043
30~35	0.0284	0.0205	0.0149	0.0108	0.0078	0.0057	0.0041	0.0030	0.0022	0.0016
35~40	0.0164	0.0113	0.0078	0.0054	0.0037	0.0025	0.0018	0.0012	0.0008	0.0006
40~45	0.0094	0.0062	0.0041	0.0027	0.0017	0.0011	0.0008	0.0005	0.0003	0.0002
45~50	0.0054	0.0032	0.0021	0.0013	0.0008	0.0005	0.0003	0.0002	0.0001	0.0001

年	21%	22%	23%	24%	25%	26%	27%	28%	29%	30%
0~1	0.9020	0.8976	0.8933	0.8890	0.8848	0.8806	0.8764	0.8722	0.8681	0.8640
1~2	0.7311	0.7204	0.7098	0.6993	0.6891	0.6790	0.6690	0.6592	0.6495	0.6400
2~3	0.5926	0.5781	0.5639	0.5501	0.5367	0.5235	0.5107	0.4982	0.4860	0.4741
3~4	0.4804	0.4639	0.4481	0.4327	0.4179	0.4037	0.3899	0.3765	0.3637	0.3515
4~5	0.3894	0.3723	0.3560	0.3404	0.3255	0.3115	0.2976	0.2846	0.2721	0.2602
5~6	0.3156	0.2988	0.2829	0.2678	0.2535	0.2400	0.2272	0.2151	0.2036	0.1928
6~7	0.2558	0.2398	0.2247	0.2106	0.1974	0.1850	0.1734	0.1626	0.1524	0.1428
7~8	0.2074	0.1924	0.1786	0.1657	0.1538	0.1427	0.1324	0.1229	0.1140	0.1058
8~9	0.1681	0.1544	0.1419	0.1303	0.1197	0.1100	0.1011	0.0929	0.0853	0.0784
9~10	0.1363	0.1239	0.1127	0.1025	0.0933	0.0848	0.0772	0.0702	0.0638	0.0581
10~11	0.1105	0.0995	0.0896	0.0807	0.0726	0.0654	0.0589	0.0530	0.0478	0.0430
11~12	0.0895	0.0798	0.0711	0.0634	0.0566	0.0504	0.0450	0.0401	0.0357	0.0319
12~13	0.0726	0.0641	0.0565	0.0499	0.0441	0.0389	0.0343	0.0303	0.0267	0.0236
13~14	0.0588	0.0514	0.0449	0.0393	0.0343	0.0300	0.0262	0.0229	0.0200	0.0175
14~15	0.0477	0.0413	0.0357	0.0309	0.0267	0.0231	0.0200	0.0173	0.0150	0.0130
15~16	0.0387	0.0331	0.0284	0.0243	0.0208	0.0178	0.0153	0.0131	0.0112	0.0096
16~17	0.0313	0.0266	0.0225	0.0191	0.0162	0.0137	0.0117	0.0099	0.0084	0.0071
17~18	0.0254	0.0213	0.0179	0.0150	0.0126	0.0106	0.0089	0.0075	0.0063	0.0053
18~19	0.0206	0.0171	0.0142	0.0118	0.0098	0.0082	0.0068	0.0057	0.0047	0.0039
19~20	0.0167	0.0137	0.0113	0.0093	0.0077	0.0063	0.0052	0.0043	0.0035	0.0029

续表

年	21%	22%	23%	24%	25%	26%	27%	28%	29%	30%
20~21	0.0135	0.0110	0.0090	0.0073	0.0060	0.0049	0.0040	0.0032	0.0026	0.0021
21~22	0.0110	0.0088	0.0071	0.0058	0.0046	0.0038	0.0030	0.0024	0.0020	0.0016
22~23	0.0089	0.0071	0.0057	0.0045	0.0036	0.0029	0.0023	0.0018	0.0015	0.0012
23~24	0.0072	0.0057	0.0045	0.0036	0.0028	0.0022	0.0018	0.0014	0.0011	0.0009
24~25	0.0058	0.0046	0.0036	0.0028	0.0022	0.0017	0.0013	0.0011	0.0008	0.0007
25~30	0.0032	0.0025	0.0019	0.0014	0.0011	0.0008	0.0006	0.0005	0.0004	0.0003
30~35	0.0011	0.0008	0.0006	0.0004	0.0003	0.0002	0.0002	0.0001	0.0001	0.0001
35~40	0.0004	0.0003	0.0002	0.0001	0.0001	0.0001				
40~45	0.0001	0.0001	0.0001							
年	31%	32%	33%	34%	35%	36%	37%	38%	39%	40%
0~1	0.8598	0.8558	0.8517	0.8477	0.8438	0.8398	0.8359	0.8319	0.8281	0.8242
1~2	0.6307	0.6214	0.6123	0.6034	0.5946	0.5859	0.5774	0.5689	0.5606	0.5525
2~3	0.4626	0.4512	0.4402	0.4295	0.4190	0.4088	0.3988	0.3891	0.3796	0.3703
3~4	0.3393	0.3277	0.3165	0.3057	0.2953	0.2852	0.2755	0.2661	0.2570	0.2482
4~5	0.2488	0.2379	0.2275	0.2176	0.2081	0.1990	0.1903	0.1820	0.1740	0.1664
5~6	0.1825	0.1728	0.1636	0.1549	0.1466	0.1388	0.1314	0.1244	0.1178	0.1115
6~7	0.1339	0.1255	0.1176	0.1102	0.1033	0.0968	0.0908	0.0851	0.0798	0.0748
7~8	0.0982	0.0911	0.0845	0.0785	0.0728	0.0676	0.0627	0.0582	0.0540	0.0501
8~9	0.0720	0.0662	0.0608	0.0558	0.0513	0.0471	0.0433	0.0398	0.0366	0.0336
9~10	0.0528	0.0480	0.0437	0.0397	0.0362	0.0329	0.0299	0.0272	0.0248	0.0225
10~11	0.0387	0.0349	0.0314	0.0283	0.0255	0.0229	0.0207	0.0186	0.0168	0.0151
11~12	0.0284	0.0253	0.0226	0.0201	0.0180	0.0160	0.0143	0.0127	0.0113	0.0101
12~13	0.0208	0.0184	0.0162	0.0143	0.0127	0.0112	0.0099	0.0087	0.0077	0.0068
13~14	0.0153	0.0134	0.0117	0.0102	0.0089	0.0078	0.0068	0.0060	0.0052	0.0045
14~15	0.0112	0.0097	0.0084	0.0073	0.0063	0.0054	0.0047	0.0041	0.0035	0.0030
15~16	0.0082	0.0071	0.0060	0.0052	0.0044	0.0038	0.0033	0.0028	0.0024	0.0020
16~17	0.0060	0.0051	0.0043	0.0037	0.0031	0.0027	0.0022	0.0019	0.0016	0.0014
17~18	0.0044	0.0037	0.0031	0.0026	0.0022	0.0018	0.0015	0.0013	0.0011	0.0009
18~19	0.0032	0.0027	0.0023	0.0019	0.0016	0.0013	0.0011	0.0009	0.0007	0.0006
19~20	0.0024	0.0020	0.0016	0.0013	0.0011	0.0009	0.0007	0.0006	0.0005	0.0004
20~21	0.0017	0.0014	0.0012	0.0009	0.0008	0.0006	0.0005	0.0004	0.0003	0.0003
21~22	0.0013	0.0010	0.0008	0.0007	0.0005	0.0004	0.0004	0.0003	0.0002	0.0002
22~23	0.0009	0.0007	0.0006	0.0005	0.0004	0.0003	0.0002	0.0002	0.0002	0.0001
23~24	0.0007	0.0005	0.0004	0.0003	0.0003	0.0002	0.0002	0.0001	0.0001	0.0001
24~25	0.0005	0.0004	0.0003	0.0002	0.0002	0.0002	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001
25~30	0.0002	0.0002	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001				
30~35										
35~40										
40~45										

①表 2-27 引自参考文献[3]。

设 m 为每年计息周期数, i 是名义年利率, 则本金 p 经过 t 年后的将来付款 s 为:

$$s = p(1 + i/m)^{mt} \quad (2-49)$$

对于连续复利, m 趋近无穷大。

$$s = P \left\{ \lim_{m \rightarrow \infty} (1 + i/m)^{mt} \right\}$$

$$m \rightarrow \infty \quad \text{即 } i/m \rightarrow 0,$$

此时, $\lim_{m \rightarrow \infty} (1 + i/m)^{mt} = \lim_{m \rightarrow \infty} \{ (1 + i/m)^{m/i} \}^i = e^i$

$$\text{故} \quad s = Pe^i \quad (2-50)$$

$$\text{或} \quad P = se^{-i} \quad (2-51)$$

式中 e^{-i} 为连续复利时的折现因子。

2.5.2.2 均匀现金流通的现值

对每个工程项目至少在一部分时间内, 有些现金流通的速度是均匀的, 很容易计算出这种均匀现金流通的现值。假如现金流通速度为 \dot{R} , 在时间增量 dt 期间的流通将为 $\dot{R}dt$, 而流通的现值将为 $\dot{R}e^{-it}dt$ 。经过积分, 可以得出从时刻 0 到时刻 t 的总均匀现金流通的现值 P , 即

$$P = \int_0^t \dot{R}e^{-it}dt = \frac{\dot{R}(1 - e^{-it})}{i} \quad (2-52)$$

上述现值尚可写成

$$P = \frac{\dot{R}(1 - e^{-it})}{it} \quad (2-53)$$

式中 \dot{R} 是在 t 年时间内, 以每年 \dot{R} 美元的均匀速度发生的总现金流通, $(1 - e^{-it})/it$ 项是从基准点起在 t 年时间里均匀发生的现金流款项的折现因子。未来 t 年后一年内均匀现金流通的现值为

$$P = \frac{\dot{R}e^{-it}(1 - e^{-i})}{i} \quad (2-54)$$

为了使用方便, 表 2-25, 表 2-26, 表 2-27 列出了式(2-51), (2-52), (2-54)的折现因子。

例 2-4 若连续复利的名义利率的 10%, 在下述三种情况下,

目前应付出多少?

(1)两年后得到 1000 元。

(2)今后 10 年每年得到 1000 元。

(3)今后每年永远得到 1000 元。

解: $P = se^u$

$$i = 0.1$$

$$(1) t = 2 \quad P = 1000e^{-0.2} = 818.7$$

(2)每年年底得到 1000 元,需把 1, 2, … 直到 10 年后 1000 元的现值加起来。上述折现因子相加为

$$e^{-1} + e^{-2i} + \cdots + e^{-10i}$$

$$\text{因} \quad (1 + x + x^2 + \cdots + x^{m-1}) = \frac{1 - X^m}{1 - X}$$

$$\text{故} \quad e^{-i} + e^{-2i} + \cdots + e^{-(m-1)i} = \frac{1 - e^{-mi}}{1 - e^{-i}} - 1$$

$$= \frac{e^{-i} - e^{-mi}}{1 - e^{-i}} = \frac{1 - e^{-(m-1)i}}{e^i - 1} \quad (2-55)$$

$$\text{今} \quad m-1 = 10$$

$$\text{折现因子} = \frac{1 - e^{-1}}{e^{0.1} - 1} = \frac{1 - 0.3679}{1.105 - 1} = \frac{0.6321}{0.105} = 6.02$$

$$P = 1000 \times 6.02 = 6020$$

(3)若要每年得到 1000 元,必须使现值和将来付款额之差是 1000 元。

$$s - P = 1000$$

$$\text{对一年而言 } s = Pe^i$$

$$Pe^i - P = 1000$$

$$P = \frac{1000}{e^i - 1} = \frac{1000}{e^{0.1} - 1} = \frac{1000}{0.105} = 9524$$

2.5.3 静态评价方法^{[4][3][2]}

2.5.3.1 投资收益率(Rate of Return On Investment)

投资收益率常简称 ROI, 它的定义是年平均利润总额与项目投资之比, 但对于利润, 有不同的理解, 可以指净利(税后利润), 也

可以指毛利(税前利润)或净利加折旧,因此为了区别起见,把不同的利润定义的收益率取名如下:

利 润 定 义	投资收益率名称
净利	投资利润率
净利+折旧	投资利润折旧率
净利+各种税收	投资利税率

我国国家计委规定:

利润 $P_c = \text{年销售收入} - \text{年销售成本} - \text{年增值税}$, 即

利润 = 净利 + 所得税

投资 $I = \text{固定资本} + \text{流动资本} + \text{建设期利息}$

$ROI = P_c / I$

当算出 ROI 后究竟是否应该设资,要和基准投资收益率相比较,只有 ROI 高于基准值时项目才是可取的。我国目前尚无正式的基准投资收益率,中国人民建设银行在工业项目评估规定中,以 1984 年国营工业企业部门达到的投资收益作为基准。

基准投资利润率在西方发达国家是由各公司企业自行规定的,称为最低允许收益率(minimum acceptable rate of return),它和行业类别,风险情况,银行利率和投资政策等有关,表 2-28 列出了西方国家最低允许收益率的典型数值。

表 2-28^① 最低允许收益率典型值%

风险程度	项目类型	最低允许收益率——利率%
高度风险	工业化试验装置	20~100
有相当风险性	对企业而言是新装置	10~20
一般风险性	大规模改造	5~10
较少风险性	扩建、改造	1~5
极少风险性	成熟的降低成本措施	0~1

①表 2-28 引自参考文献[2]。

投资收益率的优点是简单,易于理解,对于方案比较和选择是很有用的,但缺点是忽略了现金流通的方式,因此比较粗略。

2.5.3.2 还本期(Payback Period 或 Payout Time)

还本期的含义是全部投资靠该项目收益加以回收所需要的时间。和投资收益率一样,有对投资和收益的定义问题。国外对还本期中投资的定义有两种:即可折旧投资和全部投资;而我国的定义是全部投资,包括固定资金和流动资金。对回收期规定从项目投资开始时算起,即包括建设期在内,但同时还应注明自投产开始算起的投资回收期。

还本期的优点是简单明了和直观,但缺点是没有考虑项目寿命的长短和还本期以后收益可能发生变化的情况,因此对项目评价时还应同时采用其他评价指标,以免导致错误的结论。

2.5.3.3 累计现金价值

从现金流通图可以直接读出项目的寿命结束时的累计现金位值,这个方法可用于方案比较,但同其他的静态评价方法的缺点一样,没有考虑投资和现金回收两者随着时间推移其价值是不相等的这一点。

2.5.3.4 增量评价法

对于一个企业或国家而言,其资金大于某个具体工程项目或某个方案所需。因此,怎样选择方案应从有效地利用全部资金这点出发。

如前文所述,每个企业或国家根据各自的情况,确定了最低允许收益率,如果增加的投资所得的收益大于最低允许收益率,则增加投资的方案是可取的。具体的方法是将投资方案按投资额大小从小到大顺序排列,求出各种方案的投资收益率和最低允许收益率并相比较,大于最低允许收益率的方案是可取方案,然后以可取方案为基准,再计算增量投资收益,若投资大的方案的收益率大于最低允许收益率,则保留投资大的方案,否则保留投资小的方案,如此反复进行直到全部方案比较完毕。现举例说明增量评价法的应用。

例 2-5 要给一个工业炉设置保温层,采用不同的保温层厚度有如下数据:

保温层厚度 mm	节约热量 kJ/h	保温层费用(元)
25	300,000	90,000
50	355,000	120,000
75	390,000	135,000
100	405,000	143,000

设年固定费用为固定投资的 10%，热量价值为每 1.5 元 10^6kJ ，工业炉每年操作 8000 小时，企业要求的最低允许收益率为 14%，试问应采用哪种保温层？

解：

(1) 求出各种保温厚度下的热量节约值，并求出投资收益率：

案编号	保温厚度 mm	热量节约 元/年	年净收益,元	ROI
1	25	36,000	$36,000 - 9,000 = 27,000$	30.0
2	50	42,600	$42,600 - 12,000 = 30,600$	25.5
3	75	47,000	$47,000 - 13,500 = 33,500$	24.8
4	100	48,600	$48,600 - 14,300 = 34,300$	24.0

4 个方案的 ROI 都大于 14%，因此都为可行方案。

(2) 以投资费用最低的方案 1 为基准，比较各方案的增量投资收益率：

方案 2 和方案 1 比较：

$$\frac{30,600 - 27,000}{120,000 - 90,000} = \frac{3600}{30,000} = 12\% < 14\%$$

取方案 1

方案 3 和方案 1 比较

$$\frac{33,500 - 27,000}{135,000 - 90,000} = \frac{6500}{45,000} = 14.4\% > 14\%$$

取方案 3

方案 4 和方案 3 比较

$$\frac{34,300 - 33,500}{143,000 - 135,000} = \frac{800}{8000} = 10\% < 14\%$$

最后确定取方案 3

2.5.4 动态评价方法^[17-31]

静态评价方法虽然简单,但是没有考虑资金的时间价值,要进行正确的投资分析与决策,必须把不同时间发生的现金流通,按照同一个时间进行换算,然后在相同的基准上进行比较和评价,这种方法称作为动态评价方法。

2.5.4.1 净现值法(Net Present Value NPV 或 Net Present Worth NPW)

净现值法是将现金流通的每个分量根据其发生的时刻计算其折现因子和现值,并将项目寿命期内每个分量的现值加和,得到该项目的净现值 NPV。若 $NPV > 0$,表示在规定的折现率下,项目有盈利;若 $NPV < 0$,则该方案不可取。若几个方案的 NPV 都大于 0,则取其中较大者。

净现值法考虑了金钱的时间价值,若采取的折现率是正确的,则所得利润也是正确的,但其缺点是不能反映所得净现值是由多少投资产生的,为避免这个缺点,可以同时采用净现值比法加以比较。

若无可靠的折现率数据时,应取几个不同的折现率分别计算其 NPV,以得到各种折现率下的项目的投资效益。

2.5.4.2 净现值比(Net Present Value Ratio, NPVR)

净现值比是净现值除以投资现值的比值,可以理解为考虑了金钱的时间价值的投资收益率。

现举例说明 NPV 和 NPVR 的比较。

例 2-6 有某项目,建设期为一年,寿命为 20 年,折现率为 0.12,现有 A、B 两个方案,其年投资收益和流动资金如下。

	方案 A	方案 B
投 资	100,000	160,000
每年收益	30,000	45,000
流动资金	10,000	15,000

试用 NPV 和 NPVR 比较其优劣

$$\begin{aligned} NPV(A) &= -100,000 - 10000e^{-0.12} + [30,000(\frac{1-e^{-(0.12)(20)}}{0.12}) \\ &+ 10,000e^{-2.4}]e^{-0.12} = -100,000 - 8869 + [30,000 \times 7.5775 + 10, \\ &000 \times 0.0907] \times 0.8869 = 93536 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} NPV(B) &= -160,000 - 15000 \times e^{-0.12} + [45,000 \times 7.5775 + \\ &15,000 \times 0.0907] \times 0.8869 \\ &= 130303 \end{aligned}$$

$$NPVR(A) = \frac{93536}{100000 + 8869} = 0.859$$

$$NPVR(B) = \frac{130303}{160000 + 13303} = 0.752$$

A 方案净现值比等于 0.859 的含义是：该项目除确保投资得到 12% 收益或偿还贷款的 12% 利息外，每元投资还带来 0.859 元的现金收入，而方案 B 是每元投资带来的 0.752 元的收入。

因此，用 NPV 为评价标准，方案 B 优于方案 A，而用 NPVR 作评价标准时，方案 A 优于方案 B。

2.5.4.3 折现现金流通 (Discounted Cash Flow DCF) 收益率 (Rate of Return)

折现现金流通收益率 (DCFRR) 又名内部收益率，它的定义是使该工程项目的净现值 NPV 为零时的折现率，也即当贷款利率为 DCFRR 时，该项目在整个寿命期内的收益刚好偿还本息，因此 DCFRR 表示工程项目的借贷资金所能负担的最高利率。当用 DCFRR 作为评价准则时，得到最大 DCFRR 的方案就是最佳的方案，但该 DCFRR 必须等于或高于贷款利率或最低允许收益率。

当用不同的准则导致不同的结论时，必须进一步仔细研究。各种评价准则都有不同的优缺点，都能从某一个方面为工程项目决策提供有用的信息，决策不应当只用某个单一的准则作为依据。

上述三种评价准则，NPV 着眼于投资的总效益，而 NPVR 和 DCFRR 都注意单位投资的效益，因此当投资目标是取得最大利润时，以 NPV 作为投资的决策准则较宜；如果资金有限，应把它分配给最有效的项目；在选项目时，用 DCFRR 或 NPVR 准则符合

适的。

2.5.4.4 动态还本期

当投资者特别关心投资的回收速度,又要考虑金钱的时间价值问题,可以采用动态还本期法。根据静态本期的定义,以投资开始的年份为基准,将各现金流通乘以折现因子得到折现现金流通量,然后按还本期的定义计算动态还本期。

今以例 2.7 说明各种评价方法的计算。

例 2-7 某石油化工厂准备建设一个年产 5 万吨的乙基苯装置,装置的固定资本为 3,000 万元,建设期为 2 年,在建设开始时支出 1500 万元,第二年初支出 1500 万元,于投产时投入流动资金 500 万元,一投产就满负荷运转并达到各种经济指标。每吨产品销售成本为 2000 元,销售价为 2600,增值税为每吨产品 135 元,所得税率为 33%,折现率 15%,折旧率 10%,装置寿命为 15 年。试按以下评价准则计算其投资效益指标。

- (1)ROI (2)静态还本期 (3)累计现金位值 (4)NPV
(5)NPVR (6)动态还本期 (7)DCFRR

解:(1)计算投产后的净利和现金流通量。

序号	项 目	计 算	数 值(万元)
1	销售收入	2600×50000	13000(13000)
2	销售成本	2000×50000	10000(9700)
3	经营收入	(1) - (2)	3000(3300)
4	折 旧	$30\,000\,000 \div 10$	300(0)
5	增值税	135×50000	675(675)
6	销售利润	(3) - (5)	2325(2625)
7	所得税	(6) \times 0.33	767(866)
8	净 利	(6) - (7)	1558(1759)
9	净利 + 折旧	(8) + (4)	1858(1759)
10	净利 + 税金	(8) + (7)	2325(2625)

注:括号内为 10 年后折旧完毕后的数字。

(2)列出各年度的现金流通,折现率为 15%时的折现现金流量及各自的累计量。

折现率=15%				单位:万元	
年度	现金流通	折现因子	折现现 金流通	累计现 金流通	累计折现 现金流通
-2	-1500	1.350	-2025	-1500	-2025
-1	-1500	1.162	-1743	-3000	-3768
0	-500	1	-500	-3500	-4268
0~1	1558	0.9286	1447	-1942	-2821
1~2	1558	0.7993	1245	-384	-1576
2~3	1558	0.6879	1072	1174	-504
3~4	1558	0.5921	922	2732	418
4~5	1558	0.5096	794	4290	1212
5~6	1558	0.4386	683	5848	1895
6~7	1558	0.3775	588	7406	2483
7~8	1558	0.3250	506	8964	2989
8~9	1558	0.2797	436	10522	3425
9~10	1558	0.2407	375	12080	3800
10~11	1759	0.2072	323	13839	4123
11~12	1759	0.1783	278	15598	4401
12~13	1759	0.1535	239	17357	4640
13~14	1759	0.1321	206	19116	4846
14~15	1759	0.1137	177	20875	5023
15	500	0.1054	53	21375	5076

(3)求解各种指标。

①ROI

$$\begin{aligned}
 \text{总投资} &= \text{固定资本} + \text{流动资本} + \text{建设期利息(按 15\% 计)} \\
 &= 3000 + 500 + 1500 \times 0.15 \times 2 + 1500 \times 0.15 \\
 &= 4175 \text{ 万元}
 \end{aligned}$$

$$\text{投资利润率} = 1558 / 4175 = 37.3\%$$

投资利润折旧率 $1858/4175=44.5\%$

投资利税率 $3000/4175=71.8\%$

②静态还本期

为投资利润折旧率的倒数 $1/0.445=2.25$ 年

若从投资日开始算起,则还本期为 $2.25+2=4.25$ 年

③累计现金位值 21375 万元

④NPV

列表上的 NPV 等于 5076 万元,但该表的基准时间为投产时间,按照我国的规定,应以投资开始时为基准,因此应将 5076 万元除以折现因子:

$$\frac{5076}{1.350}=3760 \text{ 万元}$$

⑤NPVR

NPVR 是净现值除以投资现值所得比值,与所取基准无关。

$$\text{NPVR} = \frac{5076}{4268} = 1.19$$

⑥动态还本期

从表中数字看出投产后三年累计折现现金流通量 -504,投产四年后为 +418,故动态还本期自投产后算起约为 3.6 年,从投资日算起为 5.6 年,比静态还本期时间长。

⑦DCFRR

DCFRR 不能直接计算,需用试差法,先以折现率 = 29% 计算,得到累计折现现金流通量为 155 万,再用折现率 = 29.5% 计算,得到累计折现现金流通量为 31 万,当用折现率 = 30% 计算时,累计折现现金流通量为 -90 万,故 DCFRR 在 29.5% 和 30% 之间,估计为 29.6%,不再进行更精确计算。

在计算累计折现现金流量时,若用式(2-52)计算 0~10a(年)和 10~15a(年)的总均匀现金流通比用式(2-54)计算逐年的折现现金流通更为方便。对 10~15a(年),可假设其折现因子为 0~5a(年)的总均匀现金流通的折现因子和 e^{-10} 之积,以折现率 = 29% 为例,10~15a(年)的累计折现因子可用下式求得,

$$\frac{1-e^{-5i}}{i} \cdot e^{-10i} = \frac{1-e^{-1.45}}{0.29} \cdot e^{-2.9} = 0.1452$$

现将不同折现率的 DCFRR 计算结果列于下表

年度	年现 金流通	折现率=29%		折现率=29.5%		折现率=30%	
		折现 因子	折现现 金流通	折现 因子	折现现 金流通	折现 因子	折现现 金流通
-2	-1500	1.786	-2679	1.804	-2706	1.822	-2733
-1	1500	1.336	-2004	1.343	-2015	1.350	-2025
0	-500	1.000	-500	1.000	-500	1.000	-500
0~10	1558	3.259	5077	3.212	5005	3.167	4935
10~15	1759	0.1452	255	0.1368	241	0.1289	227
15	500	0.0129	6	0.0120	6	0.0111	6
累 计			155		31		-91

参 考 文 献

1. Peters & Timmerhaus. Plant Design and Economics For Chemical Engineers. 3rd ed. McGraw-Hill Book Company, 1980
2. Wells & Rose. The Art of Chemical Process Design. Elsevier Science Publishers B. V., 1986
3. Resnick W. Process Analysis and Design For Chemical Engineers. McGraw Hill Book Company, 1981
4. 李建民. 化工技术经济. 北京: 化学工业出版社
5. Ulrich G D. A Guide to Chemical Engineering Process Design and Economics. John Wiley & sons, 1984
6. Lang H J. Simplified Approach to Preliminary Cost Estimates, Chem. Eng, 1948, 55(6): 112
7. Guthrie K M. Data and Techniques For Preliminary Capital Cost Estimating. Chem Eng; 1969, 76(3): 114—112
8. Mulet A, Corripio A B, Evans L B. Estimate Costs of Pressure Vessels Via Correlations. Chem Eng, 1981, 88(Oct 5): 145
9. Mulet A, Corripio A B, Evans L B. Estimate Costs of Distillation and Absorption Towers. Chem. Eng, 1981, 88(Dec 28): 77
10. Corripio A B, Chrien K S, Evans L B. Estimate Costs of Heat Exchangers and Storage Tanks Via Correlation, 1982, 89 (Jan 25): 125
11. Corripio A B, Chrien K S, Evans L B. Estimate Costs of Centrifugal Pumps and Electric Motors.
12. Cran J. Improved Factored Method Gives Better Prelimi-

nary Cost Estimates. Chem. Eng., 1981, 88 (Apr 6): 64

13. Douglas J M. Conceptual Design of Chemical Processes. McGraw Hill Book Company, 1988

第3章 反应过程

化工装置的任务是提供一种或数种新产生或原来不单独存在的物质。除了极少数化工装置如海水提纯,空气分离等以外,多数都是由原料经过化学反应产生的。化工产品的成本中原料费用占35%~85%,而原料消耗定额主要取决于反应过程。不仅如此,分离部分的费用也取决于反应器出口物料的组成。因此,反应过程是全局中起关键作用的部分,必须首先决策。

3.1 反应过程设计的评价指标

取得最佳经济效益是一切生产活动的目标。针对反应过程的特点,工业上常用转化率、选择率、收率等工艺指标来比较不同的反应方法、催化剂、反应器构型和操作条件在技术上的优劣。

3.1.1 转化率

转化率指某一反应物在反应过程中转化掉的量与其初始量之比,它是化学反应进行完全程度的一种标志。转化率常用 x 表示,例如组分 A 的初始摩尔数为 n_{A0} ,反应结束后的摩尔数是 n_A ,则此反应过程中组分 A 的转化率为 x_A 为:

$$x_A = \frac{n_{A0} - n_A}{n_{A0}} \quad (3-1)$$

3.1.2 选择性

选择性指在同一原料可生成几种产物,即目的产物和副产物的复杂反应系统中,转化成目的产物的原料的摩尔数与被转化掉的原料的摩尔数的比值。选择率常用 β 表示,例如对反应



生成目的产物 P 的选择率可表示成：

$$\beta = \frac{(n_p - n_{p0})/p}{(n_{A0} - n_A)/a} \quad (3-2)$$

式中 n_{p0} 和 n_p 分别表示反应开始和结束时目的产物 P 的摩尔数。

3.1.3 收率

收率指原料转化为目的产物的摩尔数与进反应系统的初始摩尔数的比值,对上述反应系统,收率 φ 可表示成：

$$\varphi = \beta x_A = \frac{(n_p - n_{p0})/p}{n_{A0}/a} \quad (3-3)$$

3.2 反应器设计的基本方法^[2]

在反应器中进行的过程既有化学反应,又有流体流动、传热、传质等物理传递过程,而且在这些过程之间还存在着复杂的相互影响。因此,和其他化工设备相比,反应器的设计往往要困难得多。

在很长一段时间中,逐级经验放大一直是反应器设计的主要方法。这种方法的工作程序如图 3.1 所示。首先在实验室反应器中进行小型工艺试验,根据试验结果,确定反应器的选型和优化工艺条件。然后再进行规模稍大些的模型试验(模试)和规模更大些的中间工厂试验(中试),考察反应器尺寸变化对反应结果的影响。在没有把握时,往往需要经过多级不同规模的中试,才能进行工业规模的大型反应器的设计。见图 3-1。

由上所述可见,采用逐级经验放大法进行反应器设计时,实际上是在不断地进行外推。在没有充分认识过程的规律时,外推总是有风险的。为了减少风险,往往不得不多次进行放大倍数很小的中间试验,而这样做是既费时又费钱的。为了克服逐级经验放大法的明显缺点,自 50 年代以来,化学工程师一直试图用下面要介绍的



图 3-1 逐级经验放大的工作程序

数学模型方法代替逐级经验放大法,但这种努力至今尚未取得预期的成功。对那些化学反应或(和)传递过程非常复杂的反应器的设计,仍不得不采用逐级经验放大法。

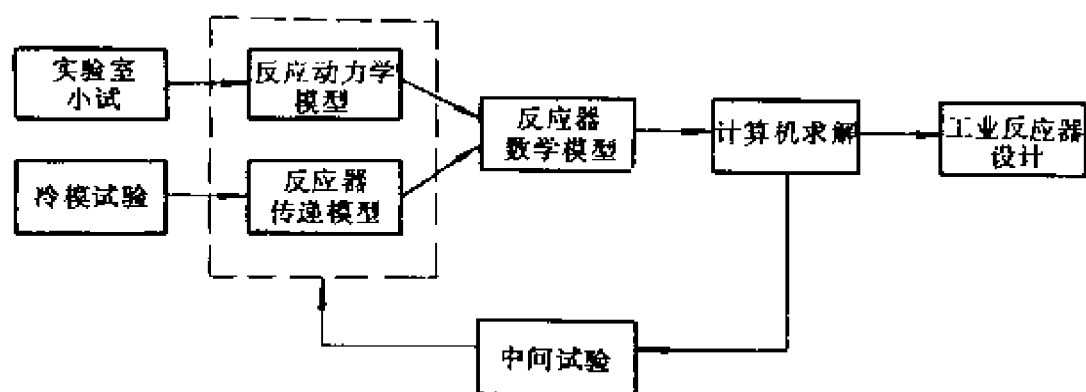


图 3-2 理想的数学模型方法

图 3-2 为理想的数学模型方法的工作程序。其实质是将反应器中发生的过程分解为化学反应和流动、传热、传质等物理传递过程;在实验室小型反应器中研究化学反应的规律,通过实验测定、模型筛选和参数估值,建立反应动力学模型;在大型冷模试验装置中,在没有化学反应的条件下研究反应器中的流动、传热、传质规律,建立反应器的传递模型;然后通过物料衡算和能量衡算把反应动力学模型和反应器传递模型结合起来,建立反应器数学模型,再通过计算机求解,进行大型工业反应器的设计。

这种方法完全摆脱了费钱费时的中试,使深感中试麻烦的人们看到了希望。但到目前为止,用这种方法进行工业反应器设计并取得成功的例子依然屈指可数。其原因是:①通过实验室研究建立的反应动力学模型往往不够精确;②对某些工艺上的特殊问题和潜在的危险必须通过中试装置一段时间的运转才能作出判断。

于是,有了第三种方法——改进的数学模型方法,对上述两种方法进行折衷,其工作程序如图 3-3 所示。

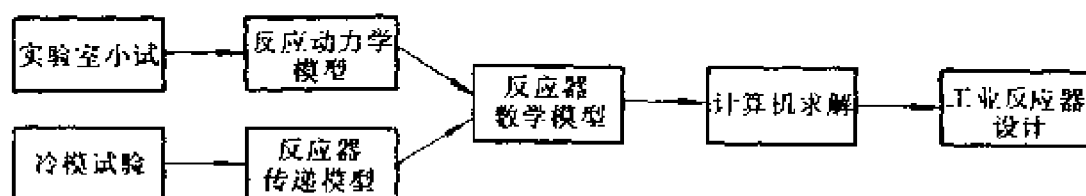


图 3-3 改进的数学模型方法

和理想的数学模型方法相比,这种方法在将反应器数学模型用于工业反应器的设计计算之前,仍要经过一步中试,用中试装置的运转结果检验模型预测的可靠性,并对反应器数学模型进行修正。和逐级经验放大法相比,在这种方法中,中试的目的不再是探索设备几何尺寸的变化对反应结果的影响,而是检验反应器数学模型的可靠性。

应该指出,在工业反应器的设计中,上述三种方法目前都有应用。对一具体的反应过程究竟应采用哪种方法,应根据过程的特点,由设计工作者和研究工作者通力合作,进行决策。

由上所述可见,和其他化工设备的设计相比,反应器的设计更多地依赖于实验研究的结果。因此,在进行反应器设计时,设计工作者既要善于利用实验研究的结果,也要善于对实验研究提出要求。

3.3 在反应系统设计之前必须掌握的知识和信息^{[1][3]}

反应系统的设计是以正确认识所研究的特定反应体系的主要特征为基础的。一个反应体系的主要特征包括以下三方面：

(1)化学计量学 —— 研究反应过程中存在哪些反应以及各组分反应量之间的关系；

(2)化学热力学 —— 研究反应过程中的能量转化和反应体系的平衡性质；

(3)化学动力学 —— 研究反应物系的组成、温度等因素对反应速率的影响。

除此以外,对于催化反应过程尚需了解催化剂的物理和化学性能,为了系统设计优化,尚需了解各个单元过程设计都需要的共性数据。

3.3.1 化学计量学

化学反应过程中,反应物系中各组分的反应量必服从一定的化学计量关系。这不仅是进行反应器物料衡算的基础,而且对确定反应器的进料配比、预测产物组成,以及工艺流程的安排,也可能具有重要意义。

3.3.1.1 化学计量方程

设在某反应体系中,存在几个组分 $A_1, A_2 \cdots A_n$, 它们之间发生 m 个化学反应,根据质量衡算原理,每一反应中反应物消失的质量必等于反应产物生成的质量,其化学计量方程可写成

$$\begin{aligned} \nu_{11}A_1 + \nu_{21}A_2 + \cdots + \nu_{n1}A_n &= 0 \\ \nu_{12}A_1 + \nu_{22}A_2 + \cdots + \nu_{n2}A_n &= 0 \\ \cdots \quad \cdots \quad \cdots & \\ \nu_{1m}A_1 + \nu_{2m}A_2 + \cdots + \nu_{nm}A_n &= 0 \end{aligned} \quad (3-4)$$

式中 ν_i 为第 j 个反应中组分 A_i 的化学计量系数, 对反应物 ν_i 取负值, 对产物 ν_i 取正值。上式也可用矩阵形式表示为:

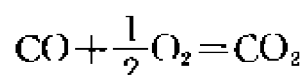
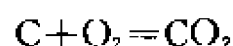
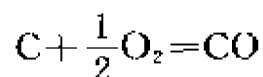
$$\nu \mathbf{A} = \begin{bmatrix} \nu_{11} & \nu_{21} & \cdots & \nu_{n1} \\ \nu_{12} & \nu_{22} & \cdots & \nu_{n2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \nu_{1m} & \nu_{2m} & \cdots & \nu_{nm} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \\ \vdots \\ A_n \end{bmatrix} = 0 \quad (3-5)$$

式中 ν 称为化学计量系数矩阵, \mathbf{A} 为组分向量。

化学计量方程可以向我们提供以下一些对反应器设计具有重要意义的信息: 在反应体系中存在哪些反应及它们之间的相互关系, 即是否存在可逆反应, 平行反应、串连反应、并列反应; 每一反应中各组分反应量之间的比例关系, 以及反应前后分子数有无变化。

3.3.1.2 独立反应和关键组分

在一个存在多个反应的复杂反应体系中, 常常可以发现其中某些反应在化学计量学上可以由其他反应通过线性组合得到, 即这些反应在化学计量学上并不都是独立的。例如, 碳的燃烧过程中会发生以下反应:



显然, 第一个反应与第三个反应相加即可得到第二个反应, 因此这三个反应在计量学上并不都是独立的。但若从这三个反应中剔除一个反应, 例如第三个反应, 那么剩下的两个反应中的任一个都不能由另一个反应的线性组合得到, 即他们是互相独立的。

m' 个反应相互独立的一般判据可叙述如下, 若不能找到一组不为零的 λ_i 使

$$\sum_{j=1}^{m'} \lambda_j \nu_{ij} = 0 \quad (i=1, 2, \cdots, n) \quad (3-6)$$

那么, 这 m' 个反应被称为是互相独立的。在一个反应体系

中,互相独立的反应的最大个数称为该反应体系的独立反应数。

确定反应体系的独立反应数有两种方法:

(1)化学计量系数矩阵法:这种方法适用于能够根据化学知识写出组分间可能存在的反应的化学计量式,即化学计量系数矩阵已知情况。若令化学计量系数矩阵中第 j 个行向量为 ν_j ,那么式(3-7)可写为:

$$\sum_{j=1}^m \lambda_j \nu_j = 0 \quad (3-7)$$

因此独立反应的数目也就是化学计量系数矩阵中独立的行向量的数目。由线性代数知识可知,矩阵中独立行向量(或列向量)的数目即为矩阵的秩。所以,通过线性变换,确定化学计量系数矩阵的秩也就确定了该反应体系的独立反应数。

(2)原子矩阵法:这种方法可用于在反应体系中存在哪些反应以及这些反应的化学计量方程是什么均不清楚,而只知道反应体系中存在哪些组分的场合。原子矩阵法的理论基础是:在反应过程中,虽然各元素可以重新组合,但每一元素的原子数目在反应前后是不变的。

设反应体系中含有 n 个组分 A_1, A_2, \dots, A_n ,它们之中共包含 l 种元素,在用原子矩阵法确定反应体系的独立反应数时,首先写出该反应体系的原子矩阵:

$$\beta = \begin{bmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} & \cdots & \beta_{1n} \\ \beta_{21} & \beta_{22} & \cdots & \beta_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \beta_{l1} & \beta_{l2} & \cdots & \beta_{ln} \end{bmatrix} \quad (3-8)$$

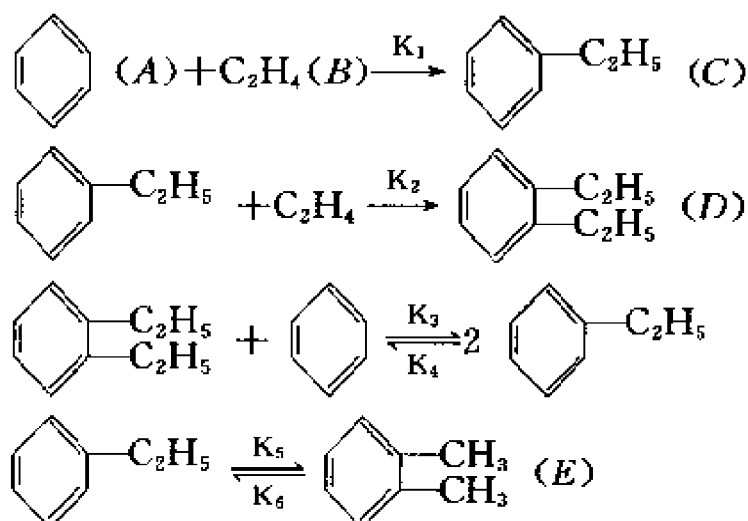
式中 β_{lk} 为组分 A_i 中元素 k 的原子数。若矩阵 β 的秩为 R_β ,则可证明该反应体系的独立反应数为 $n - R_\beta$ 。

利用独立反应的概念可以使复杂反应体系的物料衡算、能量衡算和化学平衡计算大为简化。在确定反应体系的独立反应数,并选定一组独立反应后,只需对每一独立反应选择一关键组分,即可由关键组分的反应量 ξ_i 计算反应前后组成的变化:

$$F_{i,\text{out}} = F_{i,\text{in}} + \sum_{j=1}^m \nu_{ij} \xi_j \quad (3-9)$$

式中 $F_{i,\text{out}}$ 为反应器出口组分 i 的摩尔数, $F_{i,\text{in}}$ 为反应器进口组分 i 的摩尔数。关键组分的反应量 ξ_j 可以由实验测定或用反应动力学方程计算得到, 也可由设计规定。式(3-9)常作为一个模块(化学计量反应器)用于流程的物料衡算。

例 3-1 苯和乙烯在一绝热固定床反应器中进行气相烷基化反应, 发生的主要反应有:

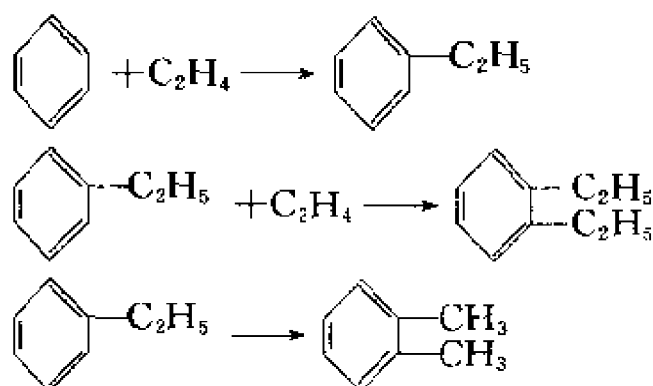


已知某绝热固定床中试反应器, 每小时乙烯进料量为 12.5kg, 苯进料量为 255kg, 反应产物经精馏分离, 未反应的乙烯作为尾气排放。对贮槽中的液相产物分析表明, 每小时苯的出料量为 224kg。乙苯出料量为 37.2kg, 二乙苯出料量为 5.9kg, 请计算乙烯的转化率, 以及乙烯生成乙苯的选择性。

解: 首先写出上述反应体系的化学计量系数矩阵, 然后通过线性变换确定其秩, 即独立反应数:

$$\begin{array}{ccccc}
 \text{(A)} & \text{(B)} & \text{(C)} & \text{(D)} & \text{(E)} \\
 \left[\begin{array}{ccccc}
 -1 & -1 & 1 & 0 & 0 \\
 0 & -1 & -1 & 1 & 0 \\
 -1 & 0 & 2 & -1 & 0 \\
 0 & 0 & -1 & 0 & 1
 \end{array} \right] & \Rightarrow & \left[\begin{array}{ccccc}
 -1 & -1 & 1 & 0 & 0 \\
 0 & -1 & -1 & 1 & 0 \\
 0 & 1 & 1 & -1 & 0 \\
 0 & 0 & -1 & 0 & 1
 \end{array} \right] & \Rightarrow & \\
 \left[\begin{array}{ccccc}
 -1 & -1 & 1 & 0 & 0 \\
 0 & -1 & -1 & 1 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & -1 & 0 & 1
 \end{array} \right] & & & &
 \end{array}$$

可见该反应体系的独立反应数为 3, 三个独立反应可选为



选择苯、乙苯、二乙苯为关键组分, 三关键组分的反应量分别为:

$$\text{苯} \quad \Delta N_{\text{苯}} = 224 - 255 = -31\text{kg} = -0.397 \text{ kmol}$$

$$\text{乙苯} \quad \Delta N_{\text{乙苯}} = 37.2\text{kg} = 0.351 \text{ kmol}$$

$$\text{二乙苯} \quad \Delta N_{\text{二乙苯}} = 5.9\text{kg} = 0.044 \text{ kmol}$$

由独立反应的化学计量方程可求得乙烯的反应量为:

$$\begin{aligned}
 \Delta N_{\text{乙烯}} &= \Delta N_{\text{苯}} - \Delta N_{\text{二乙苯}} = -0.397 - 0.044 \\
 &= -0.441 \text{ kmol} = 12.35\text{kg}
 \end{aligned}$$

所以, 乙烯的转化率为

$$x_{\text{乙烯}} = \frac{12.35}{12.5} = 98.8\%$$

乙烯生成乙苯的选择性为

$$\beta = \frac{0.351}{0.441} = 79.6\%$$

生成二甲苯的量也可由化学计量方程求得：

$$\begin{aligned}\Delta N_{\text{二甲苯}} &= -\Delta N_{\text{苯}} - \Delta N_{\text{乙苯}} - \Delta N_{\text{正乙苯}} \\ &= 0.397 - 0.351 - 0.044 \\ &= 0.002 \text{ kmol} \\ &= 0.212 \text{ kg}\end{aligned}$$

由本题可见,虽然上述反应体系的组分数为 5,但因为体系中只有三个独立反应,所以只需知道三个关键组分的反应量,非关键组分的反应量即可根据化学计量关系求得。

3.3.2 化学热力学

3.3.2.1 反应的热效应

化学反应过程必定伴随着一定形式的能量转换,其中最常见的是化学能和热能之间的相互转换,即反应的热效应。反应热的定义为在反应后将反应产物恢复到与反应物的温度和压力相同时系统吸收或放出的热量。系统温度为 25℃ 时的反应热称为标准反应热。

反应热是反应过程的一个重要特征,反应是放热还是吸热,热效应的大小,对反应器的选型和温度控制方式起着极重要的作用。因此,必需正确计算反应热。

A 反应热的计算

根据盖斯定律,反应热的数值与反应途径无关,只与反应的初态和终态有关。因此,反应热 ΔH_R 可根据各组分的燃烧热 ΔH_c 或生成热 ΔH_f 来计算即

$$\begin{aligned}\Delta H_R &= \sum_i \nu_i \Delta H_{c,p} - \sum_i \nu_i \Delta H_{c,r} \\ \text{或} \quad \Delta H_R &= \sum_i \nu_i \Delta H_{f,p} - \sum_i \nu_i \Delta H_{f,r}\end{aligned}$$

式中下标 r ——反应物

p ——产物

虽然用燃烧热或生成热都可以计算反应热,但在实际设计中常采用生成热数据而不用燃烧热,这主要因为在一般情况下燃烧

热的数值较生成热大,而反应热是由燃烧热或生成热的差数来计算的,两个大数相减后的差值精确度低,因此在同样的测量精度下由燃烧热计算所得的反应热其误差就大。

B 不同温度下反应热的计算

从资料中查到的生成热或燃烧热通常是在某指定温度,例如在 298K 条件下的数值,但反应并不恰巧在该温度下发生,这时可利用盖斯定律计算所需温度下的反应热,其途径可用图 3-4 表示

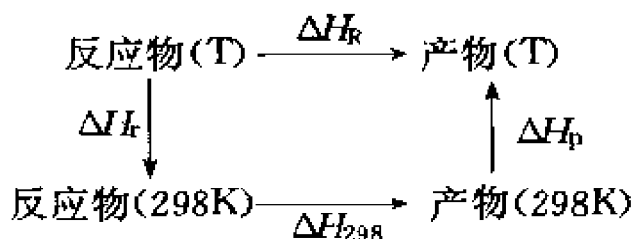


图3 - 4 不同温度下的反应热计算

$$\Delta H_R = \Delta H_r + \Delta H_{298} + \Delta H_p \quad (3-10)$$

$$\Delta H_r = \int_T^{298} C_{pr} dT \quad (3-11)$$

$$\Delta H_p = \int_{298}^T C_{pp} dT \quad (3-12)$$

$$C_{pr} = \sum C_{pi} x_i \quad (3-13)$$

$$C_{pp} = \sum C_{pi} y_i \quad (3-14)$$

$$C_{pi} = A_i + B_i T + C_i T^2 + D_i T^3 \quad (3-15)$$

式中 ΔH_R ——温度为 T 时的反应热;

ΔH_{298} ——温度为 298K 时的反应热;

C_{pr} ——反应物热容;

C_{pp} ——产物热容;

C_{pi} ——各组分热容;

x_i ——反应物组成;

y_i ——产物组成;

A_i, B_i, C_i, D_i ——各组分计算热容的系数。

3.3.2.2 化学平衡^[3]

化学平衡是反应体系达到极限状态,此时在宏观上体系组成不再发生任何变化,但微观上仍有正反两个方向的反应,而且的两者速率相等。反应的净速率为零。研究化学平衡主要的目的是了解反应体系达到平衡时的组成以及各工艺参数对平衡组成的影响,并结合化学动力学研究,为确定反应过程的工艺条件提供依据。

A 化学平衡常数

对反应 $aA + bB = pP + rR$, 设达到化学平衡时各组分的活度为 a_i , 则化学平衡常数可表示为

$$K = \frac{a_P^p a_R^r}{a_A^a a_B^b} \quad (3-16)$$

各组分活度可表示为其逸度 f_i 与标准态逸度 f_{i0} 之比, 即

$$a_i = \frac{f_i}{f_{i0}}$$

对气相反应体系, 因为各组分的标准态逸度均为 0.10133Mpa (1atm), 所以其化学平衡常数可表示为

$$K = \frac{f_P^p f_R^r}{f_A^a f_B^b} \quad (3-17)$$

若体系服从理想气体定律, 则上式中的逸度又可用各组分分压 p_i 代替。

化学平衡常数可直接由实验测定, 但更常用的方法是利用热力学数据计算。由热力学第二定律可知, 化学反应总是自发地向自由能减少的方向进行的。因此对上述反应有

$$\Delta G = \sum \nu_i \mu_i = (p\mu_P + r\mu_R) - (a\mu_A + b\mu_B) \leq 0 \quad (3-18)$$

式中, μ_i 为各组分的化学位。当体系达到化学平衡状态时, 体系的自由能为最小, $\Delta G = 0$ 。

组分的化学位与逸度间有如下关系:

$$\mu_i = \mu_i^0 + RT \ln f_i \quad (3-19)$$

式中 μ_i^0 为标准状态下纯物质的化学位, 即该物质的标准生成自由能。将式(3-19)代入式(3-18)得

$$\Delta G = (p\mu_P^0 + r\mu_R^0 - a\mu_A^0 - b\mu_B^0) + RT \ln \frac{f_P^p f_R^r}{f_A^a f_B^b}$$

$$= \Delta G^{\circ} + RT \ln \frac{f_P^{\circ} f_R}{f_A^{\circ} f_B} \leq 0 \quad (3-20)$$

将式(3-17)代入上式,可得

$$\Delta G^{\circ} = -RT \ln K \quad (3-21)$$

式(3-21)表示系统的平衡状态取决于生成自由焓 ΔG° 的变化。当 ΔG° 是负值, K 值就是正的, ΔG° 愈小, 平衡常数 K 愈大, 平衡时产物的产率愈高; 当 ΔG° 是正值时, $\ln K$ 是负值, 但这时并不表示反应一定不能进行, Dodge^[11] 认为在 $0 < \Delta G^{\circ} < +10000$ 时的反应的结果虽难以预料, 但值得进一步研究。

各种物质在 25°C 以下的 ΔG° 可从热力学数据手册上查取, 在数据缺乏时也可进行估算, 剩下的问题是如何得到我们感兴趣的温度下的平衡常数, 例如, 我们已有反应物和产物的 ΔG° 是在 298K 下的数值, 由(3-21)式计算得到的是 298K 下的平衡常数, 如果我们需 700K 时的平衡常数, 该如何校正?

根据热力学, 温度对平衡常数的影响可用 Vant Hoff 方程求取:

$$\frac{d \ln K}{dT} = \frac{\Delta H^{\circ}}{RT^2} \quad (3-22)$$

式中 ΔH° 为标准反应热。

若温度的变化范围较小或产物和反应物的热容相差很小, 在式(3-22)积分时可将 ΔH° 作为常数处理, 即

$$\ln \frac{K}{K_1} = \frac{-\Delta H^{\circ}}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_1} \right) \quad (3-23)$$

否则应将式(3-9)代入式(3-22)进行积分, 可得:

$$\ln \frac{K}{K_1} = \frac{-1}{R} \left[\frac{\Delta H}{T} + \Delta A \ln T + \frac{\Delta B}{2} T + \frac{\Delta C}{6} T^2 + \frac{\Delta D}{12} \Delta T^3 \right]_{T_1}^T \quad (3-24)$$

式中 $\Delta A, \Delta B, \Delta C, \Delta D$ 为反应物热容系数和产物热容系数的差值。

B 复杂反应体系的化学平衡计算

反应体系的化学平衡计算可看成是一种特殊的物料衡算问题, 即体系的终了状态是化学平衡状态时的物料衡算问题。前已述及, 对复杂反应体系进行物料衡算时, 只要知道一组独立反应中各关键组分的反应量, 即可根据化学计量关系求得其余组分的反应

量。因此,在求解复杂反应体系的化学平衡问题时,首先应该通过化学计量学分析确定一组独立反应和相应的关键组分。不过,现在关键组分的反应量不是由动力学方程计算求得的,而是由体系的终态是化学平衡状态这一约束条件决定的。

设有一存在 n 个组分, m 个反应的复杂反应体系,经化学计量学分析,其独立反应数为 m 。选定一组独立反应后,写出各独立反应的化学平衡方程。

$$\prod_{i=1}^n y_i^{\nu_i} = K_{y_j} \quad j=1,2,\dots,m \quad (3-25)$$

式中, K_{y_j} 为用气相摩尔分率表示的化学平衡常数,对理想气体 K_{y_j} 与 K 有如下关系:

$$K = K_y p^{\Delta \nu} \quad (3-26)$$

式中 p 为反应压力, $\Delta \nu$ 为产物和反应物计量系数之差。

设达到化学平衡时各关键组分的反应量为 ξ_j ,则此时系统中各组分的摩尔数可由式(3-9)求得,而各组分的摩尔分率为

$$y_i = \frac{F_{i,\text{out}}}{\sum F_{i,\text{out}}} \quad (3-27)$$

将式(3-27)代入式(3-25)可得到一组包括 m 个变量的联合方程组:

$$F_j(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_m) = 0 \quad j=1,2,\dots,m \quad (3-28)$$

上述方程组通常为非线性的,需用 Newton-Raphson 法及其各种改进算术求解。

例3-2 异丙醇于 400°C , 0.10133Mpa (1atm) 下在铜催化剂上进行脱氢反应生成丙酮,并伴有生成正丙醇和丙醛的副反应。这些反应的化学计量方程和反应温度下的化学平衡常数如下:



后续的分离过程要求反应产物中丙醛的含量不大于 $0.05\text{mol}\%$ 。请问在题述反应条件下,产物组成能否满足此要求。

解: 不难判断上述三反应互为独立反应,以 1mol 异丙醇为基

准,设达到化学平衡时三反应的反应量分别为 x_{1a} 、 x_{2a} 、 x_{3a} ,根据化学计量方程可写出化学平衡时各组分的摩尔数:

$$\text{异丙醇: } N_{IP} = 1 - x_{1a} - x_{2a} - x_{3a}$$

$$\text{正丙醇: } N_{NP} = x_{1a}$$

$$\text{丙 酮: } N_{AC} = x_{2a}$$

$$\text{丙 醛: } N_{PR} = x_{3a}$$

$$\text{氢 : } N_H = x_{2a} + x_{3a}$$

$$\text{总摩尔数: } N_t = 1 + x_{2a} + x_{3a}$$

于是,可写出如下化学平衡方程

$$\frac{N_{NP}}{N_{IP}} = \frac{x_{1a}}{1 - x_{1a} - x_{2a} - x_{3a}} = 0.064$$

$$\frac{N_{AC} \cdot N_H}{N_{IP} \cdot N_t} = \frac{x_{2a}(x_{2a} + x_{3a})}{(1 - x_{1a} - x_{2a} - x_{3a})(1 + x_{2a} + x_{3a})} = 0.076$$

$$\frac{N_{PR} \cdot N_H}{N_{IP} \cdot N_t} = \frac{x_{3a}(x_{2a} + x_{3a})}{(1 - x_{1a} - x_{2a} - x_{3a})(1 + x_{2a} + x_{3a})} = 0.00012$$

用 Newton-Raphson 法求解上述联立方程,可求得各反应的反应进度,只要迭代变量的初值满足物理上的约束, $(x_{1a} + x_{2a} + x_{3a}) < 1$, 计算都能收敛,可得

$$x_{1a} = 0.0446 \quad x_{2a} = 0.2579 \quad x_{3a} = 0.0004$$

所以,化学平衡时丙醛的摩尔分率为

$$\frac{x_{3a}}{1 + x_{2a} + x_{3a}} = \frac{0.0004}{1 + 0.2579 + 0.0004} = 0.032\%$$

可见,只要反应时间足够长,在题述温度,压力条件下,丙醛含量不会超过0.05%。

3.3.3 化学动力学

化学动力学的任务是研究化学反应的速率以及浓度、温度、催化剂等因素对反应速率的影响。研究工作者通常以反应动力学模型的方式向设计工作者提供有关化学动力学研究的成果。按照对反应动力学规律认识程度的差异,反应动力学模型可分为三类:①机理的动力学模型;②半机理的动力学模型;③经验的动力学模

型。不应简单地认为认识程度最深的机理模型就是最好的模型,一个成熟的设计工程师应善于对反应动力学研究提出与设计任务相适应的要求。

3.3.3.1 机理的动力学模型

绝大多数化学反应并不是按照化学计算方程所表示的那样一步完成的,而是要经过生成中间产物(如自由基、正碳离子)的许多步骤才能完成。机理的动力学研究即根据测定的反应动力学数据和物理化学的观察研究来确定完成整个反应的一系列简单步骤——基元反应及其速率控制步骤。在这样确定的反应机理的基础上建立的反应动力学模型称为机理动力学模型,这种模型通常具有较强的预测能力。但建立这样一个模型需要很长的时间和大量的人力、物力也是显而易见的。因此,对大多数工业反应器的设计来说,要求采用机理的动力学模型是不现实的。只有少数生产规模很大,已进行了长期基础研究的反应过程,例如合成氨、烃类裂解等在进行反应器设计时才有可能采用机理的动力学模型。另外还应指出,准备采用机理模型进行设计的反应器,其传递过程应是比较简单的,否则在反应器传递模型中所包含的不确定因素,可能会使采用精确的机理的动力学模型失去意义。

3.3.3.2 半机理的动力学模型

这种模型根据有关反应体系的化学知识,确定一系列化学反应,并写出它们的计量方程,在计量方程中应包括所有在流程物料衡算中不可缺少的反应物和产物。计量方程中的反应物和产物一般是若干种分子,但对某些组分数极多的复杂反应体系,也可能包括将若干种组分集中在一起的虚拟组分。然后写出每个反应的速率方程,并利用在等温(或非等温)条件下测定的反应速率实验数据,估计速率方程中所包含的模型参数,如反应级数,频率因子和活化能。这样得到的模型也具有一定的外推功能,但外推的范围不如前一种方法那样大。这是工业反应器设计中最常用的一种动力学模型,因为它所需要的时间和费用比前一种方法少得多,所建立的模型已可以满足工业反应器设计的基本要求。

在机理和半机理的动力学模型中,速率方程的形式有幂函数型和双曲型两种。幂函数型模型既可用于均相反应体系,也可用于非均相反应体系;双曲型模型主要用于非均相反应体系。

当采用幂函数型动力学模型时,浓度和温度对反应速率的影响可以分别表示,即速率方程可采用下述形式:

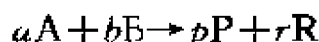
$$r_1 = f_c(c) f_T(T) \quad (3-29)$$

式中 $f_T(T)$ 即为一定温度下的反应速率常数 k , 对大多数化学反应, k 与反应温度 T 的关系可近似地表示为负指数函数:

$$k = Ae^{-E/RT} \quad (3-30)$$

此式即著名的 Arrhenius 方程, 式中 A 称为频率因子或指前因子, E 为反应活化能。活化能是表征化学反应特征的一个重要参数, 是反应速率对温度敏感性的一种度量。活化能越大的反应, 反应速率随温度的变化越显著。大多数工业反应过程的活化能在 $21 \sim 210 \text{ kJ/mol}$ 之间。

式(3-29)中的函数 $f_c(c)$ 采用幂函数形式, 例如, 对不可逆反应



组分 A 的消失速率可表示为

$$r_A = -\frac{dc_A}{dt} = kc_A^\alpha c_B^\beta \quad (3-31)$$

式中幂指数 α 称为组分 A 的反应级数, β 称为组分 B 的反应级数, $(\alpha + \beta)$ 称为反应总级数, 或简称为反应级数。需要指出的是组分的反应级数和它的化学计量系数并不总是相等的。反应级数是反应速率随浓度变化的敏感程度的一种度量, 反应级数越高, 浓度对反应速率的影响就越大。

幂函数型动力学模型形式简单, 可以用活化能和反应级数这两个概念解释温度和浓度这两个因素对反应速率的影响, 比较简便。但是, 当反应产物对反应有阻滞作用, 或者在不同的浓度区间里浓度对反应速率有相反的影响时, 幂函数型模型将无法描述这些规律, 而具有更强的数据拟合功能的双曲型模型则能较简便地

处理这些问题,但双曲型模型中包含的参数一般比较多,解释温度、浓度对反应速率的影响也不如幂函数型模型那样直观。

3.3.3.3 经验的动力学模型

这种模型系根据在与工业反应器结构相似的模试反应器(或中试反应器)中进行的反应条件对反应结果影响的研究,将所得的结果用简单的代数方程或图表表达,用于指导工业反应器的设计。因此,这种模型也可称为反应器的经验模型。例如,当要设计一绝热固定床工业反应器时,在实验室研究中也采用绝热固定床反应器,因为绝热反应器的反应结果完全由进口条件(进料组成、温度、流率等)确定,所以只需在反应器的可能操作范围内,测定不同进口条件下反应的转化率、选择性、并将所得结果关联成代数方程,即可用于工业反应器的设计计算。

这种方法的优点是避免了为建立机理的或半机理的反应动力学模型将面临的种种困难,而且其结果可以直接应用于反应器的放大设计。在适当的条件下,应用这种方法可以收到事半功倍的效果。但是,在这种模型中不仅包含了化学因素,而且还包含反应器中的各种传递因素。因此,当采用这种方法时,必须事先确定反应器的选型和主要结构特征。此外,因为这种模型所提供的反应条件和反应结果之间的关系,完全没有涉及过程的机理,所以只能内插使用,不宜进行外推。设计人员使用时还应估计模型参数如果有误可能引起的后果。

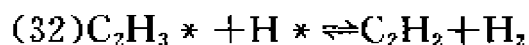
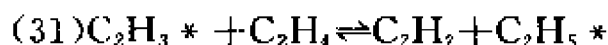
现以石脑油热裂解制烯烃为例介绍这三种类型的动力学模型。

A 机理模型

石脑油是一种烃类混合物,内含100多个组分,在高温条件下各个烃分子根据不同的结构会产生链引发,链增长,链终止等自由基反应和异构化、芳构化等分子反应,今以丙烷为例^①,说明它能产生哪些自由基反应^[4]:

① 丙烷裂解反应网络摘自参考文献[4],并作适当简化。

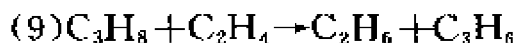
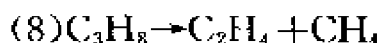
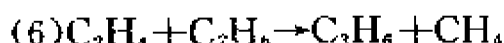
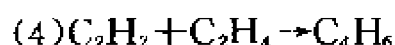
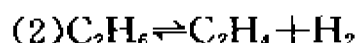
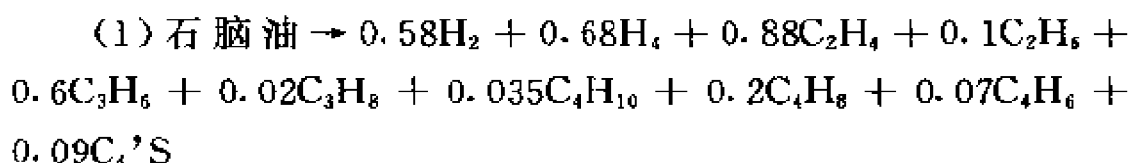
- (1) $\text{C}_3\text{H}_8 \rightleftharpoons \text{CH}_3^* + \text{C}_2\text{H}_5^*$
- (2) $\text{CH}_3^* + \text{C}_3\text{H}_8 \rightleftharpoons \text{CH}_4 + \text{iC}_3\text{H}_7^*$
- (3) $\text{CH}_3^* + \text{C}_3\text{H}_8 \rightleftharpoons \text{CH}_4 + \text{nC}_3\text{H}_7^*$
- (4) $\text{H}^* + \text{C}_3\text{H}_8 \rightleftharpoons \text{H}_2 + \text{iC}_3\text{H}_7^*$
- (5) $\text{H}^* + \text{C}_3\text{H}_8 \rightleftharpoons \text{H}_2 + \text{nC}_3\text{H}_7^*$
- (6) $\text{C}_2\text{H}_3^* + \text{C}_3\text{H}_8 \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_4 + \text{iC}_3\text{H}_7^*$
- (7) $\text{C}_2\text{H}_3^* + \text{C}_3\text{H}_8 \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_4 + \text{nC}_3\text{H}_7^*$
- (8) $\text{C}_2\text{H}_5^* + \text{C}_3\text{H}_8 \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_6 + \text{iC}_3\text{H}_7^*$
- (9) $\text{C}_2\text{H}_5^* + \text{C}_3\text{H}_8 \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_6 + \text{nC}_3\text{H}_7^*$
- (10) $\text{C}_3\text{H}_5^* + \text{C}_3\text{H}_8 \rightleftharpoons \text{C}_3\text{H}_6 + \text{iC}_3\text{H}_7^*$
- (11) $\text{C}_3\text{H}_5^* + \text{C}_3\text{H}_8 \rightleftharpoons \text{C}_3\text{H}_6 + \text{nC}_3\text{H}_7^*$
- (12) $\text{iC}_3\text{H}_7^* + \text{C}_3\text{H}_8 \rightleftharpoons \text{nC}_3\text{H}_7^* + \text{C}_3\text{H}_8$
- (13) $\text{iC}_3\text{H}_7^* \rightleftharpoons \text{H}^* + \text{C}_3\text{H}_6$
- (14) $\text{iC}_3\text{H}_7^* \rightleftharpoons \text{CH}_3^* + \text{C}_2\text{H}_4$
- (15) $\text{nC}_3\text{H}_7^* \rightleftharpoons \text{H}^* + \text{C}_3\text{H}_6$
- (16) $\text{nC}_3\text{H}_7^* \rightleftharpoons \text{CH}_3^* + \text{C}_2\text{H}_4$
- (17) $\text{C}_2\text{H}_5^* \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}^*$
- (18) $\text{H}^* + \text{C}_3\text{H}_6 \rightleftharpoons \text{C}_3\text{H}_5 + \text{H}_2$
- (19) $\text{CH}_3^* + \text{C}_3\text{H}_6 \rightleftharpoons \text{CH}_4 + \text{C}_3\text{H}_5^*$
- (20) $\text{H}^* + \text{C}_2\text{H}_6 \rightleftharpoons \text{H}_2 + \text{C}_2\text{H}_5^*$
- (21) $\text{CH}_3^* + \text{C}_2\text{H}_6 \rightleftharpoons \text{CH}_4 + \text{C}_2\text{H}_5^*$
- (22) $\text{CH}_4 + \text{H}^* \rightleftharpoons \text{CH}_3^* + \text{H}_2$
- (23) $\text{H}_2 \rightleftharpoons \text{H}^* + \text{H}^*$
- (24) $\text{CH}_3^* + \text{CH}_3^* \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_6$
- (25) $\text{H}^* + \text{CH}_3^* \rightleftharpoons \text{CH}_4$
- (26) $\text{C}_2\text{H}_4 \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_2 + \text{H}_2$
- (27) $\text{C}_2\text{H}_4 \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_3^* + \text{H}^*$
- (28) $\text{H}^* + \text{C}_2\text{H}_4 \rightleftharpoons \text{H}_2 + \text{C}_2\text{H}_3^*$
- (29) $\text{C}_2\text{H}_4 + \text{C}_2\text{H}_4 \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_3^* + \text{C}_2\text{H}_5^*$
- (30) $\text{C}_2\text{H}_3^* \rightleftharpoons \text{H}^* + \text{C}_2\text{H}_2$

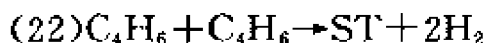
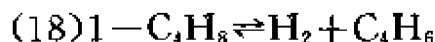
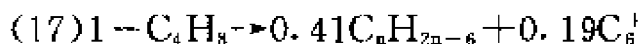
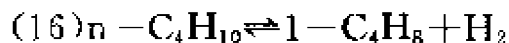
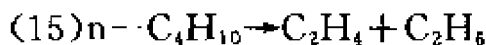
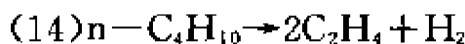
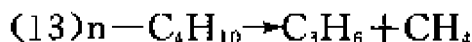
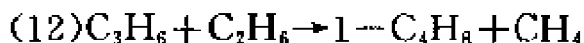
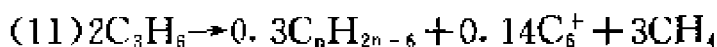


由此可见,若对组成石脑油的每一个组分都建立机理模型,则石脑油热裂解反应网络将包含一千个以上的反应,这种模型能正确地预测原料在广泛的工艺参数范围内的裂解产品组成和提供设计裂解反应器所需的各种信息。但是建立这样的模型必需进行大量艰巨的基础研究工作和验证,才能使结论可靠。

B 半机理的动力学模型

机理模型能得到可靠结论的前提是必须已知原料的组成并能正确建立反应网络,求得上千个反应的动力学参数,这在很多情况下是不可能的。经过研究,认为可以将裂解反应近似地分为一次反应和二次反应,所谓一次反应是指原料烃分子在裂解过程中发生的反应,二次反应是指一次反应产物继续进行的串联反应。因此,一次反应与原料组成有关,二次反应和原料组成无关,这样可以通过实验求得一次反应的动力学参数和产物组成。二次反应网络可以采用分子反应,也可以采用自由基反应,无论采用何种反应都能大量减少反应的数量,从而减少了建模所需的工作量。P. Kumar^[3]在1985年发表了他研究的石脑油热裂解反应网络,预测的产品收率与实测值颇为接近,具体反应式如下:





由此可见,半机理模型较机理模型已大为简化,但在一定范围内仍有较高的实用价值。

3.3.3.4 经验模型

对某一特定原料,根据工业试验数据,可以得到产品组成与工艺参数的关联式,即

$$y_i = f(p, T, \theta, S/O) \quad i = 1, 2, \dots, n-1$$

$$y_n = 100 - \sum_{i=1}^{n-1} y_i$$

式中 p ——反应压力;

T ——反应温度;

θ ——反应时间;

S/O ——水蒸气和烃的摩尔比;

n ——反应产物组分数。

这种简单的关联式在实验范围内能很好地预测产物出口组成,但不能外推,应用范围较狭窄。

3.3.4 催化反应

催化反应需要了解催化剂的物理和化学性能,例如密度、粒

度、空隙率、机械强度、装填要求,使用的温度范围,有毒物质的种类和允许浓度、中毒方式,影响催化剂失活的因素以及失活对反应器本身和后续系统的影响,再生方法及再生操作条件等。

3.3.5 共性数据

下列数据是反应、分离等各个过程进行设计或方案比较时都需要的共性数据:

- (1)各种纯度的原材料价格;
- (2)不同纯度产品和副产品的价格;
- (3)各种公用工程价格;
- (4)各组分的物性,如沸点、密度、蒸汽压、临界常数、偏心因子、粘度、导热系数等。

3.4 过程性质和输出入条件^{[7][8]}

在进行反应过程的设计时必须首先确定过程性质和输入条件。过程性质是指过程为连续或间歇,输入条件指装置进口的原料是否需经过预处理,输出条件是指确定目的产品和流股数,由此确定反应器进口有无循环物料。

3.4.1 过程连续或间歇

连续过程由于其操作稳定和生产能力大已日益在化工过程中占主导地位。但是在下列几种情况下,有必要进行连续和间歇过程的比较。

3.4.1.1 产量

对于产量大于4500吨/年的生产装置常采用连续过程,对于产量小于4500吨/年的装置则采用间歇过程,这不仅因为产量过小难于连续操作,而且间歇过程简单和操作弹性大,设计时可以采用较不详细或精确度较低的数据,所需开发和设计周期较短。

3.4.1.2 市场需求

有些产品的需求有很强的季节性,例如某些医药和农药产品。如果全年生产,就需要很大的仓库,对于这种情况,最好能设计成间歇操作,在市场需要时生产,不需要时生产其他产品,这样就能节省大量建设仓库所需的投资。

此外,还有些产品的生命周期很短,很快就被不断出现的其他新产品所淘汰,如有些精细化工产品。针对这种产品的特性去建设一个连续装置,通常需要3年时间,因此应设计成一种通用性较强的间歇操作装置,用同一套装置生产多种产品。

3.4.1.3 操作上的特殊问题

(1)有些反应的反应速度极慢,以致间歇操作成为唯一可能的方案。

(2)当过程中有少量泥浆状物料时,若处理成连续过程,会由于流速过低固体析出而堵塞管道或设备。

(3)某些反应过程非常容易结垢或结块,需要频繁地清理,这种情况宜采用间歇式反应器。

3.4.2 原料的预处理

当原料中含有必须处理的杂质时,就要面临这样的选择:把原料直接送入系统还是先进行原料的预处理。由于此决策必须在过程的详细设计开展前作出,还很难对两种选择作出精确的结论,可以根据下列原则作出初步的判断:

(1)如果进料杂质对催化剂是一种毒物,应先除去。

(2)如果杂质是参与反应的物质,在一般情况下应先除去,否则不仅消耗原材料,而且使产品组分数增多,分离过程更为复杂。

(3)如果杂质是不参与反应的惰性物质,则应根据它与产品和原料分离的难易程度决定原料是否预先处理。

(4)如果杂质大量存在,即使与产品的分离较与原料的分离容易,但由于影响反应系统的生产能力、热平衡和增加系统阻力等问题,还应对各种影响作出粗略的估计后再作出决定。

3.4.3 目的产品和产品流股数的确定

进行物料衡算时必须不遗漏所有反应的每一个产物,也不能遗漏未转化的原料以及随原料进入系统的杂质,列出反应器出口物料组成,然后决定其去向。

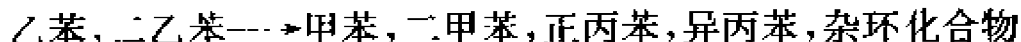
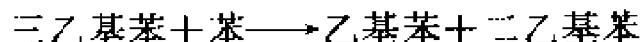
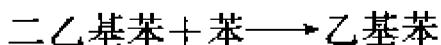
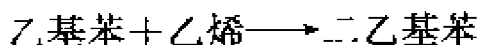
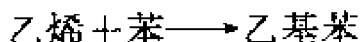
反应器出口组分可能有六个去向:

- (1)主产品,
- (2)有价值的关联产品或副产品,
- (3)价值较低的燃料,
- (4)循环,
- (5)排空,
- (6)有害物质去三废处理。

对于同一个去向的不同组分,应研究有无必要把它们分离,要坚决避免把各个组分先分离再合并的做法。

现以乙烯和苯气相反应生成乙基苯的过程为例进行说明。

已知原料乙烯的组成为乙烯99.9%,乙烷0.1%;原料苯的组成为苯99.9%,甲苯0.1%。为了降低催化剂的失活速率和抑制副反应,采用苯过量的方法。乙烯的转化率为99%~100%。在反应器内发生下列反应:



在各种副产物中,除杂环化合物在高温下易聚合,二乙苯和三乙苯能反烃化外,其它副产物的生成反应都为可逆反应。

反应器出口各分的沸点及含量如下:

组 分	沸点 K	含量质量%
乙 烯	169.45	0.03
乙 烷	184.55	0.03
苯	353.15	77.78
甲苯	383.75	0.16
乙基苯	409.35	17.24
二甲苯	412.25	0.03
正丙苯	432.35	0.52
异丙苯	425.55	0.28
二乙基苯	454.25	2.99
丁 苯	456.45	0.38
三乙基苯	491.15	0.10
杂环化合物	537.15	0.05

各组分的去向如下:

(1) 乙烯: 由于乙烯的转化率极高, 反应器出口乙烯数量很少, 而且乙烯沸点很低, 若要循环回收需增加气体循环压缩机和冷冻系统, 成本较大, 因此作放空或排至燃料气管网处理。

(2) 乙烷: 为由原料乙烯夹带至系统的惰性气, 与乙烯情况相同, 放空或排至燃料气管网。

(3) 乙基苯: 主产品。

(4) 二乙苯: 生成的数量不少, 又是一个有用的产品, 因此可以将其作为副产品, 也可以将其循环回反应器作为循环物料。若作为副产品, 需和低于其沸点的二甲苯、异丙苯和高于其沸点的丁苯、三乙苯、杂环化合物等组分分离, 将增加较多投资和操作费用, 而且丁苯还不易用精馏的方法将其分离。因此除非市场有迫切需求, 一般将其返回反应器。

(5) 苯、甲苯、二甲苯、丁苯、三乙苯、异丙苯、正丙苯: 全部循环回反应器, 但其中二甲苯由于和乙基苯的沸点很接近, 必然大部分随乙基苯送出装置, 其他产品由于乙基苯的沸点介于这些副产品之间, 因此这些回收的原料和副产品要分离成高于和低于乙基苯

沸点的两个循环物料流。三乙苯部分循环,部分随杂环化合物排出作为低值副产品。

(6)杂环化合物:低值副产品。

若把二乙苯作为循环物料,产品流股数如下:

- ①乙烯、乙烷——→排空
- ②苯、甲苯——→循环
- ③乙基苯(二甲苯)——→主产品
- ④二乙苯、三乙苯、异丙苯、正丙苯——→循环
- ⑤杂环化合物——→低值副产品

3.5 反应器选型

在决定了反应过程的输出条件后,首先应决策的是反应器的选型。不同型式的反应器适用于不同的反应介质,具有不同的传递过程特征,即不同的流体返混程度和传热传质特性。设计人员应熟悉各种类型反应器的性能并善于判断,对某一特定的反应过程需要怎样的传递特征,由此进行反应器的选型。

3.5.1 反应器类型^[1]

工业上使用的反应器形式多种多样,可以从不同的角度对它们进行分类。如可按反应器的形状分为管式反应器、釜式反应器和塔式反应器;按换热方式分为等温反应器、绝热反应器、非等温非绝热反应器等。但最常用的分类方法是按反应物系的相态进行分类,将反应器分为均相反应器和非均相反应器,非均相反应器又可分为气固相反应器、气液相反应器、气液固相反应器。表3-1列出了工业上应用最广泛的若干种反应器及其主要特征和工业应用举例。

表3-1 反应器的型式与特性

编号	型式	适用的反应类型	混和特性	温度控制性能	其他特性	应用举例
1	管式	气相、液相、气液相	返混很小	比传热面大,易控制温度	管内可加构件,如静态混合器	烃热裂解制乙烯,石油树脂,高压聚乙烯
2	空塔或搅拌塔	液相、液液相	返混程度与高径比有关	轴向温差较大	结构简单	尿素合成,苯乙烯本体聚合
3	搅拌釜	液相、液液相、液固相	物料混和均匀	温度均匀,容易控制	可间歇操作或连续操作	苯硝化,丙烯酸聚合,氯乙烯聚合
4	通气搅拌釜	气液相	返混大	温度均匀,容易控制	气液界面和持液量均较大,搅拌器密封结构复杂	微生物发酵
5	绝热固定床	气固相、液固相	返混小	床层内不能控制温度	结构简单,投资和操作费用低	苯烃化制甲苯,丁烯氧化脱氢
6	列管式固定床	气固相、液固相	返混小	传热面大,易控制温度	投资和操作费用介于绝热固定床和流化床之间	乙苯脱氢,乙烯制醋酸乙烯
7	流化床	气固相、液固相	返混较大,不适于高转化率或有串联副反应的系统	传热好,温度容易控制	颗粒输送方便,但能耗大,适用于催化剂失活快的反应,操作费用大	丙烯氨氧化制丙烯腈,催化裂化
8	移动床	气固相、液固相	固体返混小	床内温差大,温度调节困难	颗粒输送方便,但能耗大,适用于催化剂失活快的反应,操作费用大,允许的气(液)固比范围大	石油连续重整,煤气化
9	板式塔	气液相	返混小	如需传热,可在板间加换热管	气液界面大,持液量较大	异丙苯氧化
10	填料塔	气液相	返混小	床层内不能控制温度	气液界面大,持液量小	CO ₂ 脱除,合成气CO脱除
11	鼓泡塔	气液相,气液固相	气相返混小,液相返混大	如需传热,可设置换热管,温度容易控制	气相压降较大,气液界面小,持液量大	乙醛氧化制醋酸,丙烯氨氧化
12	喷射反应器	气相、液相	返混较大	流体混和好,直接传热速度快	操作条件限制严格,缺乏调节手段	氯化氢合成,丁二烯氯化

续表						
编号	型式	适用的反应类型	混和特性	温度控制性能	其他特性	应用举例
13	喷雾塔	气液相	气相返混较小	无传热面,床层内不能控制温度	结构简单,气液界面大,持液量小	高级醇连续磺化
14	滑流床	气液固相	返混较小	不能用传热方法调节温度	气液均布要求高	碳三炔烃加氢,丁炔二醇加氢
15	浆态反应器	气液固相	返混大	如需传热,可设置换热管,温度容易控制	催化剂细粉回收分离困难	乙烯溶剂聚合

3.5.2 反应器选型方法^{[1][16]}

反应器的选型可用形态分析法来解决。

形态分析法指的是对一个问题各个部分的所有可能方案进行分析和评价,这种分析方法用逻辑结构代替随机的想法,从而能筛选出最佳方案。它包括两个步骤:第一步称作分支,这一步是找出所有可供选择的方案;第二步称作收敛,这一步是根据若干个判据对各个供选择的方案进行淘汰,这个分析过程可用图3-5来说明:

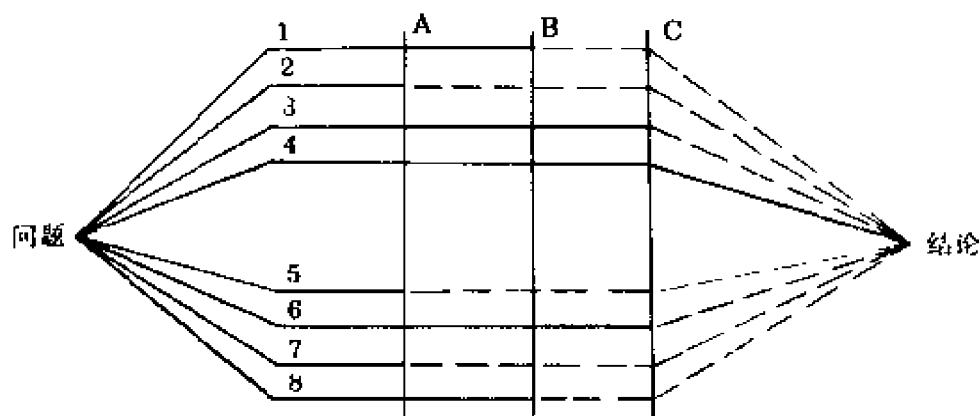


图3-5 形态分析

(本图引自参考文献[10])

解决某个问题有8个可能的方案和三个判据:A、B和C。当用

A 作为判据时,淘汰了方案2、5和7;再用判据 B,淘汰了方案1和8,此时尚剩下方案3、4、6三个,最后用判据 C,淘汰了方案3和6,剩下方案4是唯一保留的方案。

当将形态分析法用于反应器的选型时,根据表3-1所列出的各种型式反应器的特性和反应要求,用各条判据淘汰不合适的方案,直到只有一个方案,或虽然最后仍保留一个以上方案,但已无法用判据进行定性判断,需进一步进行定量计算时为止。

3.5.3 反应器选型判据

3.5.3.1 反应类别

反应类别即反应介质的类别,例如为气固相、气液相或气相反应。这是最简单但却是应首先使用的判据。

3.5.3.2 催化剂的失活速度

对于催化反应,应判别催化剂的失活速度。如果催化剂失活速度很快,床层的操作周期很短,例如几秒钟、几分钟、几小时,则应采取流化床或移动床等床型,否则应采用其他型式的反应器以减少投资和操作费用。

3.5.3.3 由反应的浓度效应决定的混和要求

反应器中的物流混和按尺度可分为宏观混和和微观混和两种。宏观混和指大尺度的混和现象,如在搅拌釜式反应器中由于机械搅拌反应物流发生设备尺度的循环流动。在连续流动反应器中,宏观混和就是返混,返混使反应器中反应物的平均浓度降低,产物的平均浓度升高。

对于并行反应,若主反应级数大于副反应,应保持较高的反应物浓度,因此,要求反应器的流型为活塞流或用间歇釜式反应器;若副反应级数大于主反应,则应保持较低的反应物浓度,这时应选择高转化率的连续釜式搅拌反应器(CSTR)或者其他返混程度大的反应器。对于串联副反应,应尽量降低产物浓度,选择返混程度较低的反应器。

微观混和指小尺度的湍流脉动将流体破碎成微团,微团之间

的碰撞、合并和再分散以及通过分子扩散使反应物系达到分子尺度均匀的过程。具有相同宏观混和状态的反应器,可以有三种完全不同的微观混和状态:

- (1)微观完全均匀;
- (2)微观完全离析;
- (3)微观部分混和。

虽然就反应速率而言,微观混和的影响比宏观混和小得多,但对存在平行和(或)串联副反应的快速气相反应,以及对产物的粒度和晶形分布有严格要求的催化剂和一些超细颗粒的制备过程,微观混和状态会对产物分布和质量产生重大的影响,甚至成为过程成败的决定因素,必须正确选择反应器的型式、结构尺寸和操作条件(如搅拌速度、加料时间、反应物体积比),以保证反应在要求的微观混和状态下进行。必要时应在反应器进口或反应物进入反应器处增加混和设施。

3.5.3.4 由反应的热负荷和温度效应所决定的热量传递和温度控制要求

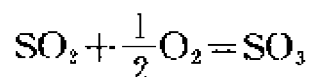
若在反应过程中不进行热量的传递,那么必然放热反应温度逐渐升高,吸热反应温度逐渐降低。对强吸热反应,由于温度降低可能使反应在达到预期的转化率之前就已停止;对强放热反应则可能由于下列原因需对反应引起的温升加以限制:

- (1)对可逆放热反应,温度升高会降低平衡转化率;
- (2)过大的温升会超出催化剂的使用温度上限;
- (3)当副反应活化能大于主反应活化能时,温升会导致目的产物选择性降低。

因此应该按照反应系统的绝热温升和过程温度控制的要求,由简至繁选择反应器型式。

绝热固定床是结构最简单的反应器,应首先采用。若反应器的绝热温升过大,或者反应的热效应使反应过程的温度不符合适宜的温度序列要求,因而不能采用单段绝热床时,应首先考虑将催化剂床层分成若干段、在段间进行换热或加冷物料。

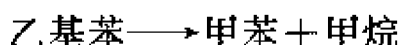
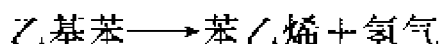
例如,制造硫酸的二氧化硫氧化反应



这是一个可逆放热反应,高温能提高反应速度,缩小反应器的体积,但温度高使平衡转化率下降。为了兼顾反应速度和转化率两个互相矛盾的要求,应采用先高后低的温度序列。但该反应为放热反应,若不加以控制,随着反应的进行温度将逐渐升高。因此应采用多段绝热床,在段间加换热器进行冷却,或者直接加入冷反应物,降低下一个绝热反应床层的温度,使其符合先高后低温度序列的要求。

当反应的适宜温度范围比较窄,若用多段绝热床则反应器的段数过多,造成流程过于复杂或者反应过程压降过大。在这种情况下,可以考虑采用列管式反应器。

例如,BASF 公司的乙苯脱氢生产苯乙烯的过程采用列管式反应器。乙苯脱氢是个可逆吸热反应,且有平行副反应,副反应的活化能高于主反应:



可逆吸热反应其反应温度提高既有利于提高反应速度又有利于提高平衡转化率,但温度过高将降低选择性和增加结炭,因此应采用等温反应器以同时保持高的转化率和选择性。

在列管式反应器中,边反应边进行热量交换,当反应热效应不大时,反应温度可始终保持在比较适宜的水平上。但是对热效应特别大的强放热反应,在进口段由于反应浓度高,放热量大,物料温度将急剧升高,然后随着反应物的消耗,放热速率逐渐减小,物料温度又会逐渐下降,因此床层中会出现一个温度最高点——热点。冷却介质、反应物进口浓度、温度的变化对于热点温度往往很敏感。对这类强放热反应,即使采用直径25mm 的细管,仍可能因设计或操作不当而破坏了反应器的热稳定条件和(或)反应器的状态对某些参数过分敏感,导致床层温度急剧上升——飞温,这不仅会

使反应选择性严重恶化,而且还可能损坏催化剂和反应器。在设计这类强放热反应的反应器时,除满足热量平衡的要求外,还必须对反应器的热稳定性和参数敏感性进行分析。

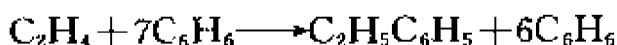
对上述强放热反应过程,有两种可能的选择:

- (1)采用3.7节所述的控制温度的补充方法;
- (2)选择流化床反应器。

在流化床反应器中,大热容量的固体颗粒进行循环运动,能有效地消除床层可能发生的局部过热,床层和换热面之间的高传热系数,有助于满足反应器热稳定性的要求。

例3-3 苯和乙烯在分子筛催化剂上进行气相烷基化反应,工艺条件试验的结果表明,催化剂适宜的使用温度范围为370~420℃,在苯和乙烯的摩尔比(苯烃比)等于7的条件下,催化剂的操作周期大于两个月,选择性大于99.5%。苯烃比愈大,对反应的选择性和降低催化剂的失活愈有利。设反应物料进反应器的温度为380℃,试选择反应器型式。

解: 假设反应器内只发生乙烯和苯作用生成乙苯的反应,乙烯的转化率为100%,即



由物化数据手册可查得此三组分的标准生成热 ΔH_f°

$$\Delta H_{\text{TEB}}^\circ = 29.76 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta H_{\text{FE}}^\circ = 82.85 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta H_{\text{FB}}^\circ = 52.25 \text{ kJ/mol}$$

所以,此反应的反应热 ΔH_R 为

$$\begin{aligned}\Delta H_R &= H_{\text{TEB}}^\circ - H_{\text{FE}}^\circ - H_{\text{FB}}^\circ \\ &= 29.76 - 82.85 - 52.25 \\ &= -105.34 \text{ kJ/mol}\end{aligned}$$

乙烯、苯和乙苯的热容可用如下温度关联式计算:

$$C_p = A + BT + CT^2 + D^3 \quad [\text{J}/(\text{mol} \cdot \text{K})]$$

由数据手册查得上述温度关联式的系数如下:

	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>C</i>	<i>d</i>
乙烯	3.806	0.1565	-8.348×10^{-5}	1.755×10^{-7}
苯	-33.917	0.4734	-3.017×10^{-4}	7.130×10^{-8}
乙苯	-43.099	0.7071	-4.810×10^{-4}	1.300×10^{-7}

由于乙苯生成反应是气固相反应, 可选择的反应器有绝热固定床、列管式固定床、流化床和移动床。题目中已说明催化剂的操作周期大于两个月, 因而不必选择结构和操作都较复杂的流化床或移动床, 绝热固定床较列管式固定床更简单, 只要绝热床能满足温度要求, 应尽量选择绝热床, 因此应进行热量衡算。

反应器进口和出口物料的热容-温度关联式如下:

$$\begin{aligned} \text{进口物料: } & 3.806 \times 0.125 - 33.917 \times 0.875 + (0.1565 \times 0.125 \\ & + 0.4734 \times 0.875) \times T - (0.8348 \times 0.125 + 3.017 \times 0.875) \times \\ & 10^{-4} \times T^2 + (1.755 \times 0.125 + 7.130 \times 0.875) \times T^3 \times 10^{-8} = - \\ & 29.201 + 0.4338T - 2.744 \times 10^{-4} \times T^2 + 6.457 \times 10^{-8} \times T^3 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{出口物料: } & -(43.099 \times 0.125 + 33.917 \times 0.75) + (0.7071 \times \\ & 0.125 + 0.4734 \times 0.75) \times T - (4.810 \times 0.125 + 3.017 \times 0.75) \times \\ & 10^{-4} \times T^2 + (13.0 \times 0.125 + 7.130 \times 0.75) \times T^3 \times 10^{-8} = -35.064 \\ & + 0.5022T - 3.241 \times 10^{-4} \times T^2 + 7.863 \times 10^{-8} \times T^3 \end{aligned}$$

反应物从进口温度380℃降到25℃的焓 ΔH_1

$$\begin{aligned} \Delta H_1 &= \int_{298.15}^{653.15} (-29.201 + 0.4338T - 2.744 \times 10^{-4} \times T^2 + \\ & 6.457 \times 10^{-8} \times T^3) dT \\ &= 54824 - 8266 = 46547 \text{ kJ/kmol} \end{aligned}$$

出口物料在25℃时的焓 H_2 :

$$\begin{aligned} H_2 &= -35.064T + 0.2511T^2 - 1.08T^3 \times 10^{-4} + 1.9658T^4 \times \\ & 10^{-8} = 9158 \text{ kJ/kmol 反应物} \end{aligned}$$

出口物料焓 H_3 应为:

$$\begin{aligned} H_3 &= \Delta H_1 + \Delta H_R/8 + H_2 \\ &= 46547 + 105340/8 + 9158 \\ &= 68873 \text{ kJ/kmol} \end{aligned}$$

反应物出口温度用下式求解：

$$H_3 = -35.064T + 0.2511T^2 - 1.08T^3 \times 10^{-4} + 1.9658T^4 \times 10^{-8} = 68873 \text{ kJ/kmol}$$

在 $T=713\text{K}$ 时 $H_3=68584 \text{ kJ/kmol}$

$T=714\text{K}$ 时 $H_3=68772 \text{ kJ/kmol}$

$T=714.5\text{K}$ 时 $H_3=68865 \text{ kJ/kmol}$

故反应物出口温度为714.5K,已超出催化剂所要求的温度范围,应采用多段绝热床。

3.5.3.5 相际传质和化学反应的相对速度

对于非均相反应器有相际传质和化学反应两个以上串联的过程,应根据各过程之间相对速度选型。

(1)对于气液反应器,若是传质控制,应选择气液接触面大,持液量较小的反应器如喷雾塔,喷射反应器;若是反应控制,则应选择液量大的反应器如鼓泡塔,板式塔。

常用气液反应器的主要传递性能指标见表3-2。

表3-2 气液反应器的主要传递性能指标

型 式		相界面积 $\frac{\text{m}^2}{\text{液相体积 m}^3}$	液相体积 分率 ϵ_l	相界面积 $\frac{\text{m}^2}{\text{反应器体积 m}^3}$	气相传质 系数 (m/s)	液相体积 ϵ_l 膜体积 $\alpha\delta$
液膜型	填料塔	~1200	0.95~0.1	60~120	0.3~2×10 ⁻⁴	40~100
	湿壁塔	~350	~0.15	~50		10~50
气泡型	泡罩塔	~1000	0.15	150	1~4×10 ⁻⁴	40~100
	筛板塔	~1000	0.12	120	1~4×10 ⁻⁴	40~100
	(无降液管) 鼓泡塔	~20	0.6~0.98	~20	1~4×10 ⁻⁴	4000~10000
	通气搅拌釜	~200	0.5~0.9	100~180	1~5×10 ⁻⁴	150~500
液滴型	喷雾塔	~1200	~0.05	~60	0.5~1.5×10 ⁻⁴	2~10
	喷射反应器	~1200	0.05~0.1	60~120	5~10×10 ⁻⁴	

注:1)本表参考了文献[1]。

2)表中数据是水-空气体系的实测值,若体系的粘度、表面张力等物性和水-空气差别较大,使用上述数据应慎重。

决定气液反应器选型的定量判据是八田数 φ , 其定义为:

$$\varphi = \frac{\sqrt{k C_{B1} D_A}}{k_{10}}$$

式中 k ——反应速率常数;

C_{B1} ——液相反应物 B 的主体浓度;

D_A ——气相反应物 A 在液相中的扩散系数;

k_{10} ——液相传质系数。

八田数 φ 的物理意义为液膜中的最大反应速率与透过液膜的最大物理传质速率之比。

当 $\varphi > 3$ 时有两种情况, 第一种情况是反应为快反应或飞速反应, 反应在相界面上或液膜内完成, 在液相主体中气相组分 A 的浓度 C_{A1} 为零, 反应器的生产强度与相界面积成正比, 而与持液量无关。因此, 对这类反应应选用相界面积大的反应器, 如填料塔、喷雾塔。第二种情况是反应并非为快反应, 有部分在液相主体完成, 这时仍然要求有较长的液相停留时间, 可选择板式塔。

当 $\varphi < 0.02$ 时, 反应为慢反应, 主要在液相主体中进行, 组分 A 的液相主体浓度 C_{A1} 接近界面浓度 C_{Ai} , 反应器的生产强度和持液量成正比, 所以应选择持液量大的反应器。由于鼓泡塔结构简单, 操作控制方便因而常被采用。

对 $0.02 \leq \varphi < 3$ 的中速反应体系, 情况比较复杂, 这时过程阻力既可能主要在相际传质, 也可能主要在液相反应, 或两者都不能忽略。此时, 需借助参数 $\alpha\varphi^2$ 作进一步的判别。 α 为液相总体积与液膜体积之比, 参数 $\alpha\varphi^2$ 的物理意义是最大液相主体反应速率与最大物理传质速率之比。当 $\alpha\varphi^2 \gg 1$, 说明过程阻力主要在相际传质, 反应仅发生在液相中某一狭小区域内, 所以应选用相界面积较大的设备。当 $\alpha\varphi^2 \ll 1$ 时, 说明过程阻力主要在液相, 反应在整个液相主体中进行, 所以应选用持液量较大的设备。当 $\alpha\varphi^2 \approx 1$ 时, 说明相际传质和液相主体反应的阻力都不能忽略, 应选择相界面积和持液量均较大的设备, 如通气搅拌釜。

(2)对于气固相催化反应,传质和反应的相对速度并非通过反应器选型,而是通过催化剂的工程设计,即对催化剂的粒径、孔道结构和活性组分分布提出要求而解决的。

(3)对于气液固三相反应器,传质过程的阻力由四部分组成,即气膜阻力、气液相界面液膜阻力、气固相界面液膜阻力和固相(催化剂)内扩散阻力对手。反应速率主要由催化剂内扩散控制的快速反应,应减小催化剂颗粒直径或选择异形催化剂。当催化剂颗粒很小,若采用涓流床会使床层压降过大时可采用浆床反应器。除此以外应选用涓流床或固定床鼓泡反应器,因为浆床反应器的催化剂要分离回收,这将使生产费用增加。

3.6 主要工艺参数选择

在确定了反应器的构型后,还必须正确选择反应器的主要工艺参数,才能使反应器的操作达到理想的技术经济指标。反应器的主要工艺参数包括反应温度或温度序列、反应压力、反应物进料组成和空速。这些参数的确定和优化组合通常需经过系统的工艺试验或利用反应动力学模型作多种方案计算。限于篇幅,本书不可能在这方面展开详尽讨论,下面只作定性的介绍。

3.6.1 温度

反应温度的选择要考虑下列诸因素。

3.6.1.1 反应平衡

式(3-22)表示了温度对平衡常数的定量影响,对于放热反应,由于标准反应热是负的,增加温度将使平衡常数 K 减小和平衡转化率下降,故在反应初期离平衡点较远时可采用高温以提高反应速度,到反应后期接近平衡时,应降低温度以提高平衡转化率,即采取渐降的温度序列。

吸热反应的标准反应热是正的,温度升高使平衡常数增大,平衡转化率提高,应始终保持高温。

3.6.1.2 反应特性

阿累尼乌斯定律表达了反应速度与温度之间的定量关系。

$$K = K_0 e^{-E/RT} \quad (3-32)$$

式中 K ——反应速度常数；

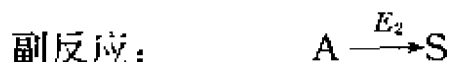
K_0 ——频率因子；

E ——活化能。

两边取对数得 $\ln K = \ln K_0 - \frac{E}{RT}$

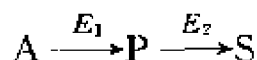
由上式可见,温度愈高,反应速度愈快,所需反应体积愈小。但是,工业上经常遇见的反应大多数伴有各种并行、串联或并串联副反应,这时,就不能片面追求高温反应速率大,而要考虑主、副反应活化能的相对大小来选择温度。

对于并行反应



若 $E_1 > E_2$,应选择高温;若 $E_2 > E_1$,应选择温度逐渐升高的温度序列。因为在反应开始 A 浓度高时,反应速度较快,此时选择低温有利于选择性的提高;到反应末期, A 的浓度已降低,若继续保持低温,需要很大的反应体积,而对选择性的影响已不显著,故此时可以适当提高温度。


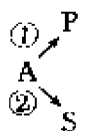
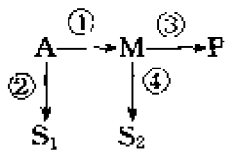
对于串联反应



若 $E_1 > E_2$ 应保持高温,到达所要求的转化率后应迅速降温,以防止副反应进一步进行,若 $E_2 > E_1$ 则应在全过程保持低温,但不能过低,以保持一定的(可以接受的)反应速率。

现将工业上若干常用的反应模式的适宜温度序列列于表3-3。

表3-3 若干反应模式的适宜温度序列

反应模式	反应特性	温度序列	备 注
	$E_3 > E_1, E_2 > E_1$ $E_3 > E_1 > E_2$ $E_2 > E_1 > E_3$	低温 先低后高 先高后低(高初始温度)	
$A \xrightarrow{①} P \xrightarrow{②} S$	$E_2 > E_1$ $E_1 > E_2$	先高后低 高温	
	$E_1 > E_2$ $E_2 > E_1$	高温 低温	
	$E_1 > E_2, E_3 > E_4$ $E_1 < E_2, E_3 < E_4$ $E_1 < E_2, E_1 > E_4$ $E_1 > E_2, E_3 < E_4$	高温 低温 先低后高 先高后低	M 为中间产品

3.6.1.3 温度的限制条件

对于有一些反应过程,温度越高越有利,或者温度越低越有利。例如对主反应是可逆吸热反应,且主反应的活化能高于副反应的活化能的过程,温度越高越有利。相反,若主反应是可逆放热反应,且主反应活化能低于副反应的活化能,则应尽可能采用低温,这时适宜的温度就处于某种限制条件的边界处。

这些限制条件可能是:

- (1) 催化剂使用温度范围的限制。
- (2) 材质使用温度范围的限制。

例如某反应其温度可行域为673~923K,若温度高对反应有利则可能有两种选择:一种是采用 Cr5Mo 钢,其使用温度范围可达773K;另一种选择是用18-8不锈钢,其使用温度可满足上限923K 的要求。但后者的价格要比前者贵50%,这时就要进行经济分析和比较,求出使用两种不同材质的投资和经营费用,再根据一

定评价准则进行选择。若选择 Cr5Mo 钢,则适宜操作温度取决于材质的限制条件,即773K,若选择18—8不锈钢,则适宜的温度为温度可行域的边界923K。

3.6.1.4 由反应压力决定的温度极限

若有某液相反应,温度高对反应有利。但温度与压力有一定的对应关系,若温度高,相应的压力也高,若超过某一压力,设备设计所遵循的规范要发生变化,例如当压力高于2.5MPa时,要按4.0MPa的规范设计,设备和管道必须采用高颈法兰,投资大幅度增加,这时适宜的温度可能是2.5MPa压力下的泡点温度。

3.6.2 压力

3.6.2.1 反应平衡

设有气相反应 $aA + bB = dD + sS$

假设这些组分构成理想溶液即活度系数为1,则平衡常数

$$K = \frac{f_D^d \cdot x_D^d \cdot f_S^s \cdot x_S^s}{f_A^a \cdot x_A^a \cdot f_B^b \cdot x_B^b} = \frac{x_D^d \cdot x_S^s \cdot \varphi_D^d \cdot \varphi_S^s}{x_A^a \cdot x_B^b \cdot \varphi_A^a \cdot \varphi_B^b} P^{-(a+b-d-s)} \quad (3-34)$$

式中 x ——组分的分子分率;

f ——各纯组分逸度;

φ —— f/p ,逸度系数(p 为总压)。

逸度系数可用状态方程计算或者简单地从逸度系数与对比温度、对比压力关系图查取

$$\text{令} \quad K_p = \frac{\varphi_D^d \cdot \varphi_S^s}{\varphi_A^a \cdot \varphi_B^b} \quad (3-35)$$

在压力不太高的情况下可以近似地认为 $K_p = 1$,这时(3-34)简化为

$$K = \frac{x_D^d \cdot x_S^s}{x_A^a \cdot x_B^b} P^{-(a+b-d-s)} = f(T) \quad (3-36)$$

式(3-36)表示压力与平衡组成之间的定量关系。对于分子数增加的反应,压力增加将使平衡转化率下降,而对分子数减少的反应,压力增加将使平衡转化率增加。

3.6.2.2 反应速度

对于均相反应,反应速度 r 可用下式表示

$$r_R = k c_A^a \cdot c_B^b \cdots c_N^n \quad (3-37)$$

式中 c_A, c_B, \cdots, c_N 为单位体积内各组分分子数;

a, b, \cdots, n 为相应组分的反应级数。

对于气相,单位体积内分子数和压力近似地成正比关系,因此压力增高,反应速度加快。

对于气液相反应和气液固三相反应,增加压力能增加气相组分在液相中的溶解度,对提高反应速率也是有利的。

3.6.2.3 反应物料所需要的相态

在选择反应器工艺条件时,温度常常是最主要的参数,因此对于气相反应而言,其压力必须低于露点压力;对液相反应而言,其压力必需高于泡点压力。在满足这两前提条件下,压力的选择取决于设备投资、压缩与抽真空的经常费用等因素。

3.6.2.4 后续分离系统的要求

当反应器出口物料进入分离系统后,第一个分离步骤常是将其冷却,产生汽液两相后加以分离。若单纯冷却不足以使其产生汽液两相就要考虑加压。若加压对反应无不利影响,而且加压原料较加压反应器出口物料费用低,就应采取反应加压的方案,这时反应器的压力取决于后续分离系统的要求。

3.6.3 组成

对于化学反应 $A+B \rightarrow P$ 其进料组成 A 和 B 的比例是一个需决策的变量。

在下列几种情况下使 A 和 B 不按化学计量系数配比,而是使 A (或 B)过量可能是有利的。

3.6.3.1 某一反应物要求有很高的转化率

若反应的动力学方程式为 $-r_A = k c_A c_B$,当反应物组成 $c_A = c_B$ 时,则 $-r_A = R c_A^2$,即该反应成为 A 的二级反应。若要求 A 的转化率为 99% 时,反应末期的反应速度,仅为反应初期的万分之一,因

此应使 A 过量以提高反应末期的反应速度。

3. 6. 3. 2 反应物和产物分离困难

若 B 和产品 P 分离很困难,而反应是可逆反应或者是 A 的反应级数大于零,这时可以采用 A 过量的方法提高 B 的转化率。

例如苯加氢生成环己烷的反应为可逆反应



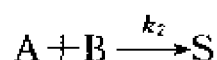
(B) (H) (C)

苯的沸点为 353. 1K, 环己烷为 353. 9K, 因此用精馏的方法分离是极其困难, 甚至是不可能的。因此苯加氢反应除加压和保持较低的温度外, 还采用很高的氢苯比以提高苯的转化率。

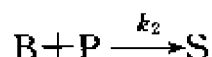
又例如用 CO 和 Cl_2 生成光气, $\text{CO} + \text{Cl}_2 \longrightarrow \text{COCl}_2$, 光气是生产二异氰酸酯的原料, 要求不含氯。因此采取使 CO 过量的措施使原料 Cl_2 的转化率尽可能接近 100%。

3. 6. 3. 3 反应的浓度效应

若有并行反应 $\text{A} + \text{B} \xrightarrow{k_1} \text{P}$



或并串联反应 $\text{A} + \text{B} \xrightarrow{k_1} \text{P}$



两个并行反应的速度比 $\frac{r_P}{r_S} = \frac{k_1 c_A^{a_1} c_B^{b_1}}{k_2 c_A^{a_2} c_B^{b_2}}$

并串速反应的速度比 $\frac{r_P}{r_S} = \frac{k_1 c_A^{a_1} c_B^{b_1}}{k_2 c_B^{b_2} c_P^{p_2}}$

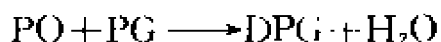
式中 k_1, k_2 —— 反应速度常数;

a_1, a_2, b_1, b_2, p_2 —— 反应级数;

c_A, c_B, c_P —— 反应物浓度。

对于并串联反应和 $a_1 > a_2, b_1 \leq b_2$ 的平行反应, 可以使 A 过量以提高主反应的选择性。

如环氧丙烷 PO 水解生成主产品丙二醇 PG 和副产品一缩丙二醇 DPG 的反应:



主反应和副反应都是 PO 的一级反应,因此,采用加大水与环氧丙烷比例的方法可提高选择性。

3.6.3.4 分离循环费用

若有串联反应 $\text{A} + \text{B} \longrightarrow \text{P} \longrightarrow \text{S}$

A 或 B 过量都能提高 P 的选择性,究竟取 A 过量或 B 过量,视 A 和 B 的反应级数,价格和产品分离的难易程度以及循环费用而定。

上述任何一种原料过量带来的利益都是以过量原料的分离和循环为代价的,因此,必须权衡得失,进行参数优化的工作后确定。

3.6.4 转化率

反应器的功能是生产产品,因此要求有较高的转化率,但转化率并非越高越好。对于非零级的化学反应,随着转化率的提高,单位产品所需的反应器体积急剧增加。以一级反应为例,若转化率从 90% 提高到 99%,产量提高 9%,但反应器所需体积增加一倍;更重要的是对于有串联副反应的反应系统,转化率提高将使选择性下降,因此不能盲目选择过高的转化率。另一方面,前文已经指出,原料费用占产品成本的 35%~85%,若转化率不是 100%,则将增加原料消耗费用,或者增加原料和产品的分离并将其循环回反应器进口的费用。正确选择转化率必须有下列数据:

- (1) 转化率和所需反应时间的关系。
- (2) 各种转化率下的产品分布。
- (3) 计算产品和原料分离所需的各种物性数据。
- (4) 各种物料和公用工程的价格。
- (5) 反应系统和分离系统设备价格。

然后根据第二章所述经济评价的方法确定最经济的转化率。

3.7 控制反应热的补充方法

合理选择反应器的型式是使反应器有理想的温度分布的最重要条件。在反应器型式已经确定而仍不能满足温度控制要求时,可采用下述方法作为控制温度的补充手段。

3.7.1 溶剂蒸发

对于一些物料流动有困难,既不能采用多段绝热床又不能采用间壁换热的反应,可以通过反应物或溶剂的蒸发再冷凝回流的方法带走反应热。例如聚丙烯本体聚合采用釜式反应器,反应夹套传递的热量不能满足温度控制的需要,采用这样的措施,即将反应物丙烯本身吸收热量蒸发成气相,上升至丙烯冷凝器,再用水冷凝成液相后靠重力返回聚合反应釜。

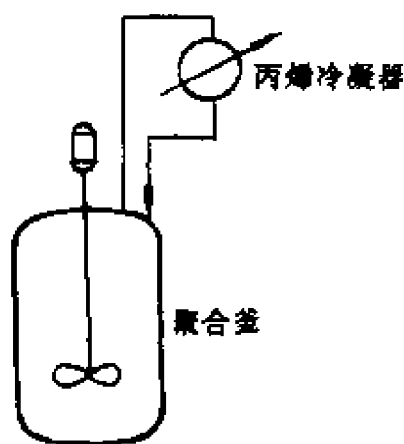


图3-6 溶剂蒸发散热

3.7.2 出口物料循环

若产物循环返回反应器进口不会降低选择性,则可将反应器出口物料部分循环至反应器进口,以稀释反应物,降低绝热温升。

例如,丙烯丙烷馏分中含有少量甲基乙炔和丙二烯,这两种杂质可以通过催化加氢反应除去。

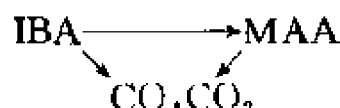
主反应 甲基乙炔(丙二烯) + 氢气 \rightarrow 丙烯 + Q

副反应 丙烯 + 氢气 \rightarrow 丙烷 + Q

反应生成的产物丙烯和丙烷就是反应器进料的主要成分,因此可以将其返回反应器进口以降低甲基乙炔和丙二烯的浓度而不会有任何降低选择性的不良影响。

3.7.3 催化剂稀释

伴有强放热的气固相催化反应,即使采用列管式换热器,由于管内外温差不能任意调节,管内传热系数比较低,所能传导的热量有限,不能防止反应区热点温度过高而引起失控的问题。这时可采取将惰性固体颗粒掺到催化剂床层中以降低反应速率,使单位管长所需的传热量降低。例如,异丁醛(IBA)在磷-钼-钒催化剂上氧化生成甲基丙烯酸(MAA)的过程,其简化的反应图式如下:



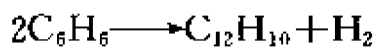
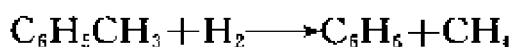
主副反应都为放热反应,副反应的热效应和活化能都高于主反应。若温度超过规定值,将产生使副反应的反应速度上升,反应放热增加,反应温度迅速上升的恶性循环。因此必须严格控制温度。采用列管式反应器并稀释催化剂,使单位反应体积的放热量降低,能通过管壁及时移走反应热。

3.7.4 惰性稀释剂

当各种控制温度的方法都不宜采用时,可以考虑在反应器进料中加入惰性稀释剂作为热载体。但分离热载体与产物并使其循环是需要费用的,因此应尽量选择易于分离,并对反应具有良好作用的物质,或者原来就存在于系统中的物质。例如前文已述及的乙苯脱氢反应,可用水蒸气作为热载体。由于乙苯脱氢为分子数增加的可逆反应,减压对提高平衡转化率有利,加入水蒸气不仅作为热载体,而且还能降低苯乙烯和氢气的分压。水蒸气经冷却后冷凝成

水,与烃类分离容易,是一种较理想的稀释剂和热载体。

又例如甲苯脱烷基制苯反应:



为了防止结焦, H_2 是过量的, 在反应器出口与苯分离后返回反应器进口。 CH_4 作为惰性气必须排放, 否则将在系统中积累。排放气体中 CH_4 的含量越高, H_2 的损失越少, 但循环量越大, 因此有一个最经济的 CH_4 含量, 假设为 20%, 但是在此循环量下, 反应器的出口温度将超过允许值, 因此从热量平衡出发考虑所需的循环气量, 比经济的循环气量加大一倍, 此时循环气体中的甲烷含量约为 60%。

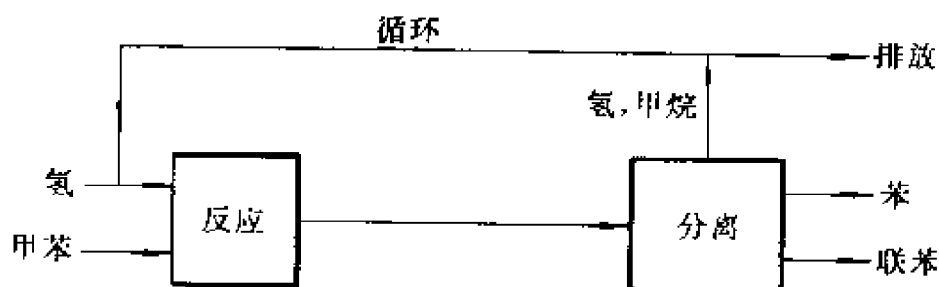
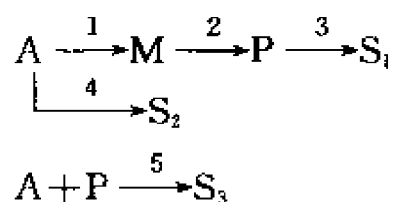


图3-7 甲苯脱烷基制苯总流程

3.8 反应器网络的配置

若根据反应过程的特性,如转化率、热效应、反应速度、主副反应活化能相对大小、主副反应的反应级数等和设计目标,需要有一个以上的反应器(或反应级,下同),并且各反应器有不同的操作参数时就产生了反应器网络的配置问题,即决定反应器之间物流的连接方式,使一给定的目标函数,例如最大转化率、最高选择性或最长操作周期达到最优。常用的反应图网络配置方案见图3-8。

设有一反应,其反应图式(reaction scheme)如下:



式中 A 是反应物, M 是中间产物, P 是目的产物, S_1 、 S_2 和 S_3 是副产物, 数字为反应编号。

若目标函数是使 P 的产率最大, 可根据各反应不同的反应特性和动力学参数, 要求各反应器不同的浓度分布和温度分布^[6]选择图3-8所示配置方案中的一种。

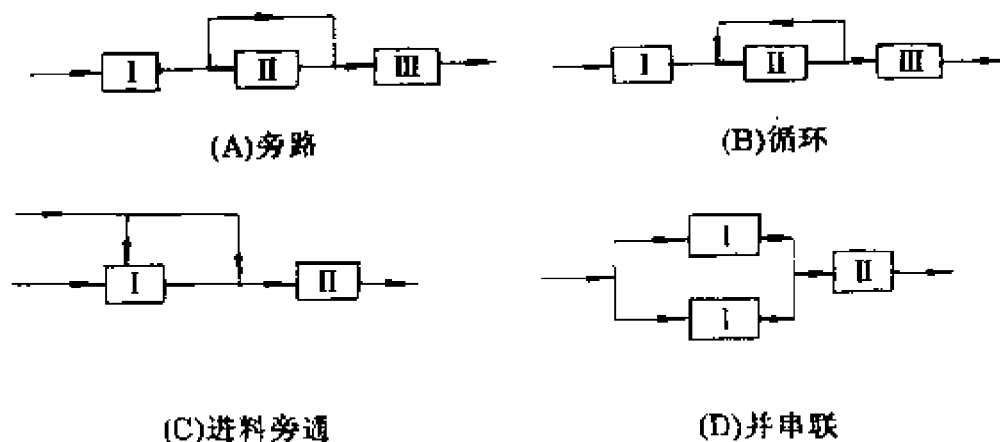


图3-8 反应器网络的配置方案

(本图摘自 Stephanopoulos G. *Synthesis in The Design of Chemical Processing Systems*, MIT 教材。)

图3-8(A)适用于要求提高反应器 II 进口反应物 A 的浓度的情况。

图3-8(B)适用于要求降低反应器 I 进口反应物 A 的浓度的情况。

图3-8(C)适用于原料 A 有两个组分 A_1 和 A_2 , 要求降低反应器 I 的某个组分含量的情况。

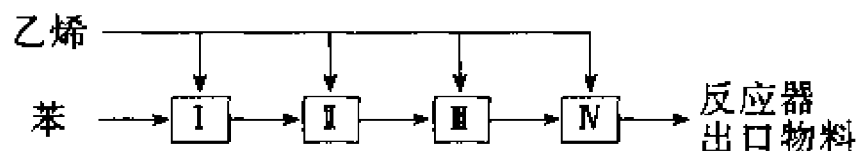
图3-8(D)适用于反应器有较严格的温度控制要求或物流的

均布要求,因而要改变传热比表面积或反应器尺寸的情况。

除前文曾介绍的丙炔加氢反应器属于图3-8(B)配置方案外,再举两个例子来说明图3-8中所示配置方案在工业中的应用。

例3-4 乙烯和苯气相反应生成乙基苯的反应采用多段绝热床反应器,因为根据反应器选型的各条判据,该反应的失活速度还没有快到需要采用流化床或移动床反应器的程度,根据反应的热效应和适宜的温度范围,不要求采用列管式固定床反应器,但是需采用多段绝热床反应器以便在段间换热或淬冷。这时就产生了选择反应器的配置方案的问题。

该反应的失活动力学研究显示,虽然催化剂失活的速度和乙烯、苯和乙苯都有关,但是乙烯使催化剂失活的速度最快,苯最慢。对该反应的反应网络研究表明副产物甲苯和二甲苯系串联副反应的产物。这两点反应特性都要求在反应的全过程始终保持较高的苯浓度,即苯过量,因此应选择图3-8(C)这种方案,具体结构如下:



例3-5 石脑油热裂解产生乙烯、丙烯和裂解汽油等产品的反应为强吸热反应,主反应的活化能高于副反应,非目的产品由串联副反应生成。根据这些特性,反应器的型式选管式反应器,反应器设置于工业炉中,高温烟道气通过辐射和对流将热量传给反应管内的物料,该反应器就称为管式裂解炉。

由于主反应的活化能大于副反应的活化能,因此要求反应物进入反应器能迅速升温,在反应完成后迅速降温以降低串联副反应产物的生成量。为了满足这种温度控制要求,在反应前期传递热量的速度必须大于反应中期,反应中期大于后期,传热系数在管式裂解炉内各点变化很少,因此,可以改变热量传递量的方法只有改变单位反应体积的传热面,在反应前期采用数根小直径的反应管并联,然后逐步放大管径,减少并联的根数,降低单位体积反应物

的吸热量。Lummus 公司的 SRT II 型炉的反应管排列方式如图3-8(D)所示,即图3-8(D)的结构。

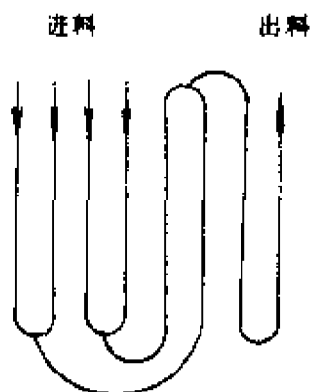


图3-9 SRT- II 型裂解炉

以上讨论的情况都属于各反应器从运转一开始就全部投入使用,但是对于一些有串联副反应的催化反应,各反应器同时投入使用并不能达到最佳的工况,现还是以苯乙基化反应为例进行说明。

苯乙基化反应器设计的目标是:

(1)反应物乙烯的转化率大于99%。

(2)降低串联副产物甲基芳烃(甲苯和二甲苯)的收率,使主产品乙苯的选择性大于99%。

(3)反应器的操作周期大于45天。

工艺条件试验证明:若反应器进口物料温度在 $370 \pm 10^\circ\text{C}$,出口温度 $410 \pm 10^\circ\text{C}$,总苯烯比大于7.0,各反应段的苯烯比大于20,乙烯重时空速不小于1时,乙苯选择性能大于99%,但操作周期低于30天。

延长固定床反应器的操作周期通常采用两种方法:

(1)随着催化剂失活,逐步提高反应温度。

(2)增加催化剂的用量,降低空速。

由于苯气相乙基化反应主反应的表观活化能较小,提高反应温度对延长操作周期作用不大。根据计算,当反应温度从 350°C 提高到 450°C 时,反应速率常数的增加还不到一倍。另外,因为生成甲

基芳烃的副反应活化能大于主反应活化能,提高反应温度还会导致选择性的下降。

增加催化剂的用量当然可以延长操作周期,但苯气相乙基化过程若一开始就把所有催化剂都投入使用是有明显缺陷的。根据模拟计算,当乙烯重时空速为1,反应压力为1.7MPa 时,乙烯转化率达到99%所需的新鲜催化剂量只有装填量的1/10,也即在反应器开始使用时,90%的催化剂对主反应并无贡献,却已受到苯、乙苯、二乙苯等的作用而逐步丧失活性。不仅如此,由于生成甲基芳烃的副反应为串联副反应,反应初期这部分多余的催化剂将使选择性降低。催化剂床层的失活的情况如下:反应器进口处乙烯浓度最高,所以乙烯引起的失活最严重,随着乙烯逐渐消耗,乙烯引起的失活逐渐减弱。由于反应器中苯大大过量,在反应分离系统达到稳定操作后,反应器进出口二乙苯浓度基本相等,所以苯和二乙苯引起的失活在整个床层中是均匀的;乙苯在反应过程中逐渐生成,乙苯引起的失活逐渐增强。前文已说明,乙烯对催化剂失活的影响比芳烃要大得多,故上层催化剂的失活速度大于下层,在反应过程中严重失活的区域将逐渐扩大下延,用于主反应的催化剂层也将逐渐扩大下延。芳烃引起的失活虽然比乙烯慢,但其积累效应仍不能忽略。模拟计算表明,在乙烯重时空速为1.3,反应压力为1.7MPa 的操作条件下,当反应器出口处的催化剂开始接触乙烯,对主反应作出贡献时,其活性已下降为初始活性的25%左右。

为减轻操作初期多余催化剂对选择性的不利影响和活性的丧失,合理的解决方法是在操作初期催化剂活性高时用较少的催化剂,在操作后期催化剂活性衰退时增加催化剂用量,即采用改变催化剂用量的方法。对于固定床反应器,最简单增加催化剂用量的方法是增加催化剂床层高度,这种反应器称为可变床层高度反应器⁹¹,结构示意图图3-10。可变床层高度反应器由两种床层组成,床层A 为一开始就投入使用的反应床层,床层B 为A 床层失活后,反应器不能达到规定的转化率时需要投入的备用床层。床层A 和B 可以是单段或多段,可以设置在同一个反应器内,也可以设

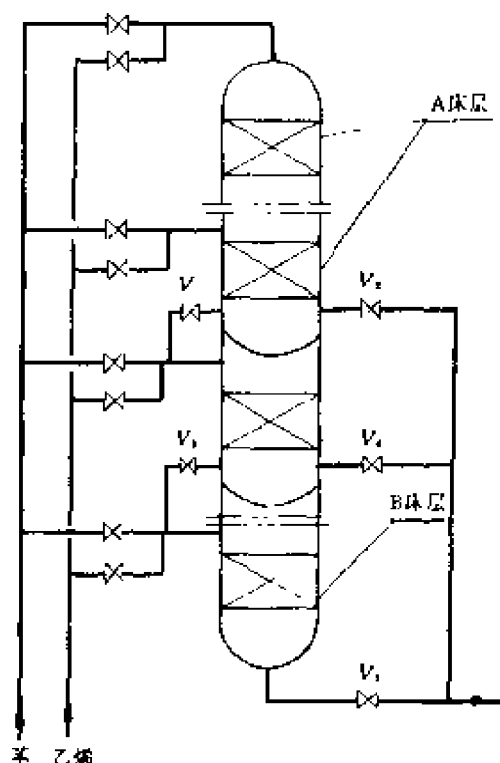


图3-10 可变床层高度反应器结构示意图

置在两个或多个反应器内。每个 B 床层投入使用只需启闭两个阀门即告完成,操作十分方便。到各个 B 床层都投入使用而尚不能达到规定的转化率时即需切换再生。这种变床层高度的构思是否正确,要经过检验。

(1)利用通过实验测定和参数估值建立的催化剂失活动力学模型,对常规固定床反应器和变床层高度固定床反应器分别进行模拟计算和分析。两种反应器的结构尺寸和工艺条件如下:

反应器结构尺寸:

常规固定床反应器		$4 \times 600\text{mm}$
可变床层高度反应器	A 床层	$4 \times 400\text{mm}$
	B 床层	$2 \times 400\text{mm}$

工艺条件:

空速 $2\text{kgC}_2/\text{kg}$ 催化剂

进口温度	370~380℃
压力	1.7MPa
苯烯比	20

两种反应器的计算结果表示在图3-11、图3-12和表3-4中。图3-11为两种反应器转化率随操作时间的变化。由图3-11和表3-4可见,常规固定床反应器转化率下降到99%的操作周期为35天,而变床层高度固定床反应器4段 A 床层转化率大于99%的操作周期为19天,接上 B₁床层后操作周期延长了25天,再接上 B₂床层操作周期又延长了25天,即在乙烯重时空速和最终催化剂用量相同的条件下,变床层高度固定床反应器的操作周期比常规固定床反应器增加了一倍。

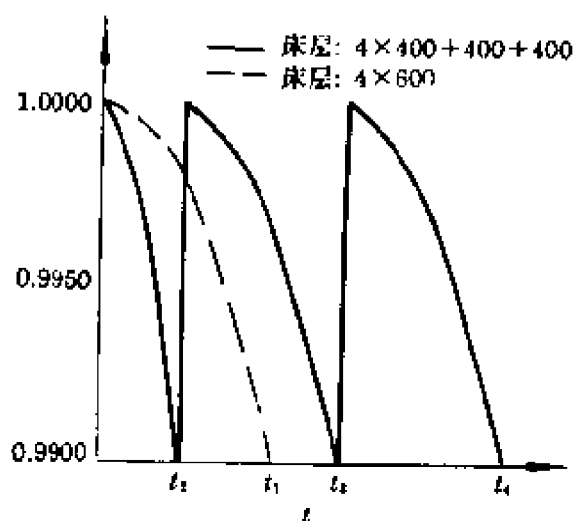


图3-11^① 出口转化率与操作时间的关系

图3-12为反应器出口甲基芳烃选择性随操作时间的变化。由图可见,在 t_2 以前变床层高度固定床反应器的甲基芳烃选择性始终低于常规固定床反应器,到 t_2 时由于增加了新鲜催化剂,甲基芳烃选择性有所上升,略为超过相同操作时间的常规固定床反应器,随着新鲜催化剂的失活,甲基芳烃选择性又逐渐下降。从整个操作周期来看,变床层高度固定床反应器的甲基芳烃选择性低于常规

固定床反应器。

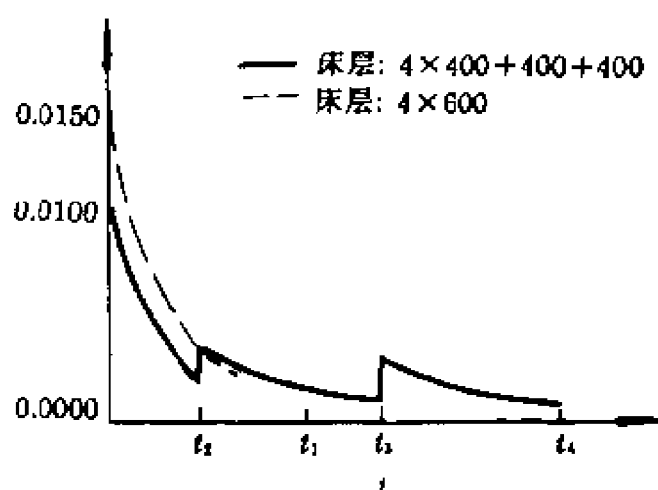


图3-12^① 出口甲苯、二甲苯选择性与操作时间的关系

表3-4 两种反应器操作周期和甲基芳烃选择性的比较

	常规固定床	可变床层高度反应器		
		A 床层	(A+B ₁)床层	(A+B ₁ +B ₂)床层
操作周期,天	35	19	19+25	19+25+25
初期甲基芳烃选择性, %	1.53	1.19	0.38	0.37
二天后甲基芳烃选择性, %	0.69	0.46	0.32	0.20
十天后甲基芳烃选择性, %	0.30	0.18	0.22	0.18
最终甲基芳烃选择性, %	0.19	0.16	0.11	0.09

(2)建立中试装置,检验数学模型的可靠性和精度。

中试装置的规模为300吨乙苯/年,中试反应器内径为100mm,共有六段床层。上面四段床层为并串联,每段装高度为400mm,重2.14kg的催化剂,下面两段床层各装高度为350mm,重1.87kg的催化剂。操作初期仅上面四段床层投入使用,当催化剂逐渐失活,反应器出口乙烯转化率低于99%时,第五段床层投入使用。当催化剂进一步失活,第五段床层出口乙烯转化率低于99%

时,将第六段床层投入使用。当第六段床层出口乙烯转化率低于99%时,反应器停车进行再生。

在第一周期运转中尾气量和乙烯转化率的变化如图3-13所示。

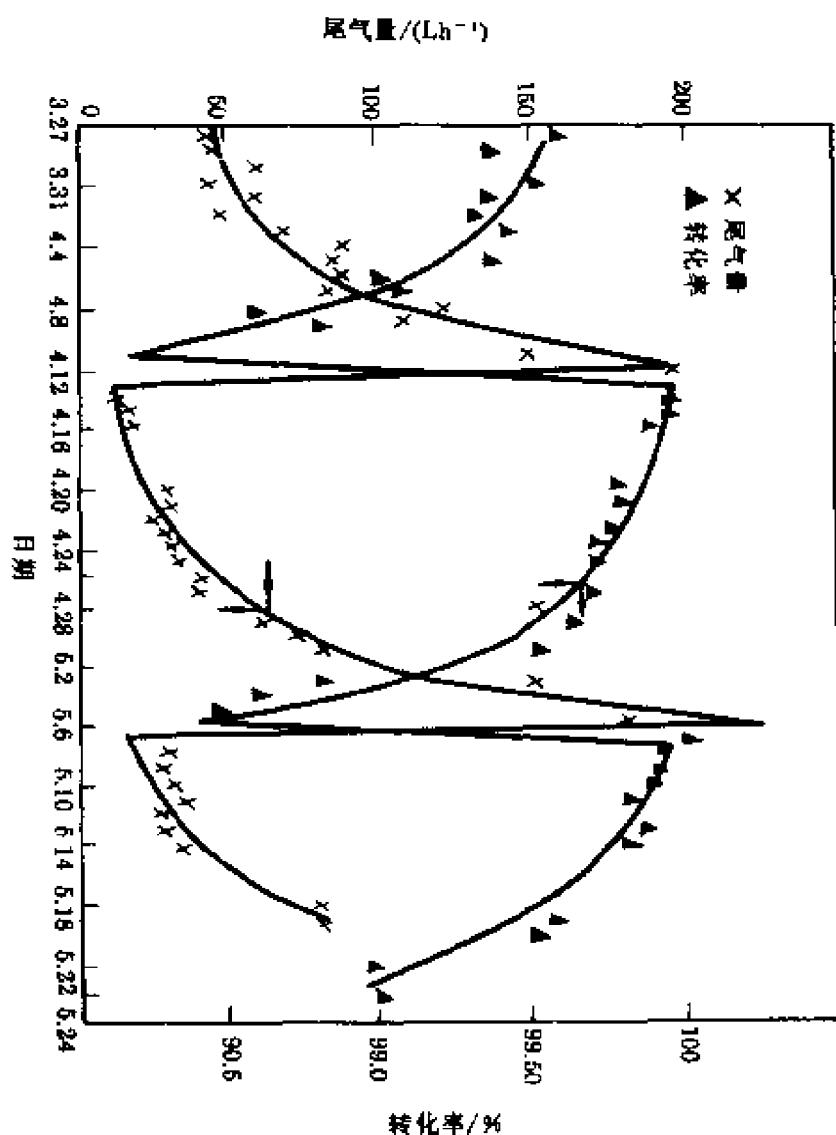


图3-13① 尾气量及转化率的变化

① 图3-11、图3-12、图3-13和表3-4引自倪进方,苯气相烷基化制乙苯技术基础研究之三,变床层高度固定床反应器的分析。

在两个整周期运转中,各段反应器出口转化率保持99%以上的操作天数和总操作周期如下:

	第一次运转	第二次运转
I ~ IV段(天)	11	10
V段(天)	21	25
VI段(天)	16	14
总操作周期(天)	48	49

由此可见,虽然各段床层运行的实际天数和模拟计算结果有些出入,但各段床层运转天数的比例和模拟计算结果是很接近的。证明变床层高度的构思对苯气相乙基化这一类反应的反应器能起到延长操作周期和提高选择性的作用。

参 考 文 献

1. 陈甘棠. 化学反应工程. 北京: 化学工业出版社, 1981
2. 陈敏恒. 袁渭康. 工业反应过程的开发方法. 北京: 化学工业出版社, 1985
3. Smith J M, Van Ness H C. Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics 3rd ed McGraw-Hill Book Company, 1975
4. Hautman R J. et al. An Overall and Detailed Kinetic Study of the Pyrolysis of Propanve. Int Jour Chem Kinit, 1981, 8: 149~172
5. Kumar P, Kunzru D. Modeling of Naphtha Pyrolysis Ind Eng Chem Proc Des Dev, 1985, 24(3): 774~782
6. Levenspiel O. Chemical Reaction Engineering. John Wiley & Sons Inc. 1972
7. Douglas J M. A Hierarchical Decision Procedure For Process Synthesis. AIChEJ, 1985, 31(3) 353~362
8. Douglas J M. Conceptual Design of Chemical Processes McGraw-Hill Book Company, 1988
9. 倪进方, 蔡光明, 朱开宏等. 可变床层高度催化反应方法及其装置. 中国发明专利 ZL 89 1 01272. 9
10. Resnick W. Process Analysis and Design for Chemical Engineers. McGraw-Hill Book Company, 1981
11. Dodge B F. chemical Engineering Thermodynamics McGraw-Hill Book Company, 1944

第 4 章 换热过程

4.1 问题的提出^[4]

考虑一个化工系统,具有 N_h 股物流需要冷却(这些物流称为热流), N_c 股物流需要加热(这些物流称为冷流)。各股物流的热容流率 W (流量 F 与比热容 C_p 的乘积)和温度均已知,现需合成一个由热交换器、辅助加热器和辅助冷却器构成的换热器网络,使各股物流达到规定的温度,而总费用最小。这里的热交换器仅指系统物流之间进行热量交换的传热设备,辅助加热器是指利用公用工程中的热媒(如蒸汽和热水等),对物流进行加热的传热设备,辅助冷却器是指利用公用工程中的冷媒对物流进行冷却的传热设备。

同一般的过程合成问题一样,换热器网络也是一个复杂的排列问题,包括热交换物流的匹配和换热次序的安排,可行的排列方案的数量比一般的过程合成问题更大。

系统物流、热媒、冷媒间进行可能的换热匹配如图 4-1 所示。

可能的匹配数 p 可用下式表示

$$p = (N_h + N_{uh}) \times (N_c + N_{uc}) - (N_{uh} \times N_{uc}) \quad (4-1)$$

式中 N_{uh} 和 N_{uc} 分别为热媒和冷媒的数量。

若构成网络的换热器数为 N ,则网络的合成问题即为从可能的 p 个换热匹配中,选出 N 个构成网络。这是一个排列问题,可能的方案数 A_p^N 为

$$A_p^N = \frac{p!}{(p-N)!} \quad (4-2)$$

网络中所用换热器数在 N_{\max} 和 N_{\min} 之间。最大换热器数 N_{\max} 等于可能匹配数 p ,若最小换热器数 N_{\min} 等于

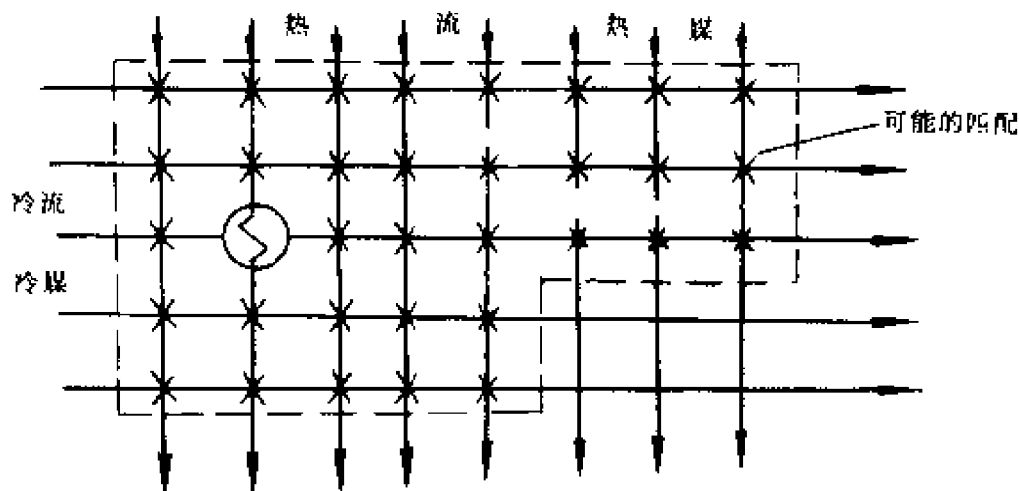


图 4-1 系统物流、热媒、冷媒间可能的匹配
(本图摘自参考文献[6])

$$N_{\min} = N_h + N_c + N_{uh} + N_{uc} - 1 \quad (4-3)$$

可能的方案的总数为:

$$\sum_{N=N_{\min}}^{N_{\max}} A_p^N = \sum_{N=N_{\min}}^{N_{\max}} \frac{p!}{(p-N)!} \quad (4-4)$$

若 N_h 和 N_c 分别为 3, N_{uh} 、 N_{uc} 分别为 1, 则

$$p = (3+1) \times (3+1) - (1 \times 1) = 15$$

$$N_{\max} = 15$$

$$N_{\min} = 3 + 3 + 1 + 1 - 1 = 7$$

在使用最少换热个数时可能的方案数为

$$A_p^N = \frac{15!}{(15-7)!} = 15 \times 14 \times 13 \times 12 \cdots \times 9 = 3243240$$

显而易见,建立指导物流换热的匹配原则,使在不过多耗费人力的条件下得到总费用最少的最优合成方案,是一个非常有意义的课题。

4.2 基本概念^{[1][7]}

在合成换热器网络的过程中,常常要用到一些基本概念以及

一些图,本节简要介绍这些基本概念。

4.2.1 T - H 图

在合成换热器网络时,需要对每一股物流的温度、焓进行考察。为了直观形象,便于理解,通常用图形来表示,现在常用的是 T - H 图。图 4-2 是热流与冷流的 T - H 图,其纵坐标表示物流的温度,横坐标是物流的焓。每一股恒热容物流的变温过程都可以用一条直线表示(包括热、冷公用工程介质)。图 4-2(A)是表示热流的一条直线,图 4-2(B)是表示冷流的一条直线。图 T^s 、 T^T 为物流的起始温度和目标温度,每条直线在横坐标上的投影的长度就是该物流的焓变,对于热流来说是放热量,对于冷流来说是吸热量。如果物流的热容不是常数,该物流在 T - H 图上可用一条曲线表示,如果物流发生相变化,它在 T - H 图上是一条水平线或其中一段是水平线。应该指出,此处的 T - H 图在热力学意义上并不很严格,它们可以作水平的随意移动而对所讨论问题的结果没有影响。

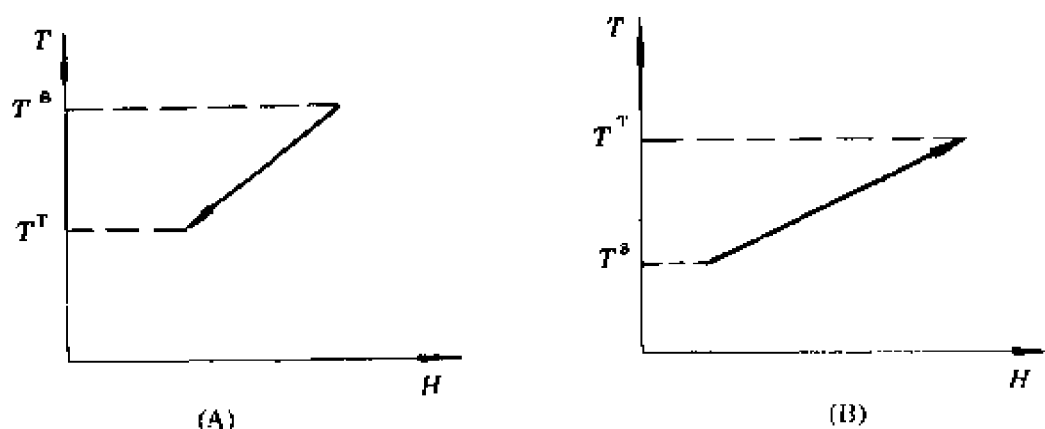


图 4-2 物流的 T - H 图

4.2.2 挟点及最小公用工程用量

冷热物流换热的极限是传热温差等于零,此时设备费用无限增大。一般情况下为了避免设备费用过大,总是规定一个最小的传热温差,用 ΔT_{\min} 来表示。对于一定的 ΔT_{\min} 而言,冷热物流间的换

热量有一极限值,当换热量达到最大时,所需的热、冷公用工程用量最小,此时的公用工程用量称为最小公用工程用量。当 ΔT_{\min} 确定之后,最小公用工程用量可以用图解法确定。图 4-3 是一股热流与一股冷流的换热情况。

图 4-3 中 Q_c 是冷公用工程用量, Q_h 是热公用工程用量, Q_e 是热交换量。当两条直线通过水平移动而靠近时,传热推动力减小, Q_e 增加, Q_c , Q_h 均减小,而换热器面积增加。当某处传热温差达到 ΔT_{\min} 时, Q_e 达到最大而 Q_h , Q_c 达到最小,图 4-4 表示了这种情况。

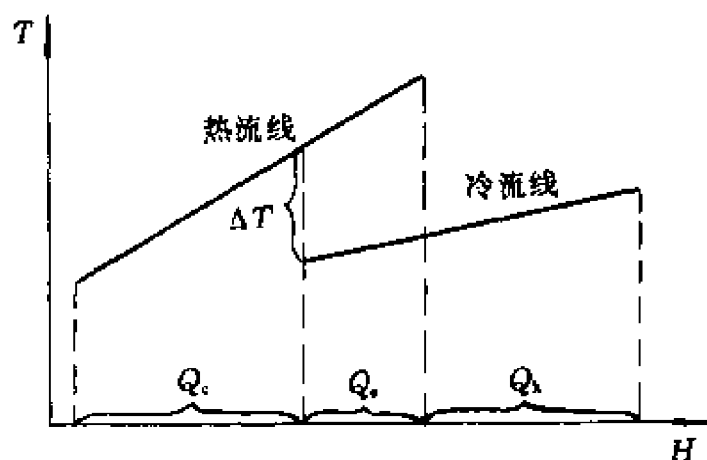


图 4-3 两股物流的换热情况

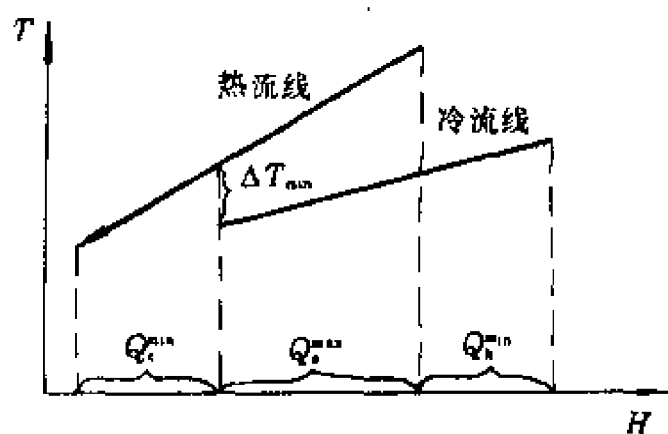


图 4-4 两股物流换热时最小公用工程用量及挟点位置

图 4-4 中 Q_c^{\min} 、 Q_h^{\min} 就是最小冷、热公用工程用量。传热温差为 ΔT_{\min} 处称为挟点, 其含义是该处的温度差限制了进一步的换热, 在挟点处的热流温度称为热端温度, 冷流温度称为冷端温度。

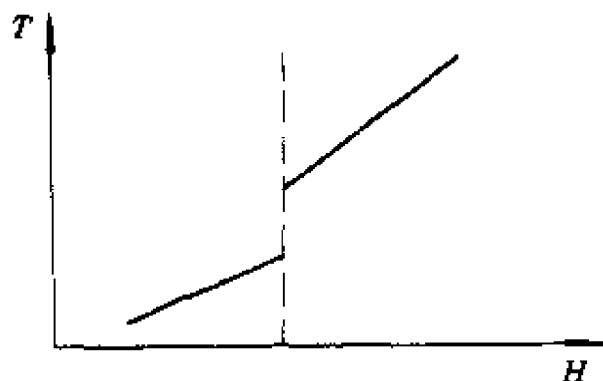


图 4-5 组合线的合成(情况 1)

对于有多股热流, 多股冷流的情况, 同样可以绘出组合的 T - H 图称为组合曲线。将两股物流的直线首尾相接, 当物流的温度区间有重叠时, 在温度区间重叠部分画两条平行线, 连接四边形的对角线, 即为两物流的组合线, 如图 4-6 所示。显然, 组合线的焓与各个物流线的焓之和是相等的。热、冷组合线确定后, 将两条组合线画在同一个图上, 使它们逐步相互靠近, 直至某处的传热温差等于 ΔT_{\min} 为止, 这时挟点位置, 热、冷公用工程用量也就随之确定了。图 4-7 是一个由组合线确定最小公用工程用量及挟点位置的例子。

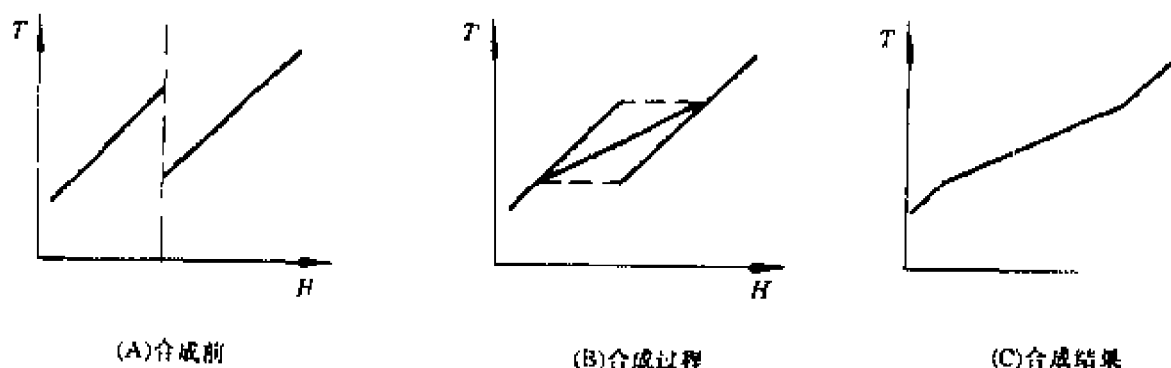


图 4-6 组合线的合成(情况 2)

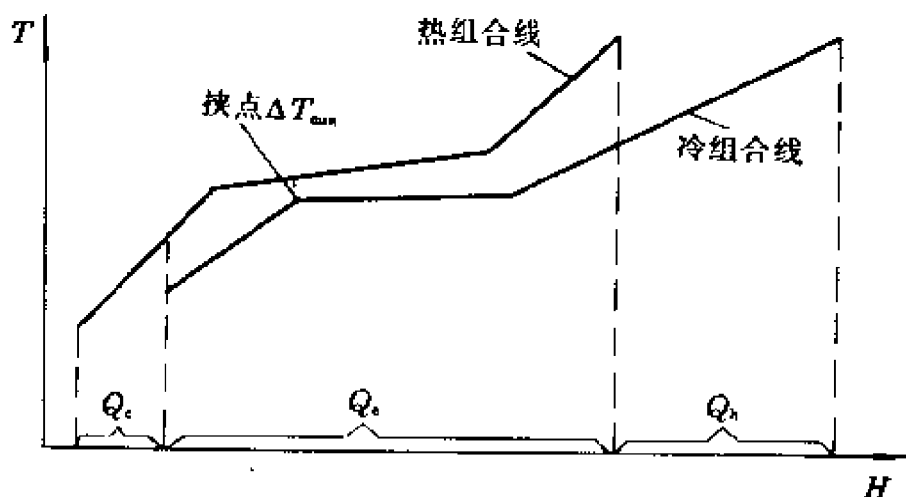


图 4-7 根据冷热组合线确定夹点和最小公用工程用量

一般来说,为了使换热网络中每股物流都达到目标温度,需要引入公用工程进行加热和冷却,这是因为热流放出的热量不太可能恰好等于冷流吸收的热量。即使热物料所放出的热量大于冷物料所要吸收的热量,由于冷、热物料传热要有一定的温差,常常使得冷流所需热量无法全部取自于热流,仍然需要热公用工程,反之亦然。当然,也有夹点不出现和只需要一种公用工程的情况,如热流的目标温度很高且焓值较大,冷流的目标温度很低且焓值较小时,夹点就不会出现。图 4-8 是两个没有夹点的例子,其中图 4-8(A)只需要冷公用工程,图 4-8(B)只需要热公用工程。没有夹点的网络合成问题称为 Threshold Problem。工业上的换热网络一般都有夹点。

在以上的讨论中,没有涉及公用工程的温度。实际上,已经假定了热公用工程具有足够高的温度,冷公用工程有足够低的温度,它们都能满足网络的任何加热和冷却的需要,即对于要解决的问题而言,采用的公用工程都是最高级的。由于不同级别的公用工程的价格是不一样的,对于相同的换热量,冷却水比冷冻剂便宜,低压蒸汽比高压蒸汽便宜。为了节约公用工程费用,希望尽量用便宜的公用工程介质,如有可能应采用不同级别的公用工程进行加热或冷却。一般情况下,引入一个新的公用工程之后网络中会产生一

一个新的挟点,这种由于引入公用工程而生产的挟点称为公用工程挟点。图 4-9 是图 4-7 引入一个新的热公用工程后产生挟点的情况。

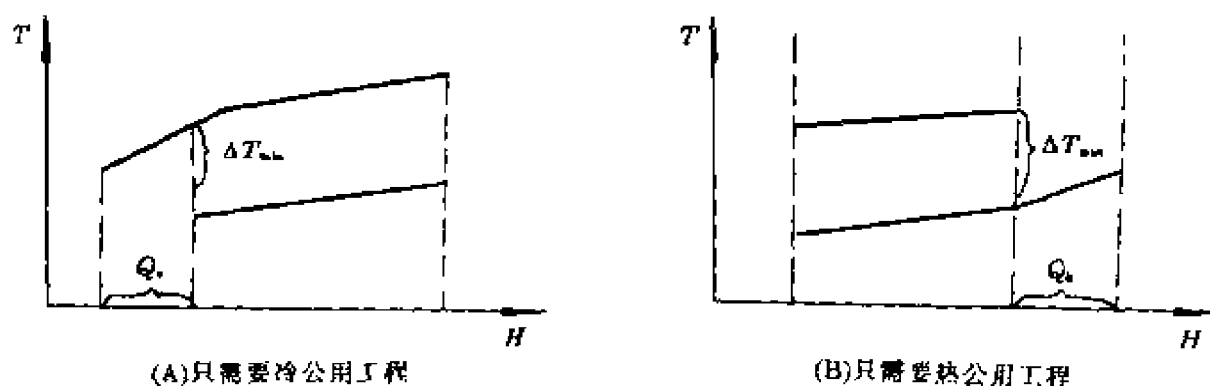


图 4-8 挟点不出现的情况

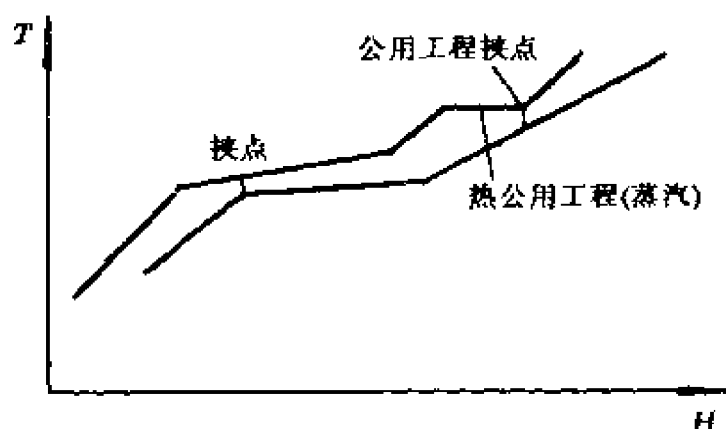


图 4-9 新公用工程的引入及公用工程挟点

4.2.3 栅格图(grid representation)

合成换热器网络首先应确定物流间的匹配,即哪一股热流和哪一股或几股冷流进行换热。为了确定合适的匹配,有必要反复对各种可能的匹配进行试差,并进行各种方案的比较。为了方便地进行这样的过程,可以将各种方案用栅格图来表示。

如图 4-10 所示的栅格图,包括物流数据和挟点位置,可以灵

活和方便地进行各种物流匹配。图 4-10 是某个网络的栅格图,网络的原始数据见表 4-1。在图 4-10 中,小方格中的数字是物流的编号,每一条水平线代表一股物流,在上面的是热流,下面的是冷流;左端是高温区,右端是低温区。小方块边上的温度是物流的起始温度,箭头边的温度是物流的目标温度。h 表示加热器,c 表示冷却器,两个由一条竖线连接的小圆圈表示是一个换热器,圆圈所在的两股物流即为进行换热的冷热物流。上面圆圈内的数字是换热器编号,下面圆圈外的数字是加热器或冷却器的热负荷,它们的单位和 C_pF 的单位相同。垂直的虚线表示挟点的位置,线旁的温度即为挟点温度,热、冷端温度相差 ΔT_{\min} 。

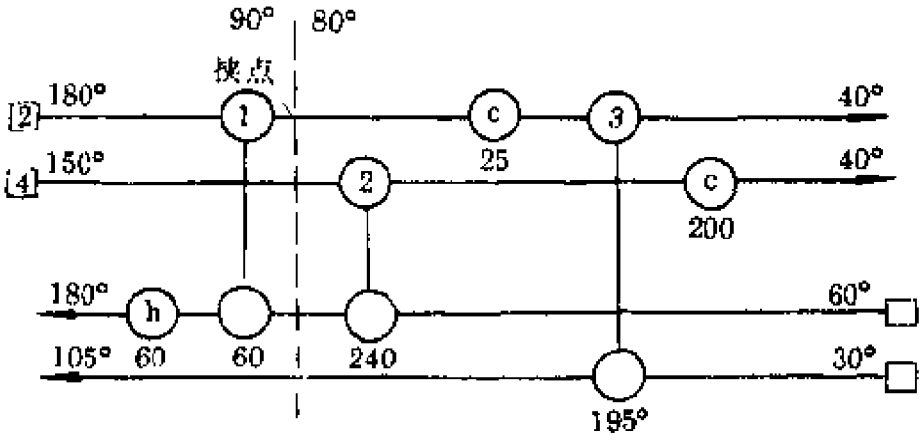


图 4-10 换热器网络的栅格图($\Delta T_{\min}=10\text{ }^{\circ}\text{C}$)

表 4-1 栅格图所示网络的原始数据

物流号码与类型	热容流率 C_pF (kW/ $^{\circ}\text{C}$)	T ($^{\circ}\text{C}$)	T ($^{\circ}\text{C}$)	热负荷 $C_pF(T-T')$ (kW)
(1) 冷	3.0	60	180	-360
(2) 热	2.0	180	40	280
(3) 冷	2.6	30	105	-195
(4) 热	4.0	150	40	440

4.3 挟点和最小公用工程用量的求取^[7]

用组合曲线和 $T-H$ 图可以形象地得到挟点位置和最小公用工程用量,但对于一个复杂的换热器网络,要得到精确的定量数据,应采用问题表格法。

问题表格法的主要思想是:将问题分成若干个子问题,即子网络,每一个子网络的热、冷物流的传换温差都大于等于 ΔT_{\min} 。对各个子网络进行热量衡算,算出每个子网络多余或亏损的热量,然后计算各个子网络的累积热量,累积热量的负值最大处即为挟点。

子网络是按温度进行划分的,每一个子网络实际上是一个温度区间,子网络的边界温度是某股物流的起始或目标温度。问题表格法将网络合成问题中每个子网络表示为表中的一格,表 4-2 是由表 4-1 数据所确定的网络的“问题表”。表中 SN(1)~SN(5)表示网络的 5 个子网络,确定一个子网络的两条横线定义了一个温度区间,以 SN(3)为例,对于其中的热流而言,它的温度区间为 $[115, 150]$,对于冷流而言,它的温度区间为 $[105, 140]$,比热流的温度区间低一个 ΔT_{\min} 值,也就是说每一条横线上的热、冷流温度相差一个 ΔT_{\min} 。每一股物流的起始或目标温度都可确定一条横线,假如两股物流端点温度正好相同,它们共同确定一条横线。在“物流与温度”一列中,带箭头的垂直线表示物流,热流从高温至低温,冷流则相反,物流线的起点与终点所在的横线的温度就是物流的起始和目标温度,物流线上面小括号中的数字即为物流的号码,物流线端点的数字为热容流率。在“温度”一列中,横线上边的数字分别表示该线的热流温度和冷流温度。“热量‘赤字’”这一列中列出了每一个子网络所需要的加热量,如为负值则表示该子网络的热量有富裕,可供下面的子网络用。各个子网络热量“赤字”可根据热量衡算求得。

假如所有物流的热容都可以作为常数,则

$$D_K = (T_{K-1} - T_K)(\sum C_P F_C - \sum C_P F_h) \quad (4-5)$$

式中 D_K — 第 K 个子网络的热量赤字;

T_{K+1} — 子网络 K 的上界温度;

T_K — 它的下界温度;

$\Sigma C_F F_c$ 、 $\Sigma C_F F_h$ — 子网络中冷、热物流热容流量之和。

表 4-2 换热网络“问题表”

子网络	物流与温度				热量 “赤字” (kW) D_K	累 积		热流量	
	热 流	温 度		冷 流		输入 I_K	输出 O_K	输入	输出
	(2) (4)	热	冷	(1) (3)					
			180	3					
SN(1)	2	180	170	↑	+30	0	-30	+60	+30
SN(2)	↓	4	150	140	↓	-30	-60	+30	0
SN(3)	↓	↓	115	105	↓	-60	+45	0	+105
SN(4)	↓	↓	70	60	↓	+15	+63	+105	+123
SN(5)	↓	↓	40	30	↓	+63	+165	+123	+225

在表 4-2 中,“累积”一列是各个子网络热量平衡的结果。“输入”这一项表示由上面的子网络流下来的热量,“输出”是由本子网络流向下面网络的热量,我们可以按下列公式计算该列的数据:

$$I_1 = 0.0 \quad (4-6)$$

$$O_K = I_K - D_K \quad (K=1 \cdots, N) \quad (4-7)$$

$$I_{K+1} = O_K \quad (K=1 \cdots, N) \quad (4-8)$$

其中 I_K 、 O_K 分别为子网络 K 的累计输入与输出,因为第一个子网络不可能有输入,所以 $I_1 = 0$ 。从上述公式所确定的计算过程来看,在累计“输出”列中,每一个负数表示“从第一个子网络到本子网络所需热公用工程之累积”,显然负数绝对值最大数值就是在一定的 ΔT_{\min} 条件下网络所需的最小热公用工程用量 Q_{\min}^h ,此时为 60kW,将该热量从 SN(1) 上面加入网络,即令 $I_1 = Q_{\min}^h$,然后重复上述计算过程,即得到“热流量”这一列。显然最下面一个子网络的“输出”就是最小冷公用工程用量,这里是 225kW。在输出列中,有

一个数值为零,表示此处的热流为零。根据前面的讨论,挟点处的热流量为零,可以断定此处即为挟点,处于横线上的热、冷流温度即为挟点热、冷端温度,挟点温度等于热、冷端的平均温度。

通过以上讨论,我们可以将问题表格法归纳为下列五个步骤:

(1)确定各个子网络的定界温度 T_0, T_1, \dots, T_n , 定界温度分别是热流和冷流的起始和目标温度。当以热流温度为定界时,以每一个子网络边界上的热流温度作为定界温度,边界上的冷流温度等于定界温度减 ΔT_{\min} ; 当以冷流温度作为基准时,边界上的冷流温度即为定界温度,相同边界上热流温度等于定界温度加上 ΔT_{\min} 。

(2)根据式(4-5),对每一个子网络进行热量衡算,确定每一个子网络的“热量赤字”。

(3)根据式(4-6)~(4-8)确定“累积”一系列中的各个数值。

(4)令 $I_1 = Q_{\text{H}}^{\text{in}}$, 用式(4-7), (4-8)确定“热流量”一系列的数值。

(5)根据“热流量”列中第一个“输入”数据确定最小热公用工程用量,最后一个“输出”数据确定最小冷公用工程用量。根据“输出”为零确定挟点的位置。

4.4 挟点特性^[3]

挟点的出现限制了热、冷物流间的进一步热量交换,同时,挟点也将换热网络分成两部分,一部分在挟点之上,另一部分在挟点之下。在挟点以上,只需要引进热公用工程,这部分实际上是一个“热阱”,在挟点之下,只需要引进冷公用工程,它是一个“热源”。为了使网络的热回收量达到在规定的 ΔT_{\min} 下的最大值,挟点以上的热流不得与挟点以下的冷流或冷公用工程进行换热,这种跨挟点换热的后果是增加公用工程和冷公用工程用量,受到双重惩罚。换言之,为了避免这种双重惩罚,在换热网络设计时,应使挟点处的热流量为零。“不跨挟越点换热”和“挟点处热流量为零”这两种说法是等义的。另外,“热阱”和“热源”也有时被称作网络的热端和冷端。

既然挟点之上都是“热阱”，将任何冷公用工程引入其中都会引起热公用工程用量的增加，导致双重惩罚，同样在“热源”中引进热公用工程也会增加冷公用工程用量，导致双重惩罚。

简言之，挟点理论得出的设计原则为：

挟点将网络分为“热阱”和“热源”，在挟点以上的“热阱”中不得使用冷公用工程，在挟点以下的“热源”中不得使用热公用工程。

4.5 最小换热器个数的确定

合成一个换热器网络时，为了使网络系统的年度生产费用最小，除了应合理减少公用工程费用外，还应考虑减少网络的设备费用。影响网络设备费用的因素主要有两个，即网络的总换热面积和换热设备个数。据研究，当网络的热回收量一定时，不同结构的换热网络的总面积相差不大。因此，换热器个数成了影响网络设备费用的关键因素。

对于同样传热面的换热网络来说，采用较少换热器显然有利于减少设备费用，我们常用下列经验公式来估计换热器的设备费用：

$$\text{Cost} = aA^b \quad (4-9)$$

式中的 A 是换热器面积， a 、 b 是经验常数， b 一般小于 1，显然有：

$$A_1^b + \dots + A_m^b \geq \left(\sum_{i=1}^m A_i \right)^b \quad (4-10)$$

因此因尽量减少换热网络中的换热器个数。

网络中换热器个数减少是有限的，在完成换热任务的前提下，网络的换热设备个数减少到不能再减少时，网络中所含有的换热设备个数称为最小换热设备个数。

为了减少换热设备个数，必须充分地每个换热设备中进行换热，理想的换热的结果是一次换热能“剔除”一股物流，即一次换热完成之后，无需再考虑被剔除物流的换热问题，它的目标温度已

经达到,式(4-3)就是在这种条件下成立的。有时这种理想的换热情况可能不符合实际,如有时一次换热可能会剔除两股物流,有时一次换热无法剔除一股物流(由于传热温差限制),所以更一般的计算公式应该是:

$$N_{mm} = N_h + N_c - N_{oh} + N_{uc} + L - S \quad (4-11)$$

式中的 L 是一次换热不能剔除一股物流的次数, S 是一次换热剔除两股物流的次数。式(4-11)可用图论理论加以证明。图论中的图由节点和连线组成,节点对应于物流和公用工程,连线对应于换热设备。路径是一系列首尾相连的连线的集合,如在图 4-11 中, AECGD 是一条路径,如果图中任意两个节点都能为一条路径所联结,则称该图是连通的。图 4-11 是连通的,图 4-12 是不连通的。更一般地看,所有通过各条路径与某一节点相联的节点称为一个“独立问题”。这样,图 4-11 只有一独立问题,图 4-12 两个独立问题。

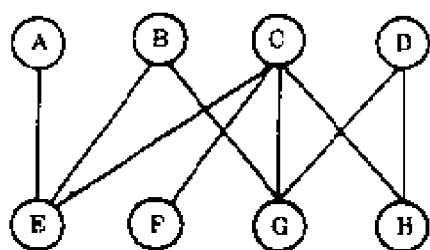


图 4-11

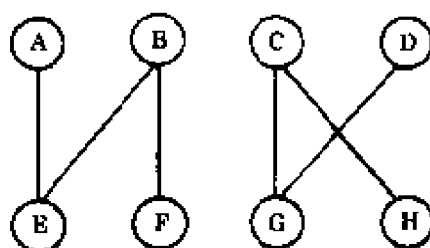


图 4-12

假如一次换热能剔除两股物流,换热网络就可分为两个独立问题,如这种情况可发生多次,换热网络就能分成更多的独立问题。若认为图 4-12 是一个换热网络,物流 B 和 F 的换热同时将这两股物流剔除,图被分成两个独立问题。

环是一条开头与结尾都在同一节点的路径,如图 4-11 中的 CGDHC。如果两个环有一条公共连线,除去那条公共连线,它们可以形成一个大环,如在图 4-11 中, BGCEB 和 CGDHC 可以形成大环 BGDHCEB。在这种情况下,大环相对于小环来说是不独立的。

图中最大独立环数称为一个图的“环秩”(cycle rank)。当两股物流换热而不能剔除其中一股时,图上就会出现一个环。图 4-13 就是出现环的例子。图中物流 B 和 D 的换热没有剔除一股物流,所以构成了一个环,即 BDCEB。显然,在这里“环秩”应等于 L 。根据图论理论,有

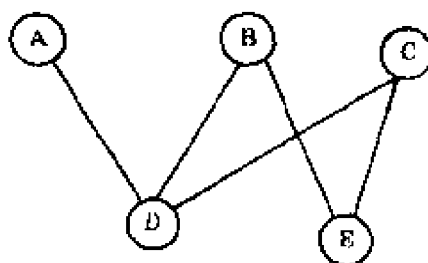


图 4-13 出现环的情况

$$L = q - p + k \quad (4-12)$$

式中 k 是独立的部分数, q 是连线数。 p 是节点数。显然, $k = S$, $p = N_h + N_c + N_{uh} + N_{uc}$, $q = N_{mh}$, 将式 (4-12) 作变换即可得到式 (4-11)。

4.6 换热网络的合成^{[3][6]}

合成换热网络可以分为两大步, 第一步合成一个公用工程用量最小且满足在此条件下换热器个数尽可能少的初始网络, 第二步是对初始网络进行调优。

在换热网络合成中, 需要考虑各种物流匹配, 在挟点处物流匹配受到的限制最多, 因此首先考虑挟点处的物流匹配, 即合成过程是从挟点开始, 然后向两端发展。

在挟点处进行物料的匹配时要遵守下列原则:

(1) 挟点将网络分为热端和冷端。对于热端来说, 热流只能用冷流, 而不能用冷公用工程来冷却。为了使挟点处的所有热流都能被冷却至挟点温度, 在挟点处必须有足够的冷流, 即应有:

$$N_h \leq N_c \quad (4-13)$$

以上不等式是网络匹配可行性的一个判据。假如上式不成立, 可将挟点处冷流进行分流, 直至上式满足为止。对于冷端来说, 情况正好相反, 挟点处的冷流必须被该处的热流加热至挟点温度, 故下式

成立：

$$N_h \geq N_c \quad (4-14)$$

如不成立，则应考虑将挟点处的热流进行分流。

(2)在挟点处，除了考虑物流股数的合理性外，还应考虑两股匹配物流的热容是否合适。图 4-14 是热端两股物流换热的情况，图 4-15 是冷端两股物流换热的情况。对于热端，由于挟点处的传热温差已经达到 ΔT_{\min} ，如果热流的热容大于冷流的热容，即 $(C_p F)_h > (C_p F)_c$ ，必然造成高温端的温差小于 ΔT_{\min} ，这是不允许的，因此必须使

$$(C_p F)_h \leq (C_p F)_c \quad (4-15)$$

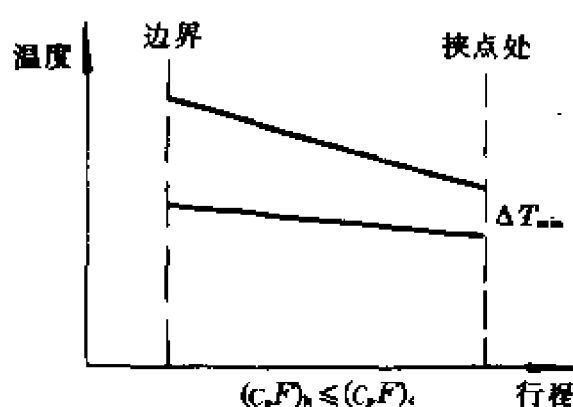


图 4-14 热端换热情况

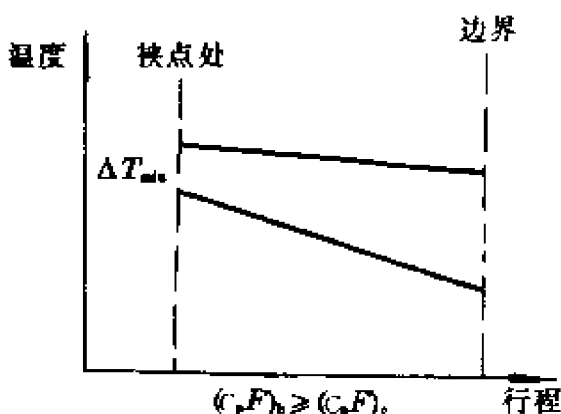


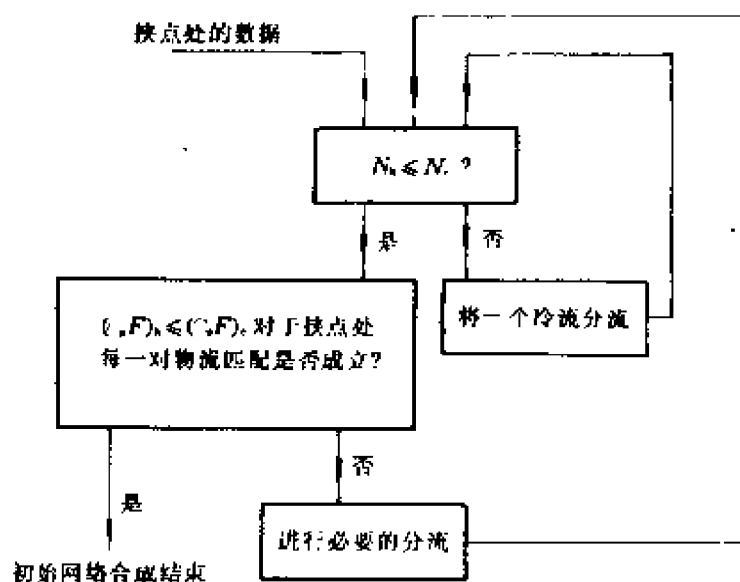
图 4-15 冷端换热情况

(图 4-14、图 4-15 摘自参考文献[3])

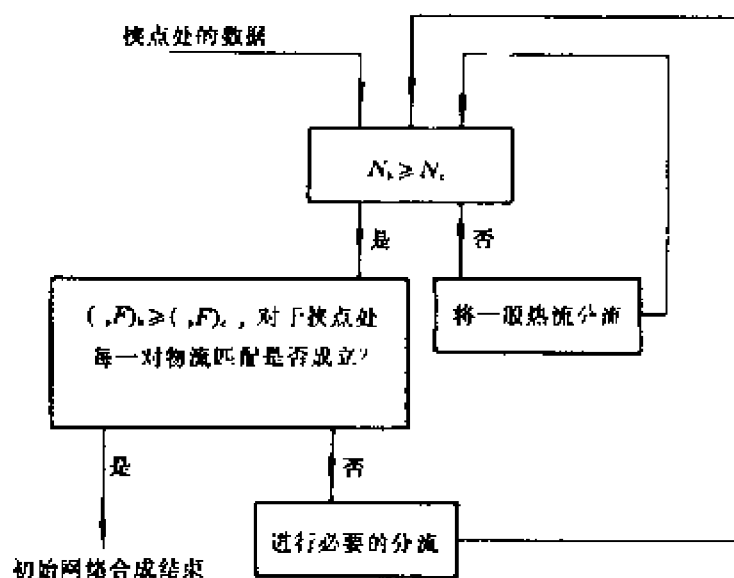
这是热端挟点处两股物流匹配的必要条件。同理，对于冷端来说，不违反 ΔT_{\min} 规定的必要条件是：

$$(C_p F)_h \geq (C_p F)_c \quad (4-16)$$

根据以上的讨论，初始网络的热端和冷端的合成可按图 4-16 所示的步骤进行。合成后的冷、热端合并在一起即构成整个网络的初始设计。



(A) 热端初始网络的合成步骤



(B) 冷端初始网络的合成步骤

图 4-16 热端与冷端初始网络的合成步骤

(本图摘自参考文献[3])

例 4-1^① 现有四股待换热物料,其原始数据见表 4-3,试合成它的初始换热网络。最小传热温差 $\Delta T_{\min}=20^{\circ}\text{C}$ 。

表 4-3 例 4-1 的原始数据

物流号码及类型	热容流率(C, F)(kW/°C)	$T^{\circ}(\text{C})$	$T^{\circ}(\text{C})$
(1)热	2.0	150	60
(2)热	8.0	90	60
(3)冷	2.5	20	125
(4)冷	3.0	25	100

解:用问题表格法确定网络的挟点及最小公用工程用量,结果见表 4-4。

表 4-4 例 4-1 的问题表

子 网 络	物流与温度				热量 “赤字” (kW)	累 积		热流量	
	热 流	温 度		冷 流		输入	输出	输入	输出
	(1) (2)	热	冷	(3) (4)					
	2	150							
SN(1)	↓	145	125	2.5	-10	0	10	107.5	117.5
SN(2)	↓	120	100	↑ 3	12.5	10	-2.5	117.5	105
SN(3)	↓ 8	90	70	↑	105	-2.5	-107.5	105	0
SN(4)	↓ ↓	60	40	↑	-135	-107.5	27.5	0	135
SN(5)			25	↑	82.5	27.5	-55	135	52.5
SN(6)			20	↑	12.5	-55	-67.5	52.5	40

从表 4-4 可以得到挟点的热端温度为 90°C ,冷端温度 70°C ,最小热公用工程用量为 107.5kW ,最小冷公用工程用量为 40kW 。另外为了直观起见,我们将这些物流画在栅格图上。见图(4-17)

^① 例 4-1 内容引自参考文献[3],包括其中的图和表格。

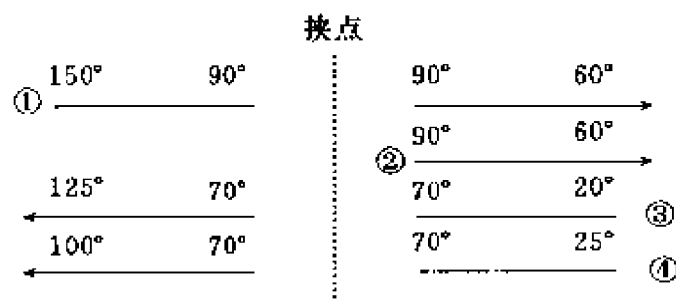


图4-17 例4-1的栅格图

4.6.1 热端的合成

在网络的热端,式(4-13)和式(4-15)显然是成立的,这里有两种可能的选择,即将热流(1)与冷流(3)或冷流(4)换热,我们用 C_p 图来表示这样的选择。图4-18是例4.1热端的 C_p 图。其中图(A)是没有作选择时的情况,称为空白 C_p 图。图(B)和图(C)是作了选择后的情况,图中的数字是各股物流 $C_p F$ 值。它们代表相应的物流。在工业的换热网络设计中,应根据过程需要或特点选取两者之一。对于本例而言,由于它们的换热器个数相同,两种匹配都被认为是有效的,都可以作为初始网络的方案供下一步调优用。两种方案表示在图4-19的(A)、(B)中。

4.6.2 冷端的合成

我们首先利用 C_p 表来考察在不进行分流的情况下网络合成的可能性。

图4-20列出了冷端的空 C_p 表以及两种不分流情况下的匹配方案,显然,这两种方案都是不可行的,因为不能使每一个匹配都满足式(4-16),因此需要考虑分流。

应该分流的物流是热流(2),对它的分流有两种方案,如图4-21所示。根据方案(A)可以得到两种冷端设计方案,它们列于图4-22中,图中带号码的圆圈是夹点处的换热器。请注意物流每一个分支的 $C_p F$ 必须满足:

$$(C_p F)_k \geq \frac{\text{匹配物流的热负荷}}{\text{被分流物流的温度最大变化范围}} \quad (4-17)$$

当式(4-17)左右两端的数值相等时,一次换热能剔除两股物流而使换热器个数最少。

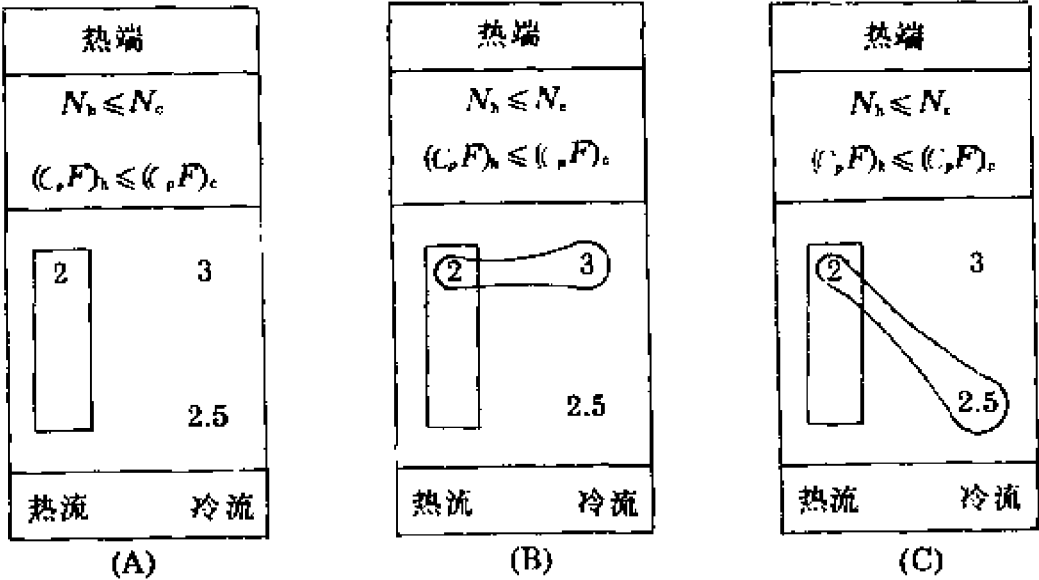


图 4-18 (A)物流的 C_p ; (B)物流(1)与(4)的匹配;
(C)物流(1)与(3)的匹配
(本图摘自参考文献[3])

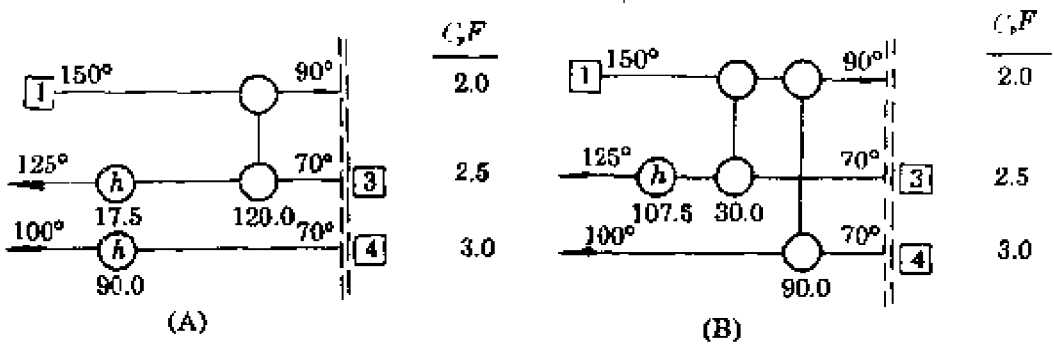


图 4-19 热端合成的两种方案

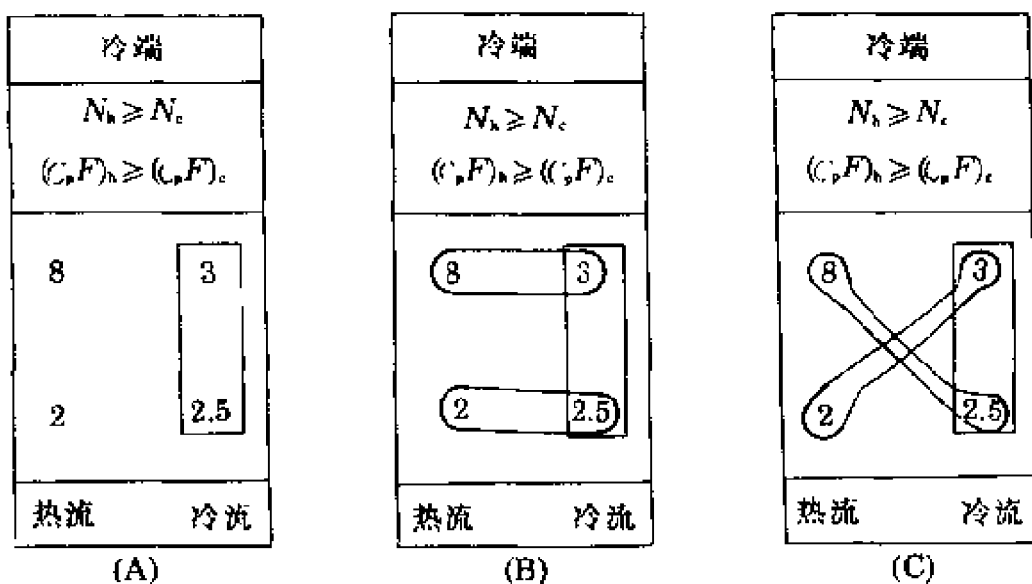


图 4-20 不分流条件下的匹配方案
(本图引自参考文献[3].)

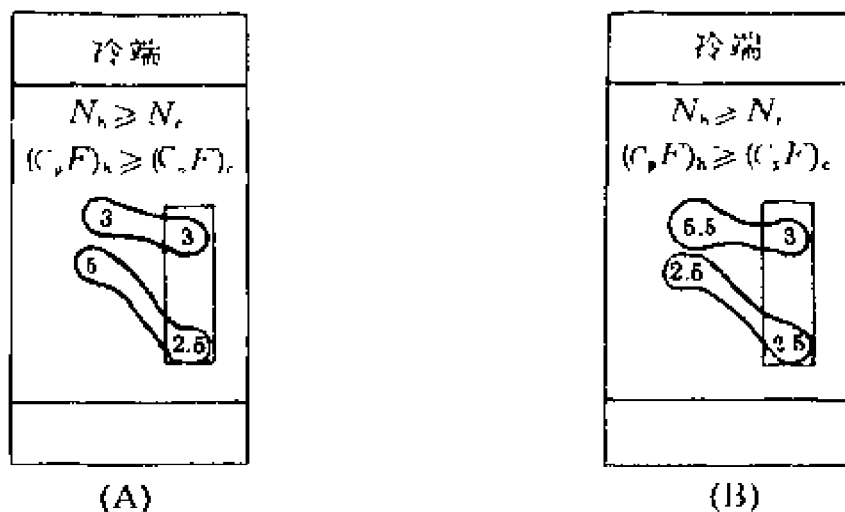


图 4-21 物流(2)分流的两种方案
(本图引自参考文献[3].)

4.6.3 初始网络的合成

前面我们已经得到热端和冷端的各种设计方案,任取一个热端方案与一个冷端方案进行组合,即可得一个初始网络。因此共有四个初始网络,图 4-23 是其中的一个,它由图 4-19(A)与图 4-22(A)组成而成,这样得到的初始网络可供以后调优用。

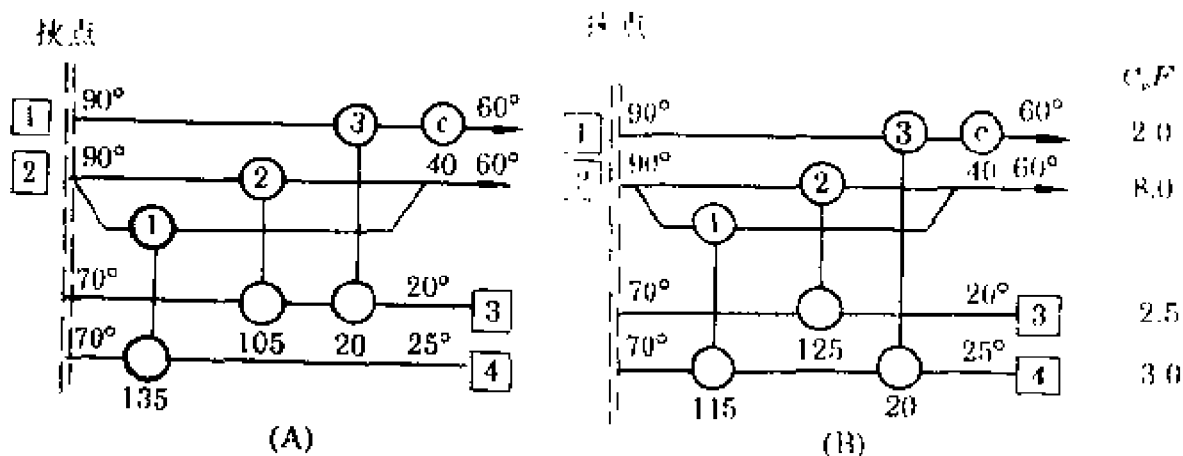


图 4-22 两种冷端合成方案
(本图引自参考文献[3].)

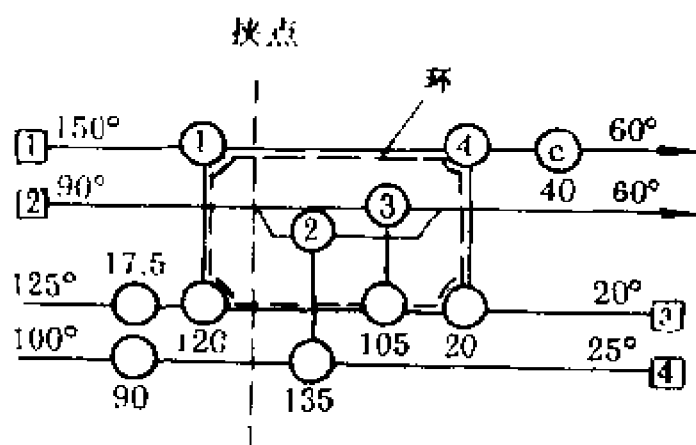


图 4-23 例 4-1 的一个初始网络

4.6.4 初始网络的调优

网络调优的重要任务是减少换热器个数,减少换热器是通过合并换热器或将被去掉的换热器的热负荷转移到其他换热器上来实现的。由于初始网络是满足公用工程用量最少的网络,减少换热器往往会使公用工程用量增加,或者使某些换热匹配违反 ΔT_{\min} 规定。在调优过程中,我们需要不断根据网络的实际情况,在减少换热器带来的好处与由此付出的代价之间作权衡。

减少换热器的一个简单办法是,直接通过增加加热器与冷却器的热负荷来除去换热器。如在图 4-23 中,将加热器(原来热负荷为 17.5kW)和冷却器(原有热负荷 40kW)分别增加 20kW,即可去除换热器④,但付出的代价显然太大。实际可行的方法是利用环和路径的概念来减少换热器的工作。

当网络中的换热器个数超过物流数减 1 时,网络中就必然存在热环(Loop),并且每超过一个,就多一个环。图 4-23 中虚线部分就是热环。热环有一个特点,即在热环上的换热器的热负荷可以在环上相互转移,而对其他换热器没有影响。利用这个特点,我们将环上某换热器的热负荷全部转移到环上其他换热器上去,从而将其除去。如图 4-23 中,换热器①和④构成一个环,我们将④的热负荷全部移至①上后,网络情况如图 4-24 所示。在图 4-24 中,换热器①的负荷增加了 20kW,它的传热温差因此而减少,以致于 T_2 和 T_1 的温差小于 $\Delta T_{\min}(=20^{\circ}\text{C})$ 。为了使换热器①中的温度差不小于 ΔT_{\min} ,我们需要使用热负荷路径来恢复它的传热推动力。

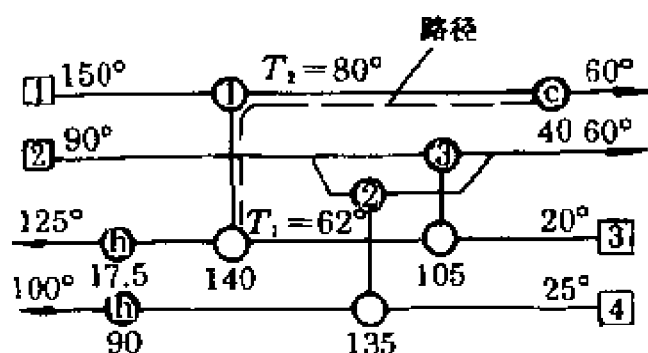


图 4-24 除去④后的网络

热负荷路径是由一个加热器,一个冷却器以及在它们中间的一系列连续连接的换热器所组成,图 4-25 中的虚线即标明了一条路径。热负荷路径也有一个特点,即路径上的换热器的热负荷也是可以相互转移的。图 4-25 显示了这种热负荷转移情况。通过计算,将换热器①中的最小传热温差恢复至 20°C 所需转移的热负荷 x 为 4kW,热冷公用工程用量因此都增加 4kW。和前面所说的简单方法相比,所增加的公用工程用量大为减少了。以增加 4kW 的公

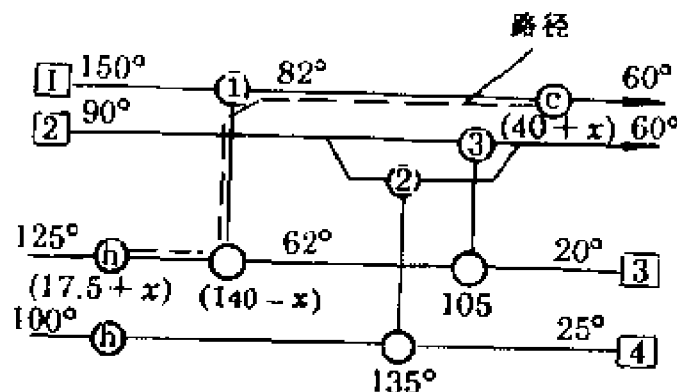


图 4-25 利用热负荷路径转移电负荷的情况

用工程为代价减少一个换热器,应该说是值得的。另外的方案是不增加公用工程用量,但此时换热器①中的最小传热温差减少为 18°C ,这虽然违反了 ΔT_{\min} 的规定,但是在热力学上还是可行的,其结果是使换热器①的面积有所增大。至于这两种方案到底哪一种好,作一简单计算即可有定论,此处不再赘述。由于现在网络中换热器的个数已经达到最小,网络的调优到此结束,通过对四个初始网络的调优,可以选出一个或几个费用最小的网络。

4.6.5 ΔT_{\min} 的选择

在以上的讨论中, ΔT_{\min} 在网络合成之前就作了规定,在合成过程中它是一个常数,实际上 ΔT_{\min} 是个有待优化的决策变量,图 4-26 显示了 ΔT_{\min} 对网络各项费用的影响。在图中,公用工程费用随 ΔT_{\min} 的增加而直线增加,当 $\Delta T_{\min}=0$ 时,其值降至最少。随着 ΔT_{\min} 的增加,设备费用开始下降较快,随后变得较为平稳。当 ΔT_{\min} 增加太多时,设备费用反而增加。作为公用工程与设备费用之和的总费用,是一个上凹形曲线,它存在总费用最小的 ΔT_{\min} 点。为了找到这一点,有必要进行试差。这样做的工作量是很大的。因为每试一个 ΔT_{\min} 值都必须合成一次换热网络。当然,也有一些研究者提出了各种简化的方法。

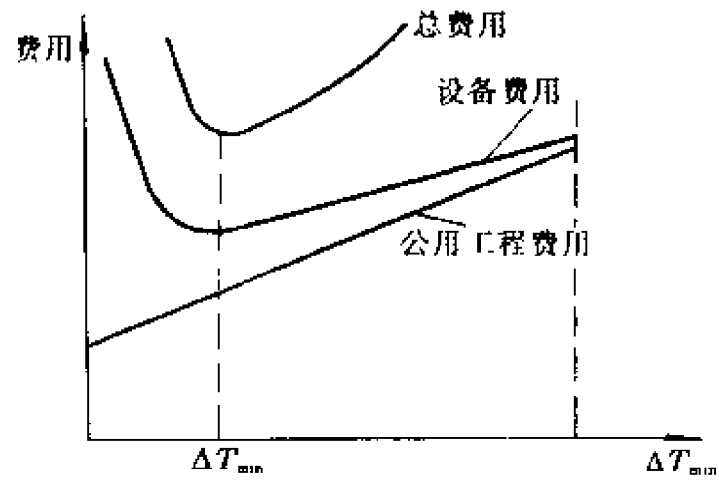


图 4-26 ΔT_{\min} 对网络各种费用的影响

参 考 文 献

1. Linnhoff B. User Guide On Process Integration for Efficient Use Of Energy. I. Chem E. England. 1981.
2. Linnhoff B. ,Tarner J A. Heat Recovery Networks: New Insight Yield Big Savings. Chem Eng, 1981, 88(Nov 2): 56~70
3. Linnhoff B, Hindermarsh E. The Pinch Design Method For Heat Exchanger Networks. Chem Eng Sci, 1983, 38(5) 745~763
4. 张瑞生, 沈才大. 化工系统工程基础. 上海: 华东化工学院出版社, 1991
5. 杨友麒. 实用化工系统工程. 北京: 化学工业出版社, 1989
6. Flower J R, Linnhoff B. A Thermodynamic Combinatorial Approach to The Design Of Optimum Heat Exchanger Networks. AIChE J, 1980, 26(1): 1~18
7. Linnhoff B, Flower J R. Synthesis of Heat Exchanger Networks. AIChE J 1978, (24): 633

第5章 分离过程

分离是指将一混合物分成纯物质或者组成不同的几股物料，它是化工生产中不可缺少的重要单元过程。

化工中常用的分离过程基本上可分为三大类：

第一类是以能量为分离剂，例如精馏、蒸发、结晶、干燥、闪蒸等。

第二类是以物质为分离剂，例如解吸、吸收、萃取、吸附、浸取，离子交换等。

第三类是利用物质的密度、粒度、表面等性质不同而进行的机械分离过程，例如沉降，离心分离，旋风分离，过滤，浮选等过程。

全面介绍各种分离过程的原理是分离工程的任务，本章的重点是介绍分离过程中应用最广泛的精馏过程的流程合成和工艺参数选择的方法，以及怎样应用热力学的基本概念去降低精馏的能耗。

5.1 分离过程的热力学效率^[1]

物质的混合是一个不可逆过程，能够自发地完成。因此，其逆过程分离必然要消耗一定的能量才能进行。这个能量在大多数情况下是热，有时是功，有时是同时加入热和功。分离过程设计的目标是在满足产品质量和回收率的前提下减少能量的消耗。了解分离所需的最小功（分离过程的理想功）以及能量消耗的大小和哪些因素有关，常有助于人们产生一种新的构思去改进过程，降低能量的消耗。

5.1.1 最小分离功

要计算分离的最小功,可以假设一系列可逆过程,计算其中每一过程所需要的功,并相加即可得到分离所需要的最小功。实际过程是不可逆过程,因此所需的功必然大于可逆过程所需的功,分离的最小功是分离过程所需能量的最低极限。下面分三种情况叙述:

(1)当产品和进料的温度、压力相等时所需的分离最小功为

$$W_{\min,T} = -RT \sum_j x_{j,f} \ln(\gamma_{j,f} \cdot x_{j,f}) \quad (5-1)$$

式中 $x_{j,f}$ ——进料中 j 组分的分子分率;

$\gamma_{j,f}$ ——进料中 j 组分的活度系数。

对于理想气体混合物或理想溶液,活度系数 γ_j 等于 1,式(5-1)式成为:

$$W_{\min,T} = -RT \sum_j x_{j,f} \ln x_{j,f} \quad (5-2)$$

如果分离产品不是纯组分,则该过程的最小分离功等于原料分离成纯组分的最小分离功减去产品分离成纯组分所需要的最小分离功,即:

$$W_{\min,T} = -RT \left\{ \sum_j x_{j,f} \ln(\gamma_{j,f} \cdot x_{j,f}) - \sum_i \varphi_i \sum_j x_{j,i} \ln(\gamma_{j,i} \cdot x_{j,i}) \right\} \quad (5-3)$$

式中 φ_i ——产品 i 占原料的分子分率;

$x_{j,i}$ ——产品 i 中组分 j 的分子分率;

$\gamma_{j,i}$ ——产品 i 中组分 j 的活度系数。

由此可见,产品的纯度越低,所需的最小分离功愈小,图(5-1)中的实线表示产品为纯组分时的最小分离功,虚线表示 $x_{A1} = 0.80, x_{A2} = 0.22$ 时的最小分离功。

(2)如果产品的压力和进料不相同,则 $W_{\min,T}$ 尚需加进 $\int V dp$ 的修正项,对于理想气体, $V = RT/p$, 故

$$W_{\min,T} = W_{\min,T,p} + RT \cdot \ln \frac{p_2}{p_1} \quad (5-4)$$

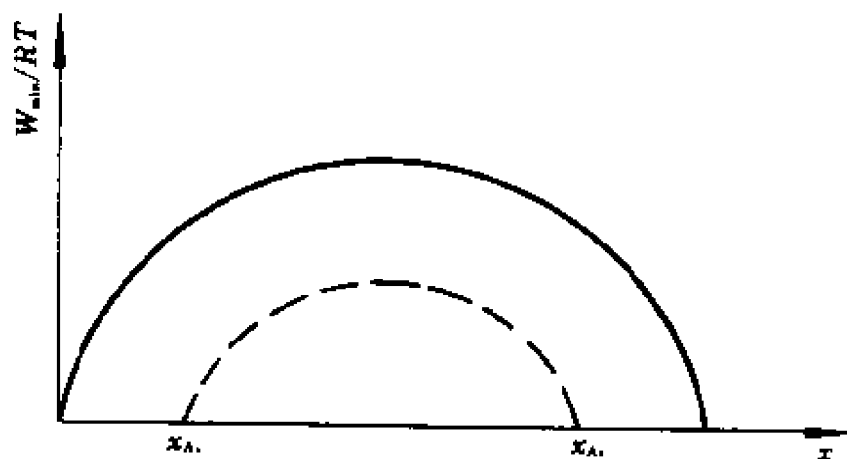


图 5-1 理想双组分溶液的最小分离功

(本图引自参考文献[1])

(3)当产品温度和进料温度不同时,可用产品与进料有效能的差别计算最小分离功。有效能,也称作㊦,是这样定义的:

$$E_x = H - T_0 S \quad (5-5)$$

式中 E_x, H, S 分别为㊦,焓,熵。 T_0 指环境温度。

$$\Delta E_x = \Delta H - T_0 \Delta S \quad (5-6)$$

由式(5-5)、(5-6)可以看出,㊦是指一定状态的物质转变到某指定状态时所作的最小有用功,㊦的减少表示可用于做有用功的潜在的有效的能量减少。 $T_0 \Delta S$ 这一项表示了不能作有用功的能量。㊦增加,表示了外界必须向系统提供的功的数量。

对于理想气体混合物:

$$\Delta H = \sum_j x_{j,f} \int_{T_f}^{T_j} C_{p,j} dT \quad (5-7)$$

$$\Delta S = \sum_j x_{j,f} \int_{T_f}^{T_j} \frac{C_{p,j}}{T} dT - R \ln \frac{p_j}{x_{j,f} p_f} \quad (5-8)$$

式中 $C_{p,j}$ ——各组分的热容;

T_f, p_f ——进料温度、压力;

T_j, p_j ——各纯组分产品的温度和压力。

5.1.2 净功耗

供给分离过程的能量,往往是以热量的形式而不是以功的形

式提供,这时用净功耗这个概念更为方便。

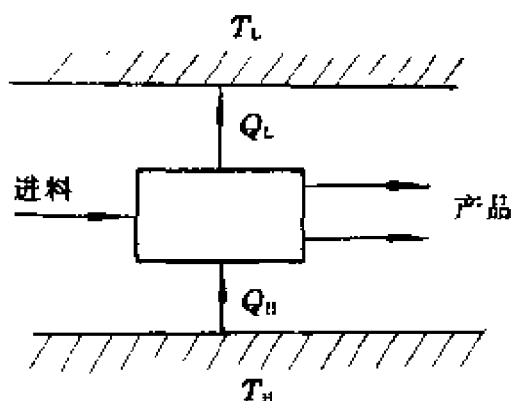


图 5-2^① 以热量为分离剂的分离过程

图 5-2 中 Q_H 表示在温度 T_H 条件下进入系统的热量, Q_L 表示在温度 T_L 条件下离开系统的热量。

如果向一可逆热机提供热量 Q_H , 热机在温度 T_0 下排出热量 Q_L , 则 Q_H 能得到的功为

$$Q_H \cdot \frac{T_H - T_0}{T_H}$$

同理, Q_L 能获得的功为

$$Q_L \cdot \frac{T_L - T_0}{T_L}$$

Q_H 和 Q_L 所能获得功的差值称为净功耗 W_n 。即

$$W_n = Q_H \frac{T_H - T_0}{T_H} - Q_L \cdot \frac{T_L - T_0}{T_L} \quad (5-9)$$

对于任何一个实际的分离过程, 净功耗 W_n 都必须大于熵的变化 ΔE_x 。如果在分离过程中不仅加入能, 而且也加入功, 那么应把功加到式 (5-9) 的右端。

如果分离过程中没有功加入, 而且进料和产品的焓差与加入系统的热量相比可以略去不计, 那末,

$$Q_H = Q_L = Q$$

^① 图 5-2 引自参考文献[1]。

$$W_n = QT_0 \left(\frac{1}{T_L} - \frac{1}{T_H} \right) \quad (5-10)$$

5.1.3 热力学效率

分离过程热力学效率的定义为最小分离功和加入系统的实际功耗 W_A 之比

$$\eta = \frac{W_{\min, T}}{W_A} \quad (5-11)$$

$W_{\min, T}$ 可用式(5-1)~(5-4)或式(5-6)计算。

5.2 分离流程的合成

5.2.1 分离方案数

在实际工业生产中遇到的分离问题常常是多组分的混合物,需要分离成三个以上的产品,这时就产生了分离配置方案问题。即采用什么分离方法,各组分的分离次序,切割的清晰程度和是否采用复杂塔等问题。若仅需决定各组分的分离次序,则上述问题就成为确定分离序列的问题。

对于三个组分的分离系统,King 曾提出一个分离序列方案的建议。见图 5-3,这些方案究竟哪一个最优越,并无一定的规律,要视 A、B、C 三个组分相对数量、相对挥发度的大小和产品的纯度而定。

若 B 的数量很小,而 A 又较 C 小时采用方案 7,若 A 大于 C 时采用方案 8。

如果组分 A 的数量很小或者 A 在 B 中的纯度要求并不严格,宜采用方案 5。同理,如果组分 C 的数量很小或者 C 在 B 中的纯度要求并不严格,宜采用方案 6。

当组分 B 的数量最大, A、C 数量相当时方案 3 和 4 可能是有利的。

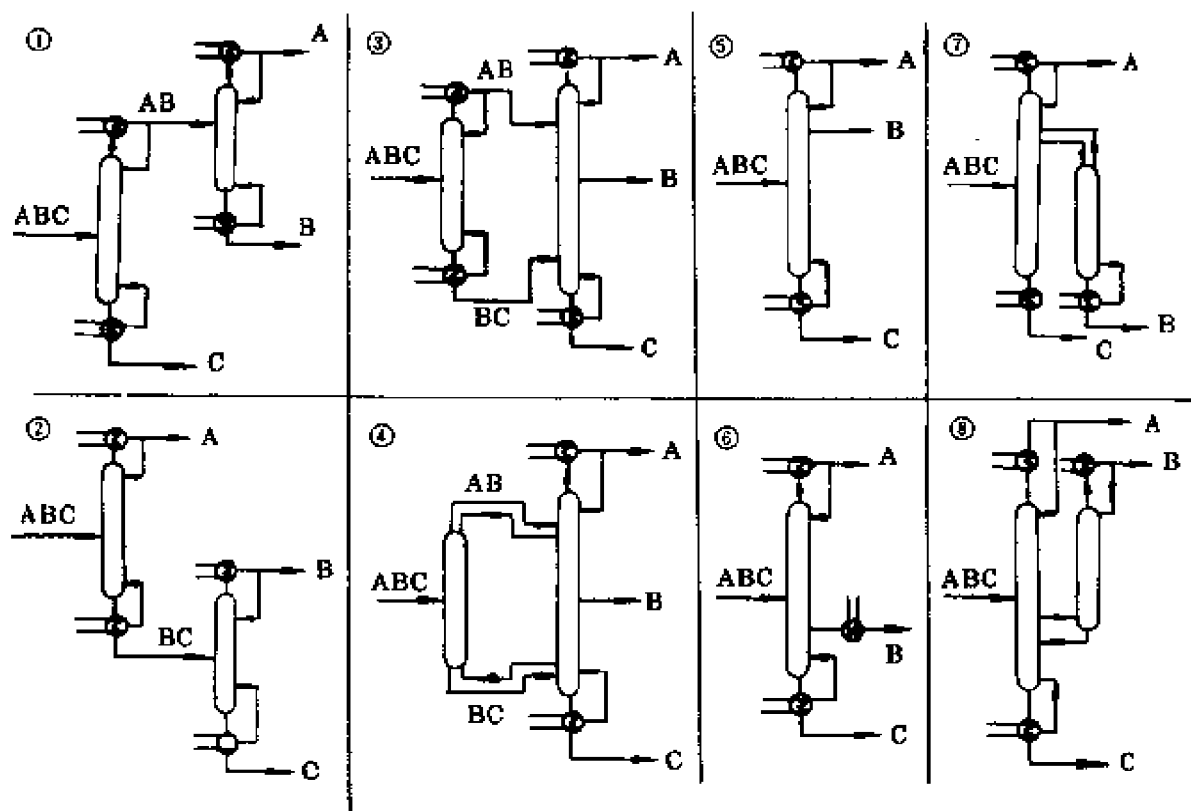


图 5-3 三元精馏的流程方案

(本图引自参考文献[1])

当采用方案 3~8 时,应与简单方案 1、2 进行比较后决定。

当进料组分数目多于三个时,各种配置方案的数量远远大于三个组分时的情况,可能的排列数多得惊人。以下我们只研究由简单清晰切割的分离器所组成的分离配置方案问题。所谓简单是指只有一个进料和两个产品,清晰切割是指进料中的任一组分只存在一个产品中,在另一个产品中完全不存在的这种切割。

如果混合物组分数是 N ,可能采用的分离方法是 M 种,则可能的分离方案数 S_N 可用下式计算:

$$S_N = \frac{[2(N-1)]!}{N! (N-1)!} \cdot M^{N-1} \quad (5-12)$$

表 5-1 列出了几个不同 M 和 N 值时可能有的分离方案数

表 5-1 分离方案数 S_N

$M \backslash N$	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	1	2	5	14	42	132	429	1430	4862
2	2	8	40	224	1344	8448	54912	366080	2489344

由表 5-1 可见,可能有的分离方案随着产品数和分离方法数的增加而急剧增加,当产品数大于 4 时,即使只有一种分离方法。欲将所有的方案进行比较,其计算工作量已嫌过大,必须采用某种较简便的方法,不必研究全部可能的方案就能得到其中较优者。

5.2.2 分离方法的选择^{[1][2]}

从式(5-12)可知,可能的分离方案数随着分离方法的增加而急剧增加,因此,设计工程师面临的首要任务是选择一个最有希望的分离方法,用该种分离方法去合成分离序列。

但是迄今为止,选择分离方法尚无严格的规则可遵循,而是采用探试规则。这些探试规则是根据过去的经验和对研究对象的热力学性质进行半定量分析所得到的结论。显然,根据探试规则得出的结论不一定是最佳方案,但是它能大幅度减少可能的方案数,从而提高设计速度。

5.2.2.1 几个定义

A 分配系数

分配系数是在平衡状态下某组分在轻相与重相中分子分数的比例,或者是某组分在溶剂与进料中分子分数的比例。对于精馏而言,即为该组分的汽液平衡常数 K 。

B 分离因子

分离因子是两个组分分配系数的比例,对于精馏,即为该两个组分的相对挥发度 α 。

C 质量分离剂和能量分离剂

加到分离单元,对所需要的分离作出贡献的组分,称作质量分

离剂,例如萃取或萃取精馏过程的溶剂,吸收过程的吸收剂。

能量分离剂是指为提供分离单元所需要的气液相流率而加入的能量,如精馏塔的再沸器和冷凝器所使用的热剂和冷剂。

D 次序表

次序表是进料各组分按照分配系数递减的次序所排列的表。

例如若有进料包含 A,B,C,D 和 E 五个组分,用溶剂 S 进行萃取分离,则分配系数 $K_i = y_i/x_i$ 。

式中 y_i ——组分 i 在溶剂 S 中的分子分数;

x_i ——组分 i 在进料中的分子分数。

若 $K_A > K_B > K_C > K_D > K_E$

则次序表为 A、B、C、D、E

E 关键组分

决定分离要求的两个组分,其中分配系数大者称为轻关键组分,小者称为重关键组分。

F 特定的分离

决定于轻重关键组分和所采用的分离方法,用 $(A/B)_M$ 表示, A 和 B 分别为轻重关键组分, M 为采用的分离方法。

5.2.2.2 选择分离方法的探试规则

选择分离方法的探试规则有如下几种:

(1)选择具有大的分离因子的分离过程。

具有较大的分离因子的过程需要比较少的平衡级和分离剂,因而分离费用较少。物质的分子性质对过程的分离因子有影响,表 5-2 列出了影响分离过程的分子性质。

表 5-2^① 影响分离因子的分子性质

分子性质	受影响的分离过程举例
分子量	精馏、蒸发、气相扩散
分子形状	吸附、结晶
分子体积	吸附
偶极距、极性	萃取、吸附
分子电负荷	电除尘、电除雾
化学活性	化学吸收,反应精制

①本表参考了文献[1][21]。

可以根据混合物各组分分子性质的差异程度来选择可能有较大的分离因子的分离过程。例如,若各组分的偶极矩或极性存在显著差异,采用以极性溶液为溶剂的萃取精馏可能是合适的。

(2) 尽量避免极端的过程条件。

如果一个分离过程需要极端的温度或压力,耐腐蚀的设备材料,或者高电场等条件,则可能使分离过程的费用高昂。若有其他可行的方案,应进行经济评价后再决定取舍。

(3) 当分离过程需要多个分离级时,应优先选择平衡分离过程而不选择速度控制过程。

速度控制过程例如电渗析、气体扩散过程,需要在每个分离级加入能量;而精馏、吸收、萃取等为平衡分离过程,分离剂在每一级重复使用,只需一次加入能量。例如在精馏过程中,热量在再沸器加入,产生上升蒸汽,该蒸汽逐级上升,并不需要在每个平衡级都加入蒸汽。

(4) 当分离因子相同时,选择能量分离剂而不选择质量分离剂。

当用质量分离剂时,它必须和产品再分离,因而需要增加另一个相继的分离器,这样便增加了分离过程的费用。

(5) 在选择分离方案方法时应首先考虑采用精馏,只有在精馏方案被否定后才考虑其他分离方案,因为精馏具有下列几个优点:

- ① 精馏是一个使用能量分离剂的平衡分离过程;
- ② 系统内不含有固体物料,操作方便;
- ③ 有成熟的理论和实践;
- ④ 没有产品数量的限制,从很小到很大的规模都能采用;
- ⑤ 常常只需要能位等级很低的分离剂。

因此,排除精馏方案的充分理由是分离因子小 1.05。除此之外,即使初选的工艺条件使塔釜温度过高可能破坏产物或严重结焦,或者需要能位等级很高的能量分离剂,仍然需要经过仔细的研究,例如能否修改工艺条件,并与其他方案进行比较后再决定精馏方案的取舍。

例 5-1 有邻、间、对二甲苯混合物欲分离成纯物质,试根据其分子性质选择分离方法。

解:表 5-2 所列各种分子性质除了分子形状外,邻、间、对二甲苯的其他各种性质都差别不大,因此可以预计精馏、萃取,吸收等过程都不能有效地将该混合物分离成纯化合物。各异构体分子形状之间的差别随着温度降低成为固体后更为显著,故建议采用冷冻结晶分离。

各异构体的分子体积,偶极矩和极性也有细小的差别,如果有适当的外部物质能使这些异构体的反应活性有显著差别,或者对异构体有较高吸附选择性的吸附剂,则也可以考虑采取化学反应分离或者吸附分离。

5.2.3 分离序列的确定

确定分离序列目前采用的方法有三种,即试探合成法,调优合成法和最优化算法合成法。可以使用其中一种方法,也可以联合使用其中两种方法。如试探-调优法,试探-最优化算法,最优化算法-调优法等。

5.2.3.1 试探法

试探法是人们根据试探规则来合成分离序列的方法,前文已说明试探规则是根据多年积累的经验和对过程的热力学性质进行半定量分析所得的结论,利用试探法能迅速得出一个或少数几个较优方案,但由于试探法是基于分离过程的共性规律,无法考虑各个过程的特殊性,因而是不严格的,难免失误。

A 影响分离过程生产费用的因素^[21]

试探法优选的目标是年生产费用最低,年生产费用由基建投资和操作费用两部分组成。基建投资主要考虑精馏塔,冷凝器和再沸器的基建费用,泵和回流罐的费用小于塔系投资的 5%,可略去不计。操作费用主要用于冷凝器和再沸器使用的冷介质和热介质,其他的操作费用也可略去不计。下面分析影响基建费用和操作费用的各项因素。

(1)塔内蒸汽流量 V 。

冷凝器的热负荷 Q_D 及冷介质用量 M_c 和再沸器热负荷 Q_B 及热介质用量 M_h 都取决于塔内蒸汽流量 V 。

$$Q_D = \Delta H_D V \quad (5-13)$$

$$Q_B = \Delta H_B V \quad (5-14)$$

$$M_c = \frac{\Delta H_D V}{C_{pc} \Delta T_c} \quad (5-15)$$

$$M_h = \frac{\Delta H_B V}{\Delta H_{sr}} \text{ 或 } M_h = \frac{\Delta H_B V}{C_{ph} \Delta T_h} \quad (5-16)$$

式中 ΔH ——物料的蒸发潜热；

ΔT ——冷热介质温升；

C_p ——比热容。

下标 D ——塔顶；

c ——冷介质；

B ——塔釜；

h ——热介质；

ST ——蒸汽。

对于一定的分离系统, $\Delta H, \Delta T, C_p$ 都为定值。

因此, 冷热介质的消耗量和冷凝器、再沸器传热面都取决于蒸汽流量。不仅如此, 精馏塔的投资主要也取决于蒸汽流量。由此可以得出结论: 精馏塔系基建费用和操作费用都取决于蒸汽流量, 并与其成正比。各方案中年生产费用最低者也是各塔蒸汽流量之和最小者, 最优分离序列的目标函数可用下式表达:

$$\varphi = \text{Min} \sum_{j=1}^N V_j$$

式中 N 为分离序列中的塔数。

蒸汽流量取决于两个因素

①塔的进料流量。

②用轻重关键组分的相对挥发度所表示的分离困难程度。分离越是困难, 即相对挥发度越小, 所需的回流比和蒸汽量越大。

(2)塔顶、底温度差。

从式(5-10)净功耗的计算公式可知,如果两个塔的 Q_b 和 Q_c 相同,但顶、底温度不同,则两者所消耗的净功耗不相同。塔顶的温度越低,塔底的温度越高,则所需的净功耗越大。

(3)操作压力。

操作压力对精馏塔系的基建费用和操作费用有如下影响:

①增加压力将使塔壁增厚,塔径缩小。

②增加压力使塔顶和塔釜的温度同时升高,若使用的冷、热介质温度不变,则冷凝器的温度差增加使所需的传热面积减少,而再沸器则相反。

③在绝大多数情况下,塔压增加使塔的相对挥发度降低,从而使所需的回流比增大,上升蒸汽量加大。

因此,操作压力升高对降低年生产费用的影响有利也有弊,在压力变化不大的范围内,其综合结果对年生产费用的变化影响较小,但趋势是随着压力升高生产费用增加。

B 探试规则^{[3][5]}

到目前为止,探试规则仅适用于简单清晰切割塔,即只有一个进料、两个出料,进料组分只出现在一个出料中的精馏塔。根据探试规则得到的较优分离序列,可以进一步研究有无可能采取侧线出料,中间再沸器或中间冷凝器等节能措施。探试规则有下列几条:

(1)应把关键组分的相对挥发度最接近于1的最困难分离放在最后,即在所有其他组分都除去后再进行分离。

关键组分的相对挥发度最接近于1的最困难分离所需的回流比最大,若有非关键组分存在,由此引起的蒸汽流量增加大于其他分离。另一方面当有比较关键组分更轻的组分进入最困难分离系统时,塔顶温度将比原来的温度低,因而不仅增加了冷量的消耗,而且也提高了冷量的等级;而当有比重关键组分更重的组分进入系统时,则将提高塔釜温度,增大了塔顶底的温差。若再沸器温度很低,能回收冷量,有重组分还降低了从再沸器回收冷量的等级。

非关键组分的存在使塔顶底温差和蒸汽流量都增加,两个大数相乘,其积必然急剧上升。因此,应该把非关键组分先分离,把最难分离的塔放在最后。

这条规则是根据精馏的共性规律推论得到的,但若个别系统有非关键组分存在时,使关键组分的相对挥发度增加,则从这条试探规则得到的结论就可能出现失误,即遗漏了真正的最优序列。

(2)根据汽液平衡常数的大小进行排列,把轻组分逐个脱除,即采取顺序流程。

$$\text{塔的蒸汽流量} \quad V = D(1 + R) \quad (5-17)$$

式中 D 为馏出液流量, R 为回流比。若塔的进料有 A、B、C、D、E 五个组分,其中汽液平衡常数 $A > B > C > D > E$ 。分离五个组分共需要四个精馏塔。显然,若改变分离序列并不改变各个塔的回流比,则顺序流程的各塔蒸汽负荷之和 $\sum V_i$ 最小。不仅如此,若有沸点低于环境温度的组分 A,则分离该组分的塔必须加压和(或)采用冷冻,若采用顺序流程,则仅第一个塔需要冷冻;若不采用顺序流程,则所有含组分 A 的塔其塔顶温度都较采用顺序流程相应的塔的温度为低,这将增加该塔的净功耗,甚至使原来不必采用加压或冷冻的塔要加压或冷冻。

(3)应首先把混合物分成分子数接近的两股流。

精馏塔的冷凝器负荷和再沸器负荷是不能互相独立调节的,如果塔顶馏出液的数量远小于釜液,当精馏段的回流比已满足要求时提馏段的蒸出比可能太小。此时,只能加大提馏段上升蒸汽量而使精馏段的回流过大和热力学效率降低。反之,若釜液流量过小,会出现提馏段蒸出比过大的情况,同样使热力学效率降低。若顶、底产品的分子数接近相等,有可能使回流比和蒸出比得到比较好的匹配从而降低能耗。

(4)对于回收率要求高的分离应放在最后。

回收率要求高即产品纯度要求高,当纯度达到一定要求后最小回流比并不随纯度的提高而不断提高,而是保持较稳定的值。但是纯度高则要求板数多,当有非关键组分存在时增大了级间流率,

从而增大了塔径,对于板数多的塔,增大塔径将增加不少投资。因此,应把非关键组分全部除去,即把该塔放在最后。

(5)对于容易造成系统腐蚀或聚合结焦的组分应首先除去,以降低后续设备的材质要求或稳定操作。

(6)对于各组分沸点相差很远的混合物,如果有的组分需在冷冻的条件下进行分离,应使进入冷冻系统或冷冻等级更高的系统的组分数尽量减少。

温度愈低,单位冷量所耗的功愈大,因而价格也愈贵,不同温度冷量的功率消耗见表 5-3。该表是以乙烯和丙烯为制冷介质,压缩机的等熵效率 0.72,机械效率为 0.99 计算所得。

表 5-3 不同温度的冷量的功率消耗

冷冻温度 ℃	功率消耗 kWh/10 ⁶ kJ	冷冻温度 ℃	功率消耗 kWh/10 ⁶ kJ
-101	434	-40	152
-75	304	-23	115
-62	255	-2	66
		18	41

例 5-2 试以探试法合成煤柴油裂解制乙烯、丙烯的分离流程。

(1)分离物料的组成。

自裂解炉出口的气体经过废热锅炉和淬冷器急冷后降温到 200℃左右进入分离部分,裂解气组成(不计水蒸汽)如表 5-4 所示。

表 5-4 以煤柴油为原料的裂解气组成及沸点

序号	组 分	分子%	常压沸点℃
1	氢	11.02	-252.8
2	一氧化碳	0.18	-191.5
3	二氧化碳	0.06	-78.2
4	硫化氢	0.04	-60.2
5	甲烷	24.40	-161.5

续表

序号	组 分	分子%	常压沸点℃
6	乙烯	29.70	-103.7
7	乙烷	4.40	-88.6
8	乙炔	0.40	-81
9	丙烯	13.40	-47.7
10	丙烷	0.40	-42.1
11	甲基乙炔+丙二烯	0.60	-34.5
12	碳四	6.0	-2.4
13	碳五	1.0	44
14	碳六到碳八组分	5.10	80~145
15	燃料油	2.60	

(2)分离要求。

在确定分离流程之前必须了解分离要求,即产品的规格。乙烯装置的主副产品的规格如下:

①高纯度乙烯

乙烯	>99.95	mol %
乙炔	<5	mol ppm
碳三及重组分	<10	mol ppm
一氧化碳	<5	mol ppm
二氧化碳	<1	mol ppm
硫(以硫化氢计)	<1	mol ppm
水分	<1	mol ppm

②高纯度丙烯

丙烯	>99.5	mol %
乙烯	<10	mol ppm
乙炔	<1	mol ppm
甲基乙炔+丙二烯	<5	mol ppm
丁烯	<1	mol ppm

丁二烯	<1	mol ppm
一氧化碳	<5	mol ppm
二氧化碳	<5	mol ppm
水分	<2.5	mol ppm
③富氢气体		
氢	>95	mol %
一氧化碳+二氧化碳	<10	mol ppm
④甲烷富气		
甲烷	>94	mol %
⑤碳三液化气		
丙烯	<15	mol %
碳四馏分	<1	mol %
丙烷	平衡	
⑥碳四馏分		
碳三烃	<0.5	wt %
碳五烃	<0.5	wt %
碳四	平衡量	
⑦碳五及汽油馏分		
碳四烃	<0.5	wt %
ASTM 终沸点	205℃	
相对密度	0.81~0.82	
⑧裂解燃料油		
相对密度	1.04~1.08	
闪点	>50℃	

(3)分离方法的选择。

由产品要求和规格可知一氧化碳、二氧化碳、硫化氢、乙炔、甲基乙炔和丙二烯,水分等是必须从产品中分离掉的有害组分。但是分离方法不应采用常规的精馏方法,因为这些有害组分的含量很少,而且要求极为严格,只允许在产品中有 1~5ppm,用精馏方法达到这么高的纯度是比较困难或不经济的。因此,可根据不同情况

采用下列几种方法除去这些组分。

①乙炔和乙烯有共沸点,因此应通过催化加氢使乙炔转化成乙烯和乙烷,或者用丙酮吸收除去乙炔。催化加氢有两种工艺,一种是裂解气全馏分加氢,称为前加氢,另一种是碳二馏分加氢,称为后加氢。

②甲基乙炔和丙二烯能通过精馏方法与丙烯分离进入丙烷馏分,但由于甲基乙炔和丙二烯在裂解气中的含量超过丙烷,因此与丙烷形成的混合物其浓度将超过 50%,这种高浓度的丙炔混合物易爆炸,使用很不安全。因此,应通过催化加氢方法将其转化成为丙烯和丙烷,作为液化气使用。

③一氧化碳的沸点低至 -191.5°C ,若用精馏方法与氢气分离时需要深度冷冻,而一氧化碳数量并不多,因此应采用催化方法使其变换成甲烷再除去。

④硫化氢在潮湿的气体中有腐蚀性,应及早脱除。它和二氧化碳同属酸性气体,所以可以用乙醇胺或纯碱等碱性溶液吸收除去。

⑤乙烯和丙烯要求水分含量低于 $1\sim 2.5\text{ppm}$,丙而必须除去水分。除此以外,大部分精馏塔在低温下操作,若不将水分除去,水分与烃类会形成固态水合物而堵塞系统,故必须在裂解气进入低温系统前将水分脱除。通常采用分子筛干燥剂脱水。

⑥除上述组分外,其他组分都可用精馏的方法分离。

(4)分离总流程的确定。

①从表 5-4 所列各组分的常压沸点可知碳三及更轻组分的常压沸点都在 -42°C 以下,因此应在加压的条件下进行分离以降低冷凝器所需冷量的等级;而燃料油、汽油等馏分在常压、室温条件下是液相,因此,应在裂解气压缩前把燃料油、汽油馏分除去。

②应先脱除燃料油馏分,再脱除汽油馏分。因为要较完全地脱除汽油馏分,必须把裂解气的温度降到苯能冷凝下来,但这时裂解气中的大量水蒸气也将冷凝,造成水与燃料油、汽油同时冷凝。由于裂解燃料油的相对密度接近于 1,冷凝后容易和水生成乳浊液而不能分离,因此不能采用同时脱除燃料油和汽油馏分后再分离

燃料油和汽油的流程。

③当有水分存在时硫化氢为腐蚀性介质。随着硫化氢分压的增加其腐蚀性加强,因此应尽可能及早除去,另一方面,碱吸收的压力愈高,脱除硫化氢和二氧化碳愈完全。综合考虑这两种因素,通常把碱吸收设置在压缩机三段出口,压力在 $1.0 \sim 1.2 \text{ MPa}$ 左右。

用图 5-4 表示上述分离总概略流程。

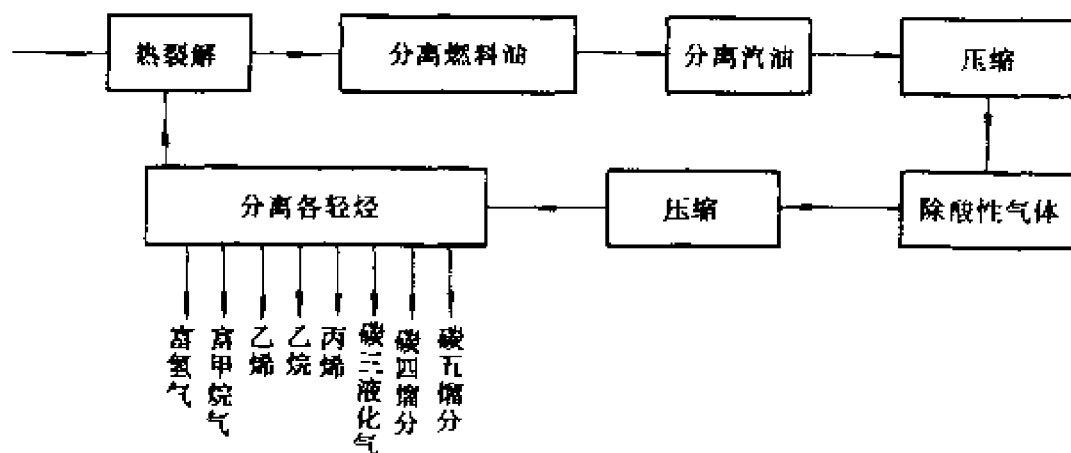


图 5-4 裂解气分离总概略流程

(5)轻烃分离流程的确定。

确定轻烃分离流程的具体步骤如下：

①由于乙烯、乙烷和丙烯、丙烷两组混合物的常压沸点差最小,可知这两组是最难分离的混合物。同时,乙烯、丙烯的回收率要求也最高,因此根据探试规则(1)和(4),应把乙烯、乙烷分离和丙烯,丙烷分离放在最后。

②第一个分离塔应怎样切割馏分,根据不同的探试规则可以得出不同的结论：

根据探试规则(2),应采用按沸点由低而高的顺序,逐个脱除轻组分的流程,即顺序流程。我国从美国鲁默斯公司和斯通韦柏斯特公司引进的乙烯装置都采用这种流程,其示意流程图见 5-5。

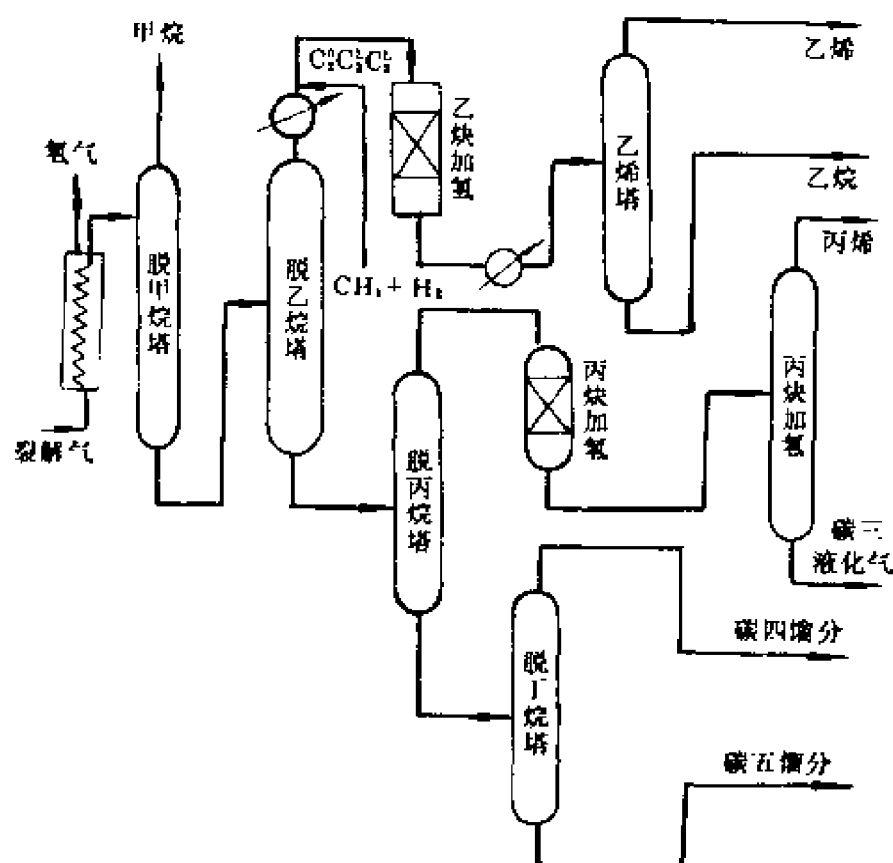


图 5-5 顺序流程示意图

根据探试规则(6),应减少进深冷系统的物料数量,因此第一个塔应是脱乙烷塔,使比碳二重的馏分都不进深冷系统,我国高桥化工厂乙烯装置就采用这种流程。此外,国外林德公司也采用前脱乙烷流程,其示意流程图见图 5-6。

根据探试规则(5)应把容易聚合结焦的丁二烯首先分离掉,因此应采用前脱丙烷流程。我国上海石油化工股份有限公司从日本三菱公司引进的乙烯装置就采用这种流程。美国勃朗公司也采用过前脱丙烷流程,其示意流程图见图 5-7。

图中脱炔①为前加氢反应器,脱炔②为乙炔加氢反应器,脱炔③为丙炔加氢反应器。

同样的前脱丙烷流程,脱炔反应器有不同的安排,上海石油化工股份有限公司的乙烯装置设有采用前加氢反应器,因此用脱炔②和

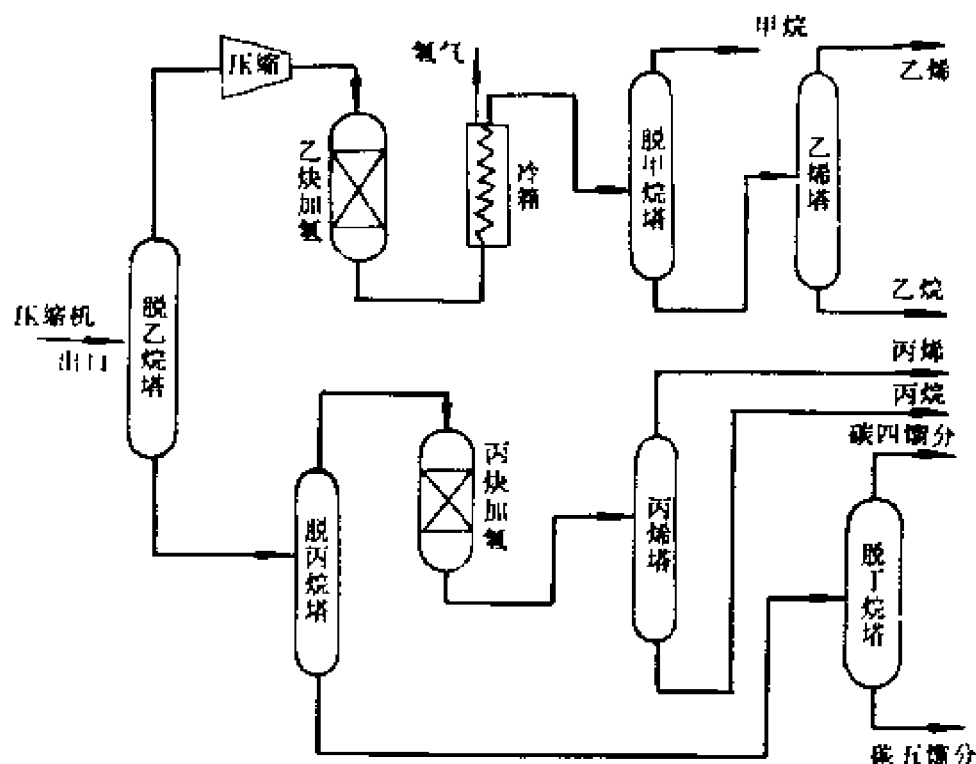


图 5-6 前脱乙烷示意流程图

脱炔③反应器。美国勃朗公司采用的前加氢触媒脱除丙炔，特别是丙二烯的能力较差，因此在采用前加氢反应器后还需设置丙炔加氢反应器。此外，有些乙烯工厂为了保证乙烯质量稳定合格，采用脱炔①和②反应器，前加氢反应没有转化的丙炔和丙二烯通过精馏进一步除去。

上述三种流程所以能同时存在是因为各种流程有不同的优缺点，这些优缺点在不同的情况下所起的作用也不同。

前脱丙烷前加氢流程有能量消耗较低。操作方便的优点，但是迄今为止尚未得到广泛应用，其原因主要是：用户对于乙烯产品中乙炔含量的要求愈来愈苛刻，有的用户要求不超过 1ppm，若采用前加氢流程，在反应器出口处乙炔含量能小于 1ppm，但是经过一系列步骤后乙炔将富集于乙烯乙烷馏分中，使乙烯中乙炔含量比

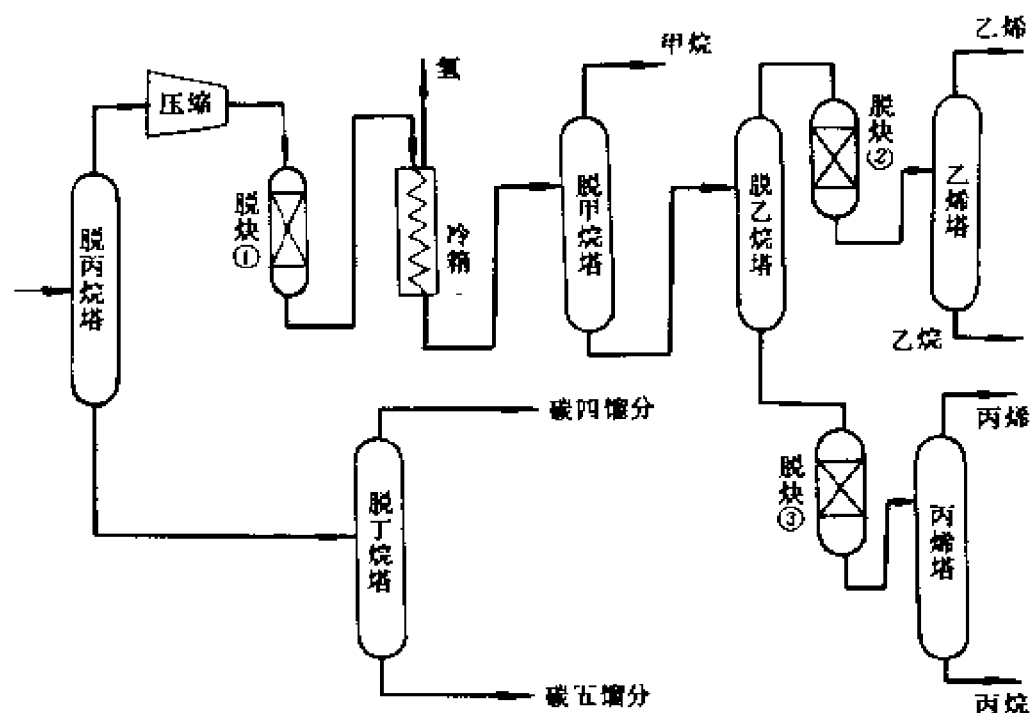


图 5-7 前脱丙烷流程

反应器出口处增加而造成乙烯质量不合格。加氢触媒需用一氧化碳钝化以控制一定的活性,在前加氢的条件下,若活性太高,由于原料中含有大量氢气,不仅会造成大量烯烃加氢而损失,而且还会使温度飞跃上升造成事故;若活性过低,有可能使乙炔没有完全转化而使其含量超过控制指标。为此,必须同时严格控制温度和一氧化碳的含量,操作要求严格。对于后加氢反应,由于氢气和碳二馏分已经分离,所需的氢气量是通过控制加入的,因此容易调节,有利于长期安全稳定地运转。

由此可见,分离方案的取舍不仅取决于每个塔系本身能耗的高低,而且还取决于不同分离流程所引起的其他工艺部分能耗的变化。因此,分离流程的确定必须结合过程特点对全系统进行分析、计算,才能得出全面而正确的结论。

5.2.3.2 调优合成法^{[4][2]}

调优合成法是以某个初始的流程为基础,对其进行一系列修正而合成接近最优系统的方法。

A 具体步骤

(1)利用过去已有的流程,或者根据探试规则产生初步流程。

(2)根据调优规则开发当前流程所允许的结构变化。

(3)对得到的各种结构变化进行分析,确定替代方案,选择其中最好的方案作为改进方案。

(4)以改进的方案为基础,再进行分析,作进一步的改进,如此反复进行直到不能再改为止。每一个修改的方案都是在前一方案的基础上进行改进的。

B 调优规则

调优规则用于产生一个分离序列所有允许的结构变化,它应当具备下列特性:

(1)有效性:根据调优规则所产生的所有分离序列都应当是可行的。

(2)完备性:从任意初始流程开始,反复应用调优规则能产生所有可能的流程。

(3)直观合理性:根据调优规则所产生的流程与当前进行调优的流程没有显著的差别。

下列两条规则完全满足上述三项要求:

规则 1:将一个分离任务移至所在分离序列的前一个位置。

规则 2:改变一个分离任务的分离方法。

用探试规则产生初始流程,再用调优法加以改进,是有经验的设计工程师常用的过程合成方法,但调优的速度和质量在很大程度上依赖于设计人员的素质和经验。

例 5-2 现有丙烷(A)、丁烯-1(B)、正丁烷(C)、反丁烯-2(D)、顺丁烯-2(E)和正戊烷(F)六组分混合物,试用调优合成法寻找最优分离序列,其条件如下:

(1)进料规格

流量: 308.25 kmol/h
 组成: A B C D E F
 (mol%) 1.48 14.76 50.28 15.64 11.94 5.9
 温度: 40℃
 压力: 1.03MPa

(2)产品要求:高回收率,分离成四个产品。

- ① A ② BDE
 ③ C ④ F

(3)分离方法

- ①常规精馏(称方法 I),
 ②以糠醛为溶剂的萃取精馏(称方法 II)。

(4)组分次序表

方法 I A B C D E F

方法 II A C B D E F

(5)重要的相邻组分的相对挥发度(66℃下的数值)

方法 I $\alpha_{AB}=2.45$ $\alpha_{BC}=1.18$

$\alpha_{CD}=1.03$ $\alpha_{EF}=2.50$

方法 II $\alpha_{CB}=1.70$ $\alpha_{CD}=1.17$

解:根据试探规则产生初始分离序列。

①由于精馏的 $\alpha_{CD}=1.03<1.05$,因此 C 和 D 的分离应采用萃取精馏,其他组分的分离都可采用精馏。

②分离(A/B)₁和(E/F)₁的相对挥发度最大,因此应考虑将其放在分离序列的首位,两者的相对挥发度相差不大而前者同时符合应采取顺序流程的试探规则,因此将(A/B)₁放在第一,(E/F)₁第二。

③分离掉 A 和 F 后的 B、C、D、E 四组分混合物,由于 D 和 E 在同一个产品流股中,因此需要分离的仅是 B/C 和 C/D。 $(\alpha_{BC})_1=1.18$, $(\alpha_{CD})_1=1.17$,两者的数值虽然相近,但是萃取尚需另加溶剂回收塔,因此第三步选择精馏分离 B 和 C,将(C/D)₁放在最

后,初步合成的分离序列如下:

<u>A</u>				→(A)
B	B	<u>B</u>	→(B)	
C	C	<u>C</u>	<u>C</u>	→(C)
D →	D →	D →	D	
E	<u>E</u>	E	E	→(DE)
F	<u>F</u>	→(F)		
(I)	(I)	(I)	(I)	

上述分离序列的生产费用为 878,080 美元/年。

(2)根据调优规则找出各种可能的结构变化。

①将(E/F)₁移至(A/B)₁以前。

②将(B/C)₁移至(E/F)₁以前。

③将(C/D)₁移至(B/C)₁以前。

(3)对各种结构变化进行分析确定替代方案。

我们不认为调优步骤(1)和(3)将降低生产费用,其理由已在产生初始分离序列时叙述。

将(B/C)₁移至(E/F)₁以前可能是有利的,因为符合按组分次序逐个脱除轻组分和使塔顶底产物更为平衡两条控探试规则。采用调优步骤(2)后的分离序列如下:

<u>A</u>			
B	<u>B</u>		
C	C	C	<u>C</u>
D	D	D	D
E	E	<u>E</u>	E
F	<u>F</u>	F	
(I)	(I)	(I)	(I)

其生产费用略有下降,为 872,000 美元/年。

(4)以改进的方案为基础,再进行分析作进一步的改进。

应用调优规则 1,产生下列两个可能的结构变化:

④将(B/C)₁移到(A/B)₁以前。

⑤将(C/D)₁移到(E/F)₁以前。

由于B的数量为A的十倍,实行调优步骤(4)有利于克服第一个分离器顶底产品数量过分悬殊的缺点,因此可以采用。而调优步骤(5)得不出可能降低生产费用的理由,不予采纳。因此,修改后的分离序列如下:

A	<u>A</u>	<u>A</u> →(A)
B	<u>B</u>	B→(B)
C	C	<u>C</u> →(C)
D	D	D
E	<u>E</u>	<u>E</u> →(DE)
F	F	F→(F)

以上分离序列的生产费用为 860,000 美元/年。

至此已无其他可能的结构变化值得考虑,因此这个分离序列就是调优合成法所得到的最优分离序列。

5.2.3.3 最优化算法合成法^{[2][6]}

合成分离序列的问题可以这样定义,对一已知进料,用某种方法合成一个分离序列,使该分离序列能以最小的费用将进料分离成指定规格要求的产品,这问题可用如下数学式表达:

$$\min \varphi = \sum_{i=1}^{N-1} \varphi_i(x_i, u_i)$$

式中 φ — 分离总费用,

N ——欲分离混合物的组分数,

φ_i —— i 分离器在某一分离序列中的分离费用,

u_i ——分离器 i 的设计变量,

x_i ——分离器 i 的状态向量,表示该分离器在某一个分离序列。

由式(5-17)可知该问题是个非线性混合整数规划问题,这时一方面要对采用哪一个分离序列作出离散决策,同时又要对在连续范围内变化的设计变量作出连续决策。解此题可用适用于求解非线性混合整数规划的一些算法来解决。例如动态规划法,分枝界

限法等。

A 动态规划法

动态规划法是一种分解方法,它把一个N级的决策过程化成N步的一级决策过程,进行决策的步骤是从过程的末端开始,第一步求最后一级对于给定的输入的最优决策,第二步将最后两级一起考虑,求出对最后第二级输入的最优决策。依此类推,进行第三步、第四步……决策,直到过程的开端。现以一个四组分混合物分离的过程为例。说明动态规划的基本思想和解题步骤。

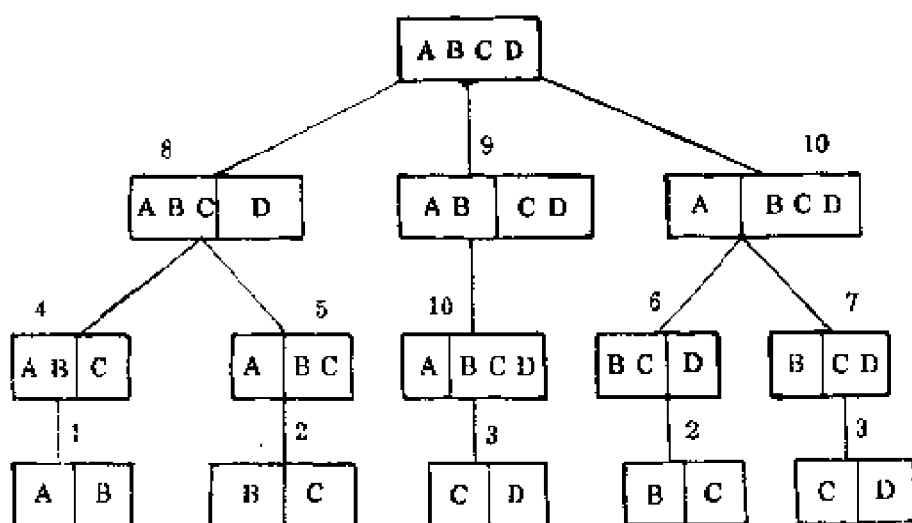
例 5-4 现有丙烷、异丁烷、正丁烷和异戊烷四个组分的混合物,欲将其分离成纯组分,流量为 590kmol/h ,组成为:

- (A)丙烷 $7.7\text{mol}\%$ (B)异丁烷 $23.1\text{mol}\%$
(C)正丁烷 $38.5\text{mol}\%$ (D)异戊烷 $30.7\text{mol}\%$

试用动态规划法合成分离序列

解:四元混合物进行分离有三步决策过程,五个分离序列,10个分离子问题。

五个分离序列如下:



10 个分离子问题:

四组分分离子问题: ABC/D AB/CD A/BCD

三组分分离子问题: AB/C A/BC BC/D B/CD

二组分分离子问题: A/B B/C C/D

由分离序列图可以看出,四组分分离有 5 个分离序列,每个序列包括三个分离器,但分离器的种类即分离子问题只有 10 个。每个分离器由于操作参数不同会有不同的分离费用。经过模拟计算得到每个分离器的最优分离费用,见表 5-5 列 I。

根据动态规则的基本思想,决策过程从过程的末端开始。因此,第一步决策为合成两个组分的分离序列,由于表 5-5 列 I 的数值是该分离器的最优分离费用,因此第一步决策的输出同该数值。第二步是将最后两级决策一起考虑,合成三组分分离序列。同样可从表 5-5 列 I 查得三组分分离的费用,然后加上二组分分离的费用得到三组分分离序列的分离费用。第三步决策是合成四组分分离序列,它由三个分离子问题所组成。该步决策的输出为四组分分离的最优分离费用加相应的三组分分离的最优分离费用。各步决策的最优值见表 5-5。

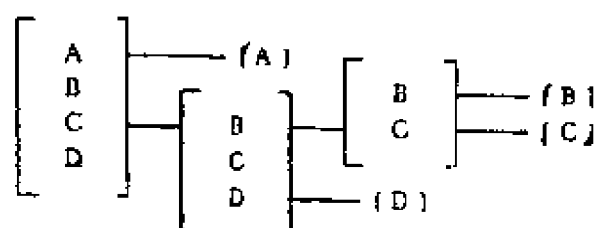
表 5-5 分离器费用及动态规划汉各步决策输出值

编号	切割点	分离最小费用 10^5 元/年 I	第一步决策输出值 I	第二步决策输出值 II	第三步决策输出值 IV
1	A/B	0.2613	0.2613		
2	B/C	0.9493	0.9493		
3	C/D	0.5927	0.5927		
4	AB/C	1.198		$1.198 + 0.2613 = 1.4593$	
5	A/BC	0.3953		$0.3953 + 0.9493 = 1.3446$	
6	BC/D	0.7675		$0.7675 + 0.9493 = 1.7168$	
7	B/CD	1.1260		$1.1260 + 0.5927 = 1.7187$	

续表

编号	切割点	分离最小费用 10^5 元/年 I	第一步决策输出值 II	第二步决策输出值 III	第三步决策输出值 IV
8	ABC/D	0.9445			$0.9445 + 1.3446$ $= 2.2891$
9	AB/CD	1.4050			$1.4050 + 0.2613$ $+ 0.5927 = 2.259$
10	A/BCD	0.4707			$0.4707 + 1.7168$ $= 2.1875$

因此,丙烷(A)-异丁烷(B)-正丁烷(C)-异丙烷(D)系统分离的最优分离费用为 2.1875×10^5 元/年,最优分离序列为:



由上述例子可以看出,若直接计算最优分离序列,计算工作量为分离序列数乘每个序列中的分离器数,采用动态规划法计算工作量就降为总分离器数。若混合物组分分别为 4、5 和 6,其相对工作量如下:

混合物组分数	4	5	6
可能的分离序列	5	14	42
每个分离序列中分离器数	3	4	5
所有分离器种类	10	20	35
直接寻优计算工作量	15	56	210
动态规划计算工作量	10	20	35

由此可见,混合物的组分数越多,动态规划法的效率越高。但是当组分数较多时,动态规划法的计算工作量仍然很大。为了克服这个缺点,提出了用分枝限界法来合成分离序列。

B 分枝限界法

分支限界法解题的思路是首先将原始问题分解,产生一组子问题,其次是建立某个子问题解的边界,然后对每个子问题进行计算。若在解题过程中或解题结束时发现某组解在边界之外,就划去这个子问题从而减少了计算工作量。当将分支限界法用于确定分离最优序列时,其主要步骤如下:

(1)列出所有可能的分离序列和分离器。

(2)对于某个有希望的分离序列计算其总费用的上限 C_u 和下限 C_l ,该分离序列称作基本分离序列。

(3)计算各个分离序列的费用,任何一个序列,不论是已完成的完整序列或者是只完成一部分的非完整序列,只要它的下界值大于 C_u ,那么这个序列就不可能是最优序列,应予以删去。

因此,分枝限界法的优点是在某个分离序列费用计算完成前就可以将其删去,但它的缺点是计算分离序列最优费用的下界限的方法比较复杂,使该法的应用受到限制。

综上所述,直接最优化合成法的优点是严格,但缺点是计算工作量大。对于组分数较多的分离问题,利用最优化算法确定分离序列至今尚不现实。

5.3 工艺参数的确定

对于一个简单精馏塔而言,若进料组分数为 C ,则能够指定的独立变量为 $C+6$ 个。由于进料组成和数量由系统的上游决定,设计人员能够决定的变量数是 6 个,这 6 个变量通常是取总板数,进料板位置,塔压、回流比,进料热状态和一个产品的数量或关键组分的回收率。下面分别叙述这些工艺参数确定的原则。

5.3.1 塔压

塔压的选择不是一个仅取决于塔本身分离要求的孤立问题,而是和系统的条件密切相关,实质上是塔顶、底温度选取的问题,它应根据下列原则确定:

(1)如果塔在常压以上的压力下操作而不致引起物料的结焦、聚合、腐蚀或不希望发生的反应产生,就不应在真空下操作,因为真空操作不仅需要增加真空设备的投资和操作费用,而且由于真空下气体的体积增加,将增大精馏塔的塔径。在不得已采用真空操作时应尽量降低塔板(或填料)的阻力,以免在高真空下操作更增加操作费用,一般应使真空泵入口压力大于 1.3kPa 。

(2)如果在常压下操作时可以用普通冷却水进行冷却,在一般情况下就不应采用加压操作,因为加压将增加塔身壁厚和降低轻重关键组分的相对挥发度,从而增加回流比和/或塔板数。这几个因素综合在一起,其操作费用和基建费用的增加将超过塔压升高后塔径缩小所节省的费用,因而升高塔压将使分离成本上升。但是若塔顶物料的常压沸点较高,加压后冷凝温度的升高可以利用冷凝热作为热源,而釜温的升高又不致引起塔釜物料的结焦、聚合或再沸器热源费用急剧上涨时,也可进行方案比较后采取加压。

(3)如果操作压力必须大于 1.6MPa 才能使塔顶冷凝器以冷却水为冷却剂,那么应该进行方案比较,以决定究竟是低压、冷凝器用冷冻,还是高压、冷凝器用冷却水。

(4)若必须使用冷冻,可根据冷剂的温度,加上冷凝器的温差作为冷凝器的物料温度,由此决定塔顶压力。

塔顶冷凝器的温差可按表 5-6 考虑。

(5)调节塔压是解决精馏塔之间,或精馏塔和过程其他部分之间进行热集成的最有效的手段。若精馏塔 A 的塔顶物料的冷凝温度较高,有可能作为另一个换热器的热源,但温差不够,此时应研究是否提高塔 A 的压力以满足传热温差的要求。若另一个换热器是精馏塔 B 的再沸器,也可以考虑降低塔 B 的操作压力。再沸器

表 5-6^① 冷却冷凝器终端温差

介质类别	终端温差℃
冷剂:	
—101℃	2.5~3
—70℃~-75℃	3~4
—55℃~-62℃	3~5
—40℃~-41℃	4~5
—23℃~-24℃	5~6
0℃~20℃	5~10
冷却水	5~20
锅炉水	20~40
空气	20~50

①本表引自参考文献[1]。

的温差可按下列数值考虑:

工艺物料	10~20℃
蒸 汽	10~60℃
热 油	20~60℃

(6)如果对适宜的塔压没有任何认识时,可用下式估计塔压的初值:

$$\ln p = 1751/T - 6.777 \quad (5-18)$$

式中 T ——进料沸点,K,

p ——塔压 MPa。

例 5-5 乙烯装置脱丙烷塔的塔顶和塔釜的组成如下:

塔顶	组分	C ₃ H ₄	C ₃ H ₆	C ₃ H ₈	C ₄	
	mol %	4.1	93.8	2.0	0.1	
塔釜	组分	C ₄ H ₆	C ₄ H ₈	C ₅	C ₅	C ₆
	mol %	35.6	28.6	0.4	14.0	3.4
	组分	C ₆ H ₆	C ₆ H ₃ CH ₃			
	mol %	14.9	3.1			

现有冷剂的温度为 2℃,热剂低压蒸汽的温度为 126℃。为了减少塔釜结焦,要求釜温低于 85℃,试确定其塔压。

解:冷剂的温度为 2℃,根据表 5-6 所列适宜的终端温差范

围,取终端温差为 8°C ,故

$$\text{塔顶温度} = 2 + 8 = 10^{\circ}\text{C}$$

根据塔顶组成和温度,计算其泡点压力为 0.64MPa 。若考虑提馏段可能结焦的不利因素,取全塔阻力为 0.14MPa ,即塔釜压力为 0.78MPa 。再计算在该压力下釜液的泡点温度,得塔釜温度为 82°C ,低于釜温的限制条件,因此可取塔顶压力为 0.64MPa 。

乙烯装置其他精馏塔的压力也都根据上述方法确定,具体数值见表 5-7。

表 5-7 乙烯装置各精馏塔的塔压选择

塔	冷剂 温度 $^{\circ}\text{C}$	塔顶 温度 $^{\circ}\text{C}$	塔顶压力 MPa	塔釜压力 MPa	釜温 $^{\circ}\text{C}$	热剂温度 $^{\circ}\text{C}$	釜温限制 条件 $^{\circ}\text{C}$
脱甲烷塔	-101	-98	3.17	3.25	5	工艺气回 收冷量	——
脱乙烷塔	-23	-17	2.37	2.39	67	80	——
脱丙烷塔	2	10	0.64	0.78	82	126	小于 95
脱丁烷塔	32	41	0.32	0.42	106	126	——
乙烯塔	-40	-36	1.74	1.88	-7	工艺气回 收冷量	——
丙烯塔	32	40	1.62	1.90	55	80	——

5.3.2 回流比^{[8][10]}

影响精馏单元年生产费用的最主要因素是塔内蒸汽流量 V 。在馏出液量 D 一定时, V 的大小取决于回流比。回流比不是可以任意选取的,必须大于最小回流比 R_{\min} ,因此 V 的大小取决于回流比和最小回流比的比值 R/R_{\min} 。 R/R_{\min} 大,所需塔板数少,但是塔径大,公用工程消耗增加。因此,当 R/R_{\min} 增大时,基建投资费用减少而公用工程消耗费用增加。Heaven 曾用典型的经济评价数据对 70 个烃类精馏塔进行了最佳 R/R_{\min} 的计算,得到的结论是最佳

R/R_{\min} 范围在 1.11~1.24 的范围内。

对于非烃类精馏或温度条件、分离要求较极端的塔,最佳 R/R_{\min} 的范围较 1.11~1.24 要宽,可在 1.05~1.4 或更宽的范围内变化,在确定 R/R_{\min} 的初值时应考虑下列因素:

(1) 单位热量或冷量的价格:对于价格高昂的公用工程,取常规 R/R_{\min} 的范围的低限,反之则取高限。

当塔顶或塔底温度条件非常苛刻,即塔顶温度很低或者塔釜温度很高,因而所需的公用工程价格非常昂贵时, R/R_{\min} 值取低限,例如低压脱甲塔 R/R_{\min} 的值为 1.05。又例如正、异丁烷分离,当公用工程的价格在常规范围内时,其最适宜 R/R_{\min} 为 1.113;若公用工程价格提高 10 倍,则适宜的 R/R_{\min} 降为 1.0267。当公用工程的价格比较便宜时,年生产费用对 R/R_{\min} 的变化不敏感,不同公用工程价格对精馏单元年生产费用的影响见图 5-8。

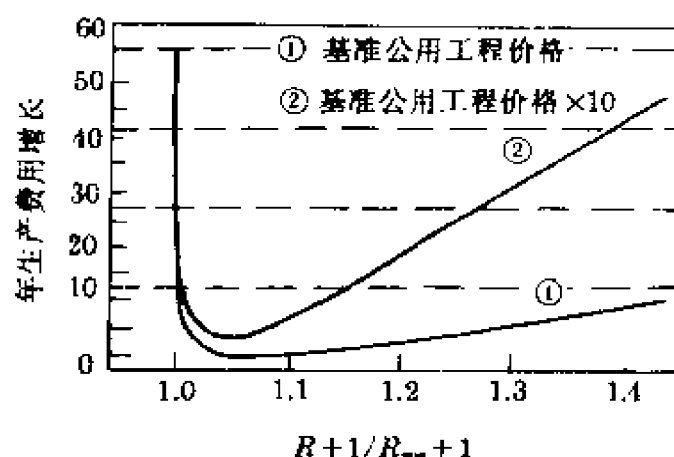


图 5-8 不同回流比和公用工程价格对年生产费用的影响

(本图引自参考文献[8])

(2) 若有回收的冷量或热量可利用,可取常规 R/R_{\min} 适宜范围的高限。

(3) 对于产品纯度极高的精密精馏,在 R 接近 R/R_{\min} 时将使所需板数急剧增加,因此应取较大的 R/R_{\min} 值。

(4) 对于气液平衡数据不够精确的系统要取较大的 R/R_{\min} 。

(5) 对于加上腐蚀性介质或附属设备的价格昂贵者,取较大的

R/R_{\min} 。

现列举几个工业塔的 R/R_{\min} 设计数据, 这些数据是设计人员经过参数优化后得到的结论。

表 5-8 几个工业实际精馏塔的 R/R_{\min}

精馏系数	乙烯精馏	丙烯精馏	前脱丙烷	脱丁烷
R_{\min}	3.93	8.03	0.28	1.01
R 设计	4.60	15.00	0.30	1.38
R 设计/ R_{\min}	1.17	1.86	1.07	1.37
实际板数	125	165	36	35
塔顶冷剂	232K 丙烯	冷却水	232K 丙烯	冷却水
塔釜热源	工艺气热量回收	废热利用	低压蒸汽	低压蒸汽

例 5-6 求苯与甲苯分离的最佳回流比^[9]

(1) 已知条件

- | | | |
|---------------|---------|--------------------------|
| ① 进料流量 F | | 318 kmol/h |
| ② 进料组成 | 苯 | 45 mol% |
| | 甲苯 | 55 mol% |
| ③ 进料温度 T_F | 饱和液体 | 367 K |
| ④ 塔压 | | 10 kPa |
| ⑤ 分离要求 | 塔顶馏出液含苯 | 92 mol% |
| | 釜液含苯 | 5 mol% |
| ⑥ 冷却水平均温度 | | 305 K |
| ⑦ 冷却水温升 | | 27.8 K |
| ⑧ 蒸汽压力 | | 413.6 kPa |
| | | (饱和温度为 418 K) |
| ⑨ 蒸汽冷凝热 | | 2.13×10^3 kJ/kg |
| ⑩ 空塔气速 | | 0.8 m/s |
| ⑪ 板效率 η | | 70% |
| ⑫ 年操作时 | | 8500 h |
| ⑬ 进出料热容 C_p | | 167 kJ(kmol · K) |

- ⑭ 苯和甲苯的蒸发潜热 ΔH $3.19 \times 10^4 \text{ kJ/kmol}$
- ⑮ 冷凝器传热系数 K_c $0.568 \text{ kJ}/(\text{m}^2 \cdot \text{s} \cdot \text{K})$
- ⑯ 再沸器传热系数 K_R $0.454 \text{ kJ}/(\text{m}^2 \cdot \text{s} \cdot \text{K})$
- ⑰ 冷凝器物料冷凝温度 T_1 354 K
- ⑱ 再沸器的物料温度 T_n 381 K

(2) 经济评价数据

- ① 蒸汽 10 元/吨
- ② 冷却水 0.067 元/吨
- ③ 筛板塔价格

直 径/m	元/板
1.5	6400
1.6	7300
1.7	8200
1.8	9200
1.9	10100
2.0	11000
2.1	12100
2.2	13000
2.3	13900
2.4	14800
2.5	15800
2.6	16700

④ 冷凝器价格(管壳式)

在传热面为 $70 \sim 150 \text{ m}^2$ 范围内冷凝器的价格可按下式计算:

$$Y = 29200 + 410X$$

式中 X ——冷凝器传热面, m^2 ,

Y ——冷凝器价格, 元。

⑤ 再沸器价格(管壳式)

在传热面为 $100 \sim 240 \text{ m}^2$ 范围内再沸器的价格可按下式计算:

$$Y = 57500 + 533X$$

式中 X ——再沸器传热面积, m^2 ,

Y ——再沸器价格, 元。

⑥ 仪表、管道和设备安装费用占设备费用的 60%。

⑦ 折旧率按每年 15% 计。

解: 计算不同回流比条件下的设备费用和操作费用, 进行平衡级计算, 得知在理论板数为 12 时, 所需的回流比为 1.5。先以回流比 1.5 为例算出全年的操作费用。

(1) 塔设备费用

设塔顶产品量为 D , 釜液为 B

$$318 \times 0.45 = D \times 0.92 + (318 - D) \times 0.05$$

$$D = 146.2 \text{ kmol/h}$$

$$B = 318 - 146 = 171.8 \text{ kmol/h}$$

$$\text{实际板数 } N = (12 - 1) / 0.7 = 16$$

$$\begin{aligned} \text{气体负荷 } V &= 146.2 \times (1 + 1.5) \\ &= 365 \text{ kmol/h} \end{aligned}$$

按理想气体计算气体体积, 然后求塔截面和塔径:

$$\text{塔截面} = 365 \times 22.4 \times \frac{367}{273} \times \frac{1}{3600} \times \frac{1}{0.8} = 3.80 \text{ m}^2$$

$$\text{塔径} = (3.8 \times 4 / \pi)^{1/2} = 2.2 \text{ m}$$

$$\text{每年塔设备费用} = 13000 \times 16 \times 1.6 \times 0.15 = 49920 \text{ 元}$$

(2) 冷凝器折旧费用

$$\begin{aligned} \text{冷凝器热负荷 } Q_D &= V \times \Delta H = 365 \times 3.19 \times 10^4 \\ &= 1.164 \times 10^7 \text{ kJ/h,} \end{aligned}$$

$$\text{冷凝器传热面} = \frac{Q_D}{K \Delta T} = \frac{1.164 \times 10^7}{0.568 \times 3600 \times (354 - 305)} = 116 \text{ m}^2$$

$$\begin{aligned} \text{每年冷凝器折旧费} &= (29200 + 410 \times 116) \times 1.6 \times 0.15 \\ &= 18420 \text{ 元} \end{aligned}$$

(3) 再沸器折旧费用

再沸器热负荷 Q_R 可自全塔热平衡求得, 热平衡计算以冷凝器温度为基准温度:

$$Q_R + F(T_F - T_1) \times C_P = Q_D + B(T_R - T_1) \times C_P$$

$$Q_R + 318 \times (367 - 354) \times 167 = 1.164 \times 10^7 + 171.8 \\ \times (381 - 354) \times 167$$

$$Q_B = 1.172 \times 10^7 \text{ kJ/h}$$

$$\text{传热面 } F = 1.172 \times 10^7 \div (418 - 381) \div 0.454 \div 3600 \\ = 194 \text{ m}^2$$

$$\text{每年再沸器折旧费 } (57500 + 533 \times 194) \times 1.6 \times 0.15 \\ = 38600 \text{ 元}$$

(4) 冷却水费用

$$\frac{365 \times (3.19 \times 10^4) \times 0.067 \times 8500}{27.8 \times 4.187 \times 1000} = 56900 \text{ 元/年}$$

(5) 蒸汽费用

$$\frac{1.172 \times 10^7}{2.13 \times 10^3 \times 10^3} \times 10 \times 8500 = 467700 \text{ 元/年}$$

(6) 在回流比为 1.5 条件下操作, 每年的总费用为:

$$49920 + 18420 + 38600 + 56900 + 467700 = 631500 \text{ 元}$$

再用同样方法算出不同回流比下的生产费用, 见表 5-9。

把表 5-9 计算结果绘制于图 5-9。

表 5-9^① 不同回流比的生产费用

回流 比 R	R/R_{\min}	实际板	塔径 m	设备折旧费			操 作 费		年生产费用
				塔	冷凝器	再沸器	冷却水	蒸汽	总计
1.14	1.00	∞	2.05	∞	15770	33040	18700	400300	∞
1.20	1.05	29	2.10	84200	16200	33400	50100	411600	595500
1.30	1.14	21	2.15	63260	16950	35500	53200	430300	598300
1.40	1.23	18	2.15	54240	17680	37060	54600	449000	612600
1.50	1.32	16	2.20	49920	18420	38600	56900	467700	631500
1.70	1.49	14	2.30	46700	13800	41700	61400	505100	673900
2.00	1.75	13	2.45	47700	22100	46320	68200	561200	745600

①表 5-9 参考了文献[9]的内容的数据, 但经济评价数据有变更, 其他数据也经过重新计算。

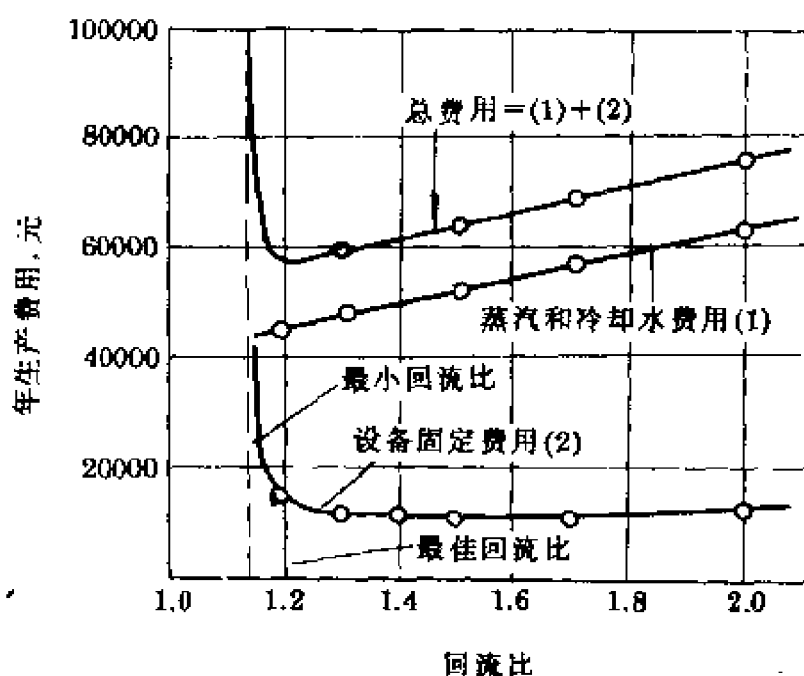


图 5-9 不同回流比时苯—甲苯分离的生产费用
(本图来源于参考文献[9],但费用数据经过重新计算)

由图可知最佳回流比在 1.2 左右,即 $R/R_{\min}=1.05$,但在设计时也可以取 $R=1.3$,即 $R/R_{\min}=1.14$,因为 $R=1.3$ 和 $R=1.2$ 的总生产费用仅相差 0.6%,若汽液平衡数据有误或控制失灵,取 $R/R_{\min}=1.05$ 就有可能使产品分离度达不到设计要求,以费用高出 0.6% 为代价,使生产更安全可靠和便于操作是值得的。

5.3.3 产品纯度或回收率

产品纯度通常是根据用户的要求决定的,例如本章例 5-2 所叙述的乙烯、丙烯纯度的要求。若用户对精馏塔顶、底产品的纯度都有要求,则产品的回收率也已确定;若用户仅指定一种产品的纯度,则设计人员可以根据经济分析决定产品的回收率。例如虽然用户对一种产品的纯度要求并不高,但当另一种产品的价格较高时,设计人员仍应考虑是否要提高产品的纯度,因为提高一种产品的纯度,意味着提高另一种产品的回收率。正确选定产品纯度有重大的经济意义。

例 5-7 试选择苯与甲苯分离的产品纯度,本例未说明的已

知条件和经济评价数据与例 5-6 相同。

解: 设塔顶苯的浓度不变, 塔釜苯的浓度降低到 2%, 因塔顶组成不变, 故回流比不变, 精馏段板数不变, 仅增加提馏段板数。由于塔顶产品数量增加, 相应的冷凝器、再沸器的热负荷和所需传热面均增加。为了简化起见, 假设塔设备的投资变化仅考虑板数的变化, 不考虑由于负荷的变化而可能引起塔径的变化。

设回流比为 1.3, 苯的价格为 700 元/吨, 甲苯的价格为 400 元/吨, 因此每多产 1 吨苯增加收益 300 元。

当塔釜含苯 2% 时塔顶的馏出液量 D 为:

$$318 \times 0.45 = D \times 0.92 + (318 - D) \times 0.02$$

由此解得: $D = 151.93 \text{ kmol/h}$

比原方案多得苯: $(151.93 - 146.2) \times 78 = 447 \text{ kg/h}$

每年增加收入

$$0.447 \times 300 \times 8500 = 1139900 \text{ 元}$$

原方案冷凝器, 再沸器的设备折旧费和操作费为

$$18400 + 38600 + 59600 + 467700 = 584300 \text{ 元}$$

修改后费用增加 $584300 \times \left(\frac{151.93}{146.2} - 1 \right) = 584300 \times 0.039 = 22900 \text{ 元}。$

根据平衡级计算, 增加的塔板数为 3 块, 增加的塔设备费用

$$49920 \times (3/16) = 9400 \text{ 元}$$

故净增加效益 $1,139,900 - 22900 - 9400 = 1,107,600 \text{ 元}$

表 5-10 列出了各种苯回收率下的经济分析。

表 5-10 不同苯回收率的经济分析表^①

釜液中 苯浓度	苯产量 kmol/h	增加 板数	塔设备费 用变化增加	再沸器、冷凝器折 旧费和操作费用增加	产品收 入增加	净得 益增加
0.05	146.20	0	0	0	0	0
0.02	151.93	3	9400	22900	1139900	1107600
0.01	153.76	4	15800	30200	1504500	1458500
0.005	154.66	6	23700	33800	1683000	1625500

续表

釜液中 苯浓度	苯产量 kmol/h	增加 板数	塔设备费 用变化增加	再沸器、冷凝器折 旧费和操作费用增加	产品收 入增加	净得 益增加
0.002	155.19	9	35600	35900	1787600	1716100
0.001	155.37	10	39500	36600	1823300	1747200
0.0005	155.46	13	51400	37000	1841100	1752700
0.0002	155.51	16	63300	37200	1851300	1750850

①表 5-10 参考文献[9]的内容和数据,但经济评价数据有变更,其他数据也经过重新计算。

由此得知,当釜液苯的浓度从 5%降低到 0.05%~0.1%时,每年增加收入 175 万元左右,远远超过减少回流比所得利益。

5.3.4 进料的热状态

进料的热状态指进料的 q 值, q 的定义为使每千摩尔进料变成饱和蒸汽所需的热量与每千摩尔进料的汽化潜热之比。当进料为过冷液体时, $q>1$,若为过热蒸汽, $q<0$;除此以外, $1\geq q\geq 0$,其数值等于液相分率。当 q 值增大时,冷凝器负荷减少而再沸器负荷增加。因此,精馏的操作费用发生变化,但变化的幅度和趋势随塔顶出料量 D 与进料量 F 的比值 D/F 和精馏塔顶、底温度的不同而不同,当把塔顶用冷却水冷凝,塔釜用低压蒸汽加热称为高温精馏;塔顶用 173K 液态乙烯蒸发制冷,塔釜用 273K 丙烯蒸汽加热称为低温精馏,不同精馏温度和 D/F 值下 q 值变化量对操作费用的影响见图 5-10。

由图 5-10 可以得出如下两点结论。

(1)对于低温精馏,不论 D/F 值如何,均以采用较高的 q 值为经济。

(2)对于高温精馏,当 D/F 值大时宜采用较小的 q 值;当 D/F 值较小时宜采用 q 值较大的汽液相混合进料。

以上结论是分析精馏塔系本身操作费用所得出的,若进料状态和上述要求不符,例如高温精馏而 q 值较大,低温精馏而 q 值较

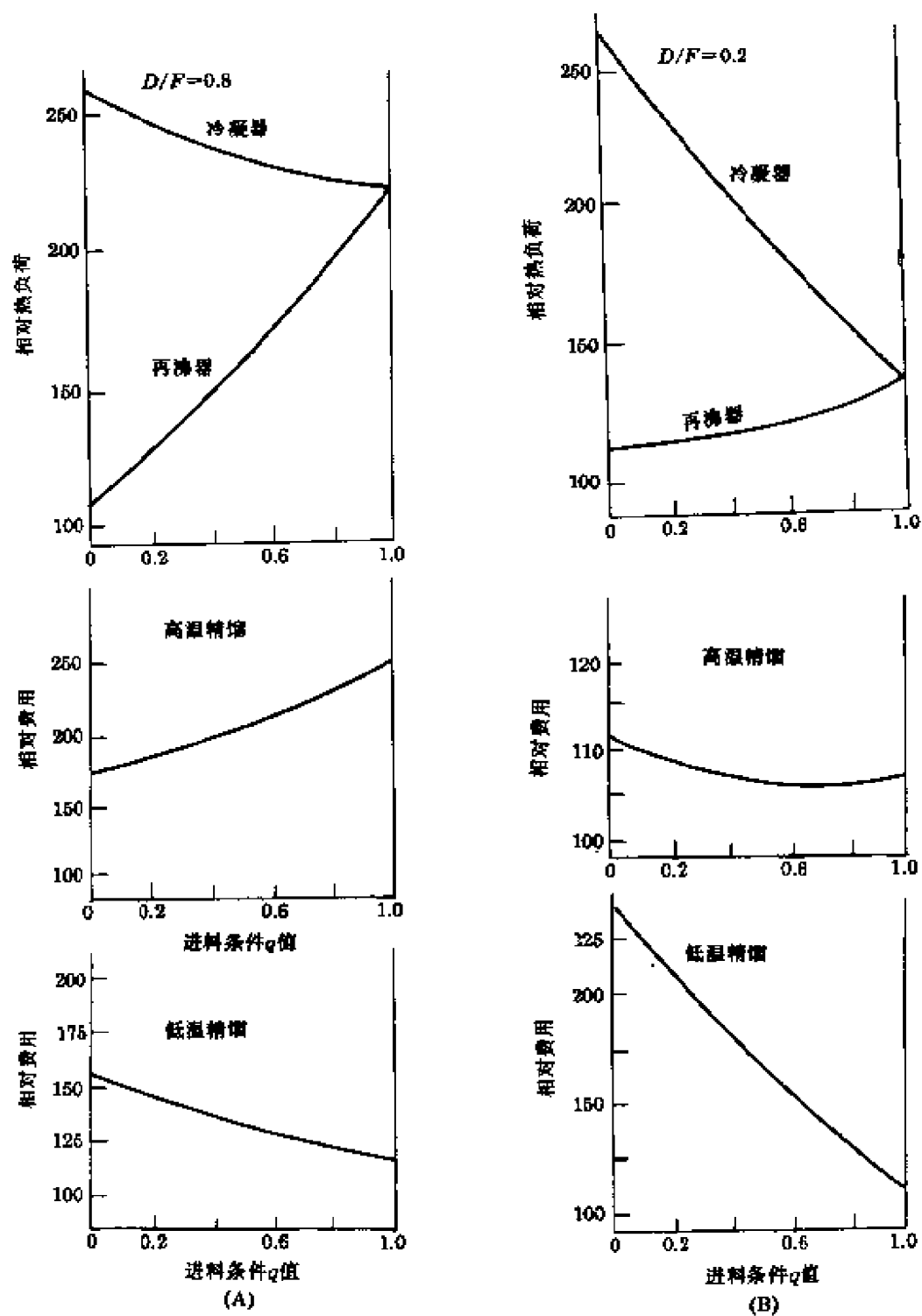


图 5-10 进料状态(q 值)对操作费用的影响
(本图引自参考文献[13])

小,在精馏塔之前是否应加热或冷却则决定于系统的条件,可用以下两点原则进行定性判断:

(1)进料预热仅在这种情况下才可能是有利的,即进料预热的热源温度比再沸器的热源温度低,可能节省高温热源,但这时要相应增加提馏段板数。

(2)当塔顶冷凝器用冷冻,进料冷却有冷冻等级比较低的冷量可利用时,进料预冷才可能是有利的。

例 5-8 设有一个已建成的脱乙烷塔,其进料组成和流量如下:

流量	2276 kmol/h			
组成	CH ₄	0.048%	C ₂ H ₂	0.295%
	C ₂ H ₄	61.53%	C ₂ H ₆	16.16%
	C ₃ H ₄	0.262%	C ₃ H ₆	20.99%
	C ₃ H ₈	0.702%	C ₄ H ₆	0.018%
	C ₄ H ₈	0.001%		

设脱乙烷塔压力为 2.8MPa,轻关键组分乙烷的回收率为 99.98%,重关键组分丙烯的回收率为 98.18%。塔顶温度为 262K,用 252K 丙烯作为冷剂;塔釜温度 340K,用 353K 热水进行加热。进脱乙烷塔的进料温度为 272K(泡点),如果将进料部分汽化,则能利用汽化所吸收的热量制冷,假设进料预热器设备折旧对年生产费用的影响可略去不计,试求最适宜的进料温度。

解:由于该脱乙烷塔已建成,故操作参数 q 的优化只能在固定塔板数下进行。在顶底分离度不变的条件下,提高进料温度将增加所需的回流量,但可减少塔釜加热量。

(1)假设进料冷量回收在进料温度低于 283K 时是回收 273K 的冷量,高于 283K 时是回收 293K 的冷量,冷凝器需要 250K 冷量。前者每 10^6kJ 冷量耗功 $84.1\text{kW}\cdot\text{h}$ 和 $24\text{kW}\cdot\text{h}$,后者每 10^6kJ 耗功 $135.2\text{kW}\cdot\text{h}$,每 $\text{kW}\cdot\text{h}$ 功耗的价格为 0.4 元。353K 热水为废热回收,成本为 8 元/ 10^6kJ 。

(2)不同进料温度下的汽化率和回收的冷量如下:

温度 K	汽化率	回收冷量 kJ/h
272	0	0
276	0.3518	2.962×10^6
278	0.4916	4.192×10^6
280	0.6135	5.299×10^6
283	0.7736	6.808×10^6
288	1.0	9.055×10^6

(3)进行平衡级计算,得到不同进料温度下的冷凝器和再沸器负荷如下:

进料温度 K	冷凝器负荷 10^6 kJ/h	再沸器负荷 10^6 kJ/h
272	6.865	13.621
276	7.962	11.758
278	8.518	11.084
280	9.663	10.524
283	9.875	9.821
288	11.26	8.970

若以泡点进料为基准,各种进料温度的生产费用变化如下:

进 料 温 度 K 各项生产费用变化	276	278	280	283	288
可收冷量, 10^6 kJ	2.962	4.192	5.229	6.808	9.055
相当于功耗, $\text{kW} \cdot \text{h}$	249.1	352.5	445.6	572.5	572.5 + 60.7
生产费用减少,元	99.64	141.0	178.2	229.0	253.3
冷凝器负荷增加, 10^6 kJ	1.097	1.653	2.193	3.010	4.395
相当于功耗, $\text{kW} \cdot \text{h}$	143.3	223.5	297.2	407.0	574.2
生产费用增加,元	59.3	89.4	118.9	162.8	237.7
再沸器负荷减少, 10^6 kJ	1.863	2.537	3.097	3.797	4.651
生产费用减少,元/时	14.9	20.3	24.8	30.4	37.2
总计生产费用变化,元	-55.2	-71.9	-84.1	-96.6	-52.8

因此,最适宜的进口温度为 283K。

5.4 塔型选择和实际板数的确定

塔设备设计包括下列内容:

- (1)平衡级计算,
- (2)塔设备选型,
- (3)实际板数的确定,
- (4)流体力学计算。

现已有大量著作介绍 1、4 两项各种计算方法,评述这些计算方法将超出本课程的范围,本节仅介绍塔型选择的原则和确定实际板数。

5.4.1 塔型选择

经过平衡级数计算得到了所需的板数、气液相负荷的组成后,必须决定究竟是用板式塔或是填料塔来实现所需要的分离。

5.4.1.1 板式塔的适用场合

- (1)对直径大于 800mm 的板式塔其造价比填料塔便宜。
- (2)和常规填料塔相比,泡罩塔可用于液体负荷特别小的情况。

因为填料塔要求表面充分润湿,若喷淋密度过小将影响效率。Morris 和 Jackson^[16]曾经给出 3 寸(76.2mm)以下乱堆拉西环的最小润湿率为 $0.079\text{m}^3/\text{h} \cdot \text{m}^2$,因此对 1 英寸(25.4mm)、2 英寸(50.8mm)、3 英寸(76.2mm)的瓷质拉西环所需的最小喷淋密度为 15、7.3 和 $6\text{m}^3/(\text{m}^2 \cdot \text{h})$,低于此值不宜采用拉西环填料。板式塔尤其是穿流塔板可以用于液体负荷特别大的情况。

从填料泛点和压降的通用关联图可以看出,若液体喷淋密度特别大,例如 $100 \sim 250\text{m}^3/(\text{m}^2 \cdot \text{h})$,泛点车速急剧下降,造成塔径增大,而塔径增大又将使 HETP 增加,因此对液体负荷很大或很小的塔不宜采用常规填料。

(3)有些物料在精馏过程中易聚合结焦而生成胶状物质,需定期清理,对这种物系只能使用板式塔。

(4)为了减少精馏的能耗,愈来愈多的精馏塔采用多股进料、侧线出线、设置中间再沸器或冷凝器、在塔内设置加热或冷却热交换管等。对于这些情况,若物料进出口过多而使用填料,要有较多的液体收集装置或再分布装置,造成结构比较复杂,在这种情况下用板式塔比较适宜。

(5)板式塔的持液量较填料塔大,因此当在精馏过程有化学反应发生而反应速度较慢需要较长的停留时间时,板式塔较适宜。

(6)泡罩塔、浮阀塔、筛板塔的设计资料比较齐全而可靠,因此可以取较小的安全系数。

5.4.1.2 填料塔的适用场合

在五六十世纪以前,使用的填料主要是瓷质的拉西环,因此当浮阀塔、筛板塔出现后,与拉西环相比,以负荷大、大直径塔造价低、效率高等显著优点使其不仅在新建工厂中被大量采用,而且部分取代了已有老装置的填料塔以提高产量和效率。但是在70年代各种新型填料如矩鞍形填料(Intalox)及各种规整填料问世以来,新型填料以能力大、效率高、阻力低等重大优点,改变了人们对填料的评价。填料塔主要优点有以下七点。

(1)填料塔的阻力低,因而特别适用于真空精馏和热泵系统。

新型填料例如 Intalox 对于发泡系统以单位高度填料的阻力作为决定气速上限的量度,采用的数值是:

高发泡系统 $\Delta p \leq 20\text{mm}$ 水柱(196Pa)/m 填料

中发泡系统 $\Delta p \leq 33\text{mm}$ 水柱(324Pa)/m 填料

低发泡系统 $\Delta p \leq 40\text{mm}$ 水柱(392Pa)/m 填料

在实际使用时常比上述极限值要小,例如乙烯装置脱甲烷塔在低压情况下为高发泡系统,设计值取阻力等于4~10mm 水柱(39~98Pa)/m 填料。此外,某公司曾测定了物料表面张力,气体粘度很不相同的各种物系,例如异辛烷-甲苯,环己酮-环己醇,环己烷-正辛烷,丙酮-水,邻二甲苯-对二甲苯,乙二醇-水,乙二醇-二

乙二醇等系统,得到表 5-11 所列 HETP。

表 5-11^① Intalox 填料的 HETP

填料种类	HETP
Intalox # 25	355~485mm
# 40	460~610mm
# 50	560~740mm
# 70	790~1060mm

将表 5-11 所列 HETP 数据和单位高度填料阻力数据结合起来,可以得到每块理论板的阻力。见表 5-12。

表 5-12^① Intalox 填料每块理论板的阻力

填料种类	阻 力
# 25	8~10mm
# 40	10~12mm
# 50	12~15mm
# 70	16~22mm

对于大多数浮阀塔、筛板塔而言,每块实际板的阻力在 60~160mm。板效率在 70%~90%,因此每块理论板的阻力约为 80~180mm。和 #50 Intalox 填料相比,高出 6~12 倍,因而在真空精馏系统和热泵精馏系统使用填料塔有重大经济价值。

(2) 填料塔持液量少,一般情况下较板式塔少 25% 以上,因而适用于下述三种场合:

- ① 要求控制特别灵敏的系统,
- ② 热敏物质,减少停留时间从而减少结焦。聚合或热降解,
- ③ 间歇精馏系统,可以减少物料排放量。

(3) 适用于高发泡系统,因填料对泡沫有限制和破碎的作用。

(4) 适用于腐蚀性介质,可以避免使用大量耐腐蚀的塔内件材料。

(5) 高效填料每块理论板所需高度较一般的板式塔低。

对于板式塔而言,需要的板间距为 450~600mm 左右。若板效率为 0.7,则每块理论板的高度为 650~860mm,和 #10 Intalox

① 表 5-11、表 5-12 引自 Norton 填料公司(美国)资料。

相比,每块理论板的高度高出 40%,但需考虑填料塔为了液体分布良好每隔 6~8m 填料或 14 块理论板需设置液体再分布器,需扣除相应的高度。

(6)高效填料在不少情况下生产能力比板式塔大。

填料重要的特性,填充因子 ϕ ,标志该种填料的生产能力, ϕ 的开方和生产能力成反比。表 5-13 列出了数种填料的填充因子可作参考。

表 5-13^① 几种填料的填充因子 ϕ 1/m

填料种类	填 料 尺 寸(吋)		
	1(25.4mm)	1.5(39.4mm)	2(50.1mm)
陶瓷拉西环	508	312	213
金属拉西环	150	272	187
金属鲍尔环	158	108	66
金属 intalox	135	82	52.5

①表 5-13 引自 Norton 填料公司(美国)资料。

由此可见,Intalox 的生产能力比陶瓷拉西环大一倍左右,在不少情况下,它的能力比板式塔也大。

(7)新型填料能适用于大塔径和喷淋密度低的场合。

对于拉西环,当液体从上向下流动时有严重的偏流现象,分布不均匀。为了从上到下保持填料表面充分润湿,必须有较大的喷淋密度,而且其 HETP 随着塔径的增大而迅速增加。因此,拉西环填料不适用喷淋密度低和塔径大的场合。但是新型填料,只要初次液体分布是均匀的,从上向下流动时就能保持下层填料的液体分布均匀,因而降低了对喷淋密度的要求;而且由于塔径加大引起流体分布不均而传质传热效率下降的问题也得到改善,因此可适用于大塔径和喷淋密度低的场合。已有工业实践经验的喷淋密度可降低到 $1\text{m}^3/(\text{m}^2 \cdot \text{h})$,塔径最大到 14m。

从上述板式塔和填料塔的适用范围可以得到这样一个结论:除了某些特殊要求的精馏系统必须使用板式塔或填料外,对于可以使用板式塔也能使用填料塔的场所,一般对新建工厂选择板式

塔投资较小,但是对于不少老厂的技术改造,采用新型填料具有生产能力大、效率高、阻力低等突出优点,能达到去除瓶颈、增加生产能力或降低能耗、提高产品回收率的目的,所产生的经济效益完全能补偿所需的投资。因此,老厂改造采用新型填料这个趋势将逐渐上升。

5.4.2 平衡级计算结果分析^[15]

当平衡级计算结果完成时能得到逐板的气液相负荷,组成和温度曲线。由于平衡级计算多数是采用核算型的,在初次计算时所设定的参数不一定合适,我们可以分析板数-组成曲线和板数-温度曲线的形状,得到下述有用的结论。

(1)从板数-组成曲线的形状可以判断板数、进料板位置、回流比、顶底出料量是否合适。为简要地说明问题,先以二元精馏的曲线为例,图 5-11(A)~(F)表示了各种情况下的组成-板数曲线。

图 5-11(A)表示了一切参数均确定很正确的操作曲线,图 5-11(B)表示回流比太小,因而进料板的附近组成几乎不改变,相当于 McCabe-Thiele 图上夹紧的情况。

图 5-11(C)表示回流比并不小,进料板的位置也正确,但顶底的组成不合格,这是由于板数太少之故。

图 5-11(D)表示回流比太大,顶底的分离度已超过原设计要求。

图 5-11(E)表示进料板的位置不正确,因而进料板板上好多块板的组成不发生变化,而进料板以下组成急剧变化。如果把进料板位置往上移动几块,就会得到进料板上下斜率变化不大,比较光滑的曲线。

图 5-11(F)表示二物料不平衡,塔顶馏出物抽得过多以致于重组分的浓度上升而使塔顶轻组分浓度下降。

从以上图形可以得到以下几点结论。

- ①若进料板两侧组分的浓度变化很小表示回流比太低;
若进料板两侧组分的浓度变化很大表示回流比过高。

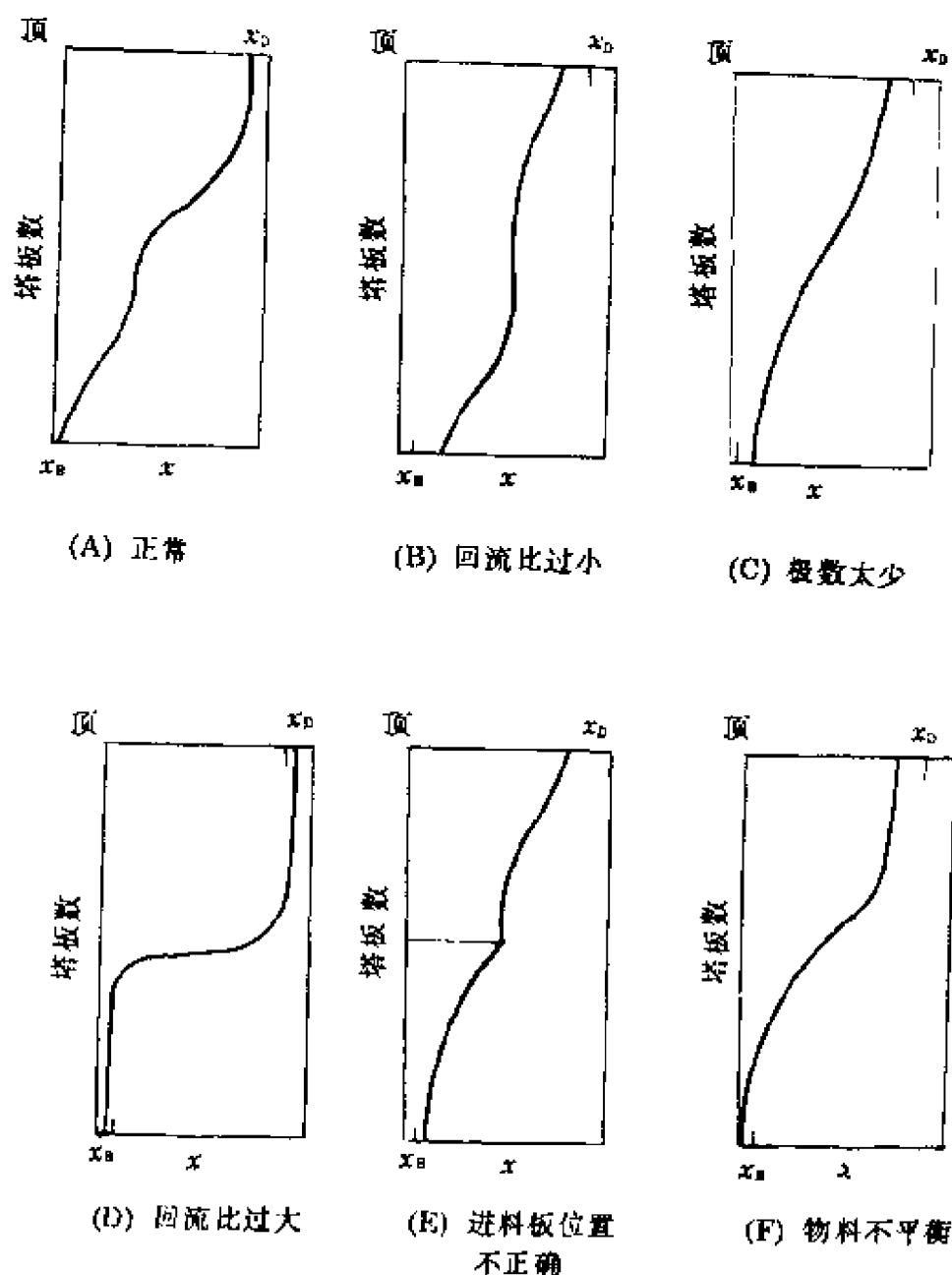


图 5-11 三元精馏组成-板数曲线

(本图引自参考文献[15])

②若在进料板一侧的关键组分的浓度没有变化,另一侧变化剧烈则表示进料位置不合适,应向浓度不变化的一侧移动。

③如果曲线形状正常而塔的一端超过预定分离度,另一端达不到分离度,则可能由于不正确的物料平衡。即物料的分离要求和馏出量不匹配所致。

④如果从曲线形状判断回流比、进料板位置都合适,而塔顶底分离度不合格,则是板数太少。

图 5-11B~F 所表示的曲线都只表示一种不正确的参数的影响,但实际上有可能几个问题同时存在,这就是使得问题的诊断变得复杂,但是诊断的基础都是对上述特征的认识和精馏过程的理解。

对于多元精馏,图 5-11 所表达的信息的原则同样是适用的,但是有两点不同:

第一,由于有非关键组分存在,板数组成曲线与二元系统的形状不完全相同,可分两种情况:一种是关键组分相邻接,并无相对挥发度在轻、重关键之间的组份,这种系统的曲线见图 5-12A。图中重关键组分在塔釜附近由上而下随着板数的增加而浓度降低,这是因为有重组分存在,重组分的相对挥发较重关键组分小,因而提浓速度较重关键组分快,造成重关键组分浓度降低。同理,轻关键组分在塔顶部的浓度有所下降。当轻、重组分含量很少或与相应的轻、重关键相对挥发度差不大时,这种现象并不显著。

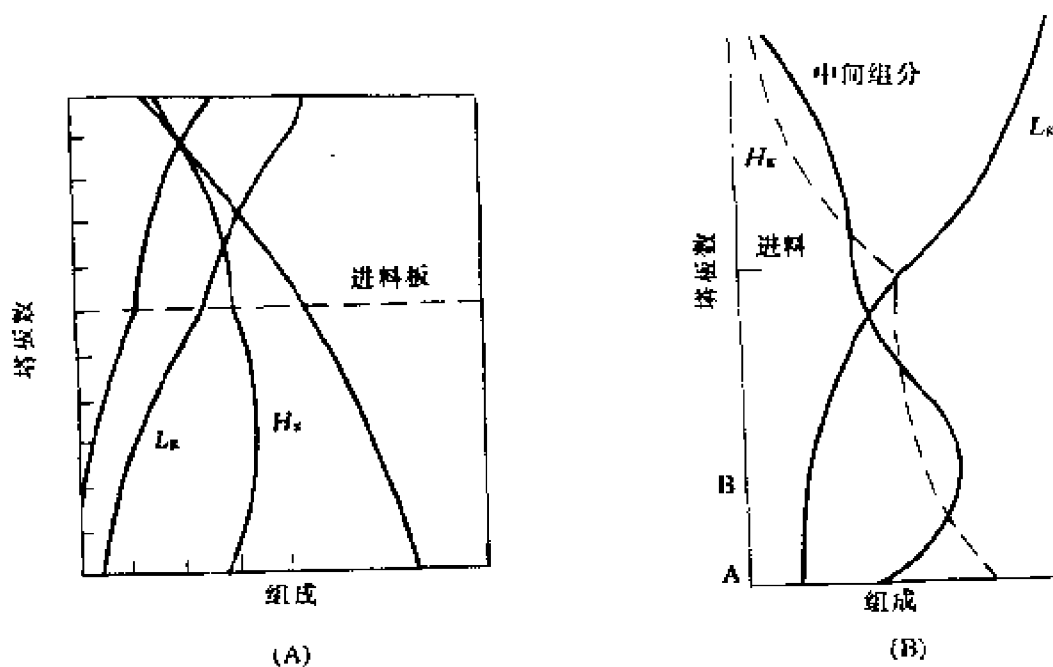


图 5-12 多元精馏板数-组成曲线

(本图引自参考文献[15])

另有一种情况为图 5-12B 所示的三元精馏的板数-组成曲线, 非关键组分的相对挥发度介于轻重关键组分之间。

对于中间组分在顶底的分配无要求的多元精馏可按照常规的方法进行设计, 如果对非关键组分也有顶底分配要求, 这时塔的设计要同时满足三个组分的分离要求, 需进行多次计算, 调节参数, 直到满足要求为止, 这时实际上已失去了轻重关键原来的含义。

第二, 和二元精馏不一样, 由于组分数多, 进料的组成不可能和某块塔板完全相同, 这时应取与进料轻重关键组分之比相同的那块板作为进料板。

(2) 从温度-板数曲线可以知道是否适合采用温度控制以及灵敏板的位置。

确定精馏塔的控制方案是塔设计的一个重要组成部分。塔控制的首要任务是保证顶底产品质量合格。分析控制本来是最精确和直接的方法, 但是分析控制需要工业色谱, 不仅价格昂贵而且对于很多物质没有现成的工业色谱可用, 或分析频率较低, 不适于控制用。在实际工业生产中, 只有少数重要而不能用其他控制取代之处才用分析控制。在精馏塔中, 物料处于气液相平衡的状态, 组成和温度有一定的关系, 因此, 对于大部分精馏塔可以用温度控制代替分析控制。

要确定温度控制方案, 必须找到合适的温度控制点即灵敏板, 这一块板对浓度变化的温度响应有足够的灵敏度, 但是也不能过于灵敏或者浓度与温度不成线性关系, 否则可能造成控制不稳定。

图 5-13(A) 表示某塔的板数-温度曲线, 曲线表明该塔很适宜采用温度控制方案。适宜的控制点是 x 。 x 点有足够的灵敏度, 而且在相当宽的范围内其温度与组成的变化呈线性关系。不宜取 y 点为控制点, 因为该点温度与组成的关系过于敏感, 且不呈线性关系。

图 5-13(B) 表示一个板数较多, 有相当压力降的精馏塔的温度板数曲线, 这种类型的塔不适宜采用某块板的温度控制, 因为这样的塔其负荷变化所引起的塔板温度变化比组成的变化更为显

著。

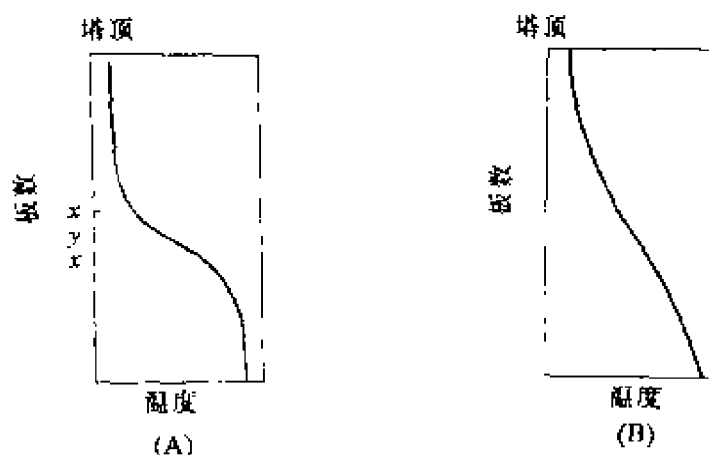


图 5-13^① 板数-温度曲线

5.4.3 理论板数的决定

平衡级计算所得到理论板数是在某一稳定条件下的计算结果,当有某种干扰产生时就有可能使产品不合格,为了使设计可靠,在确定理论板数时要考虑下列诸因素。

5.4.3.1 系统各参数的波动

(1)实际生产过程的各种参数常有波动,当实际值与设定值的偏差超出预定值时控制仪表开始动作,参数的波动范围取决于传感器的灵敏度和系统的调节质量,为了使参数波动时产品仍能合格需要加大理论板数。

(2)进料的组成有可能发生变化。

(3)产量变化。

当产量变化时系统的阻力相应变化,因此,温度测量点的压力与原设计值不相同。例如,当产量降低一半时塔的阻力只有原来阻力的 25%左右,若控制点的设定值不变,重组分含量将比原设计值上升。因此,该种工况下所需要的板数比正常操作时大。

^① 图 5-13 引自参数献[15]。

5.4.3.2 数据的精确性

所有的理论板计算都是基于一定的汽液平衡关系式,这些关系式的参数都是由实验值回归所得,数据的测量及处理都必然有一定程度的误差。因此,由此计算得到的理论板数也会有一定的误差。

Rose^[15]认为对于比较可靠的汽液平衡数据可以取 10% 安全因素,对于系统的波动,可以考虑增加三块板。因此,设计所取的理论板应为平衡级计算所需理论板数的 1.1 倍再加三块板。

5.4.4 实际板数的决定^[1]

理论板是指离开每一块塔板的汽液相都处于平衡状态所需要的板数,但实际上由于下列三个原因使离开塔板的汽液相组成偏离平衡状态。

- (1)质量、热量传递的限制,使汽液相没有达到平衡,
- (2)汽相和液相不完全分离,例如雾沫夹带,
- (3)流向配置和返混。

实际板数 N 等于理论板数 N_T 除以板数效率 E_0 。

$$N = N_T / E_0$$

因此求实际板数就是求板效率问题。

板效率有几种定义,如点效率,默弗里板效率,湿板效率和全塔效率。工程设计上为了使用的方便,通常是指全塔效率 E_0 。

求取板效率有下述两种方法:

(1)通过实验或测定工业生产数据确定板效率,如果测定方法正确,这种数据是最可靠的。

(2)通过已有的关联式求取。

计算板效率有两种模型,即经验模型和机理模型:

(1)经验模型。Drickamer 和 Bracford 根据 84 个烃类分离的精馏塔数据把板效率关连成进料状态下物料粘度的函数,板效率随着进料粘度的增加而下降。

O'Connell 修正了 Drickamer 和 Bracford 的关联式,把全塔

效率关联成进塔料粘度与关键组分相对挥发度之积的函数,粘度和相对挥发度都取塔顶底算术平均温度下的值。随着相对挥发度增加板效率下降,这现象可能是反映了液相阻力在传质总阻力中的比重增加。O'Connell 式可用于烃类和相对挥发度较高的非烃系统。

(2)机理模型。King 根据美国化学工程师协会(AIChE)计算板效率的模型,总结了一套估算板效率的程序,这种机理模型能帮助我们更好地了解影响板效率的各种因素。

虽然 AIChE 法仔细地考虑了影响效率的各种因素,但并不是所有预测的板效率都符合实测数据。因此,如有实测数据作为计算结果的校正,其可靠性就更大些。例如某物系精馏塔实测板效率为A,现欲设计一个物系相同但规模和工艺条件不同的精馏塔,这时可用 AIChE 法计算出两种情况下的板效率,然后再与已知实测数据进行比较和校正。

5.5 分离过程的节能措施

分离过程的设计目标是在保证产品质量和收率的前提下尽量节省能量和投资。从表 5-9 所列数据可以得出结论:在一般情况下,能耗比设备投资对产品成本的影响更大。因此,分离方案的优劣可以用能耗的相对大小作初步评价。

不同温度等级的能量其单位能量的价值是不相同的。在作理论分析时应计算焓,而在工业实际应用时,可根据表 5-3 所列不同温度冷量的功率消耗,单位轴功率的价格和表 2-23 所列公用工程参考价格,将能耗换算成金钱或功耗后进行方案比较。

5.5.1 多股进料^[11]

物料的混合是一个能自动进行的过程,分离则必须外加能量才能进行。多股进料等于在进塔前已把原料分成几种组成不同的物料,已有一定程度的分离,故比没有经过初步分离的进料要节省

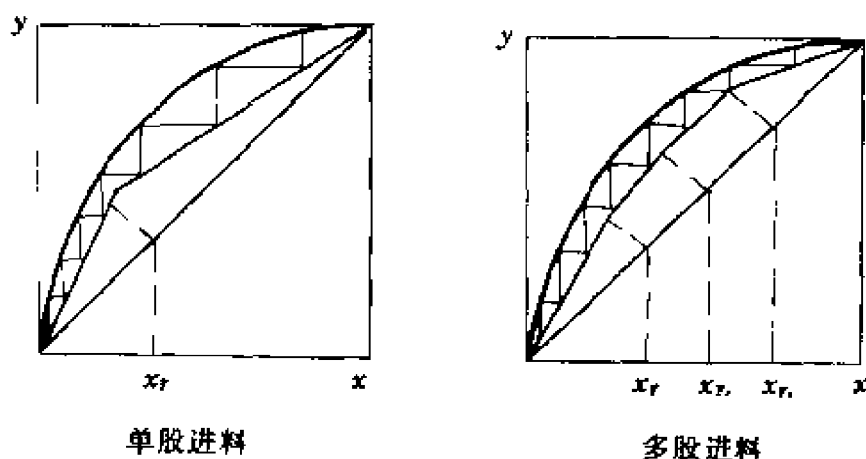


图 5-14 精馏塔 McCabe-Thiele 图

能量。

从热力学的基本概念出发可以得出结论:要提高精馏过程的热力学效率,必须减少各平衡级传质和传热的推动力,即应使操作线尽量与平衡线靠近。当由单股进料改成多股进料后,操作线与平衡线的距离缩短,图 5-16 清楚地表明了这点,因此减少了焓(有效能)损失。但问题在于从一股进料变成多股进料时所消耗的能量应小于精馏相应节约的能量。当进料是多组分宽沸点混合物时有可能符合此要求。

例 5 9 某脱甲烷塔的进料温度为 255K,组成如下

组分	H ₂	CH ₄	C ₂ H ₄	C ₂ H ₆	C ₃ H ₆	C ₃ H ₈	C ₄ H ₁₀
mol %	14.43	25.33	37.21	9.75	12.82	0.42	0.44

脱甲烷的操作压力为 3.15MPa,请确定其进料状态。

解:据本章 5.3.4 进料热状态一节所述,低温精馏进料的 q 值以接近 1 为宜,经计算得知在 255K 时进料的 q 值为 0.3183,因此应进一步冷却,首先优化进料温度,再作单股与多股进料的比较。

当进料从 255K 冷却到不同温度时所需的冷量和在该进料温度下脱甲烷塔冷凝器和再沸器的负荷及功耗见表 5-14。所有比较都是在相同的分离度要求下进行的,即塔顶汽相出料中乙烯含量等于 0.2mol%,釜液中甲烷含量等于 0.05mol%。

由表 5-14 的数据可见,在单股进料时温度以 223K 为最经济。

表 5-14 不同进料温度的脱甲烷塔功耗比较

进料温度 K			255	238	223	203
进料 q 值			0.3183	0.5268	0.6516	0.7462
进 料 冷 却	I 级 冷 却	冷却温度 K	255	238	238	238
		冷剂温度 K		233	233	233
		热负荷 10^6 kJ/h	0	4.173	4.173	4.173
		功 耗 kW·h		857	857	857
	II 级 冷 却	冷却温度 K			223	223
		冷剂温度 K			218	218
		热负荷 10^6 kJ			2.901	2.901
		功 耗 kW·h			761	761
	III 级 冷 却	冷却温度 K				203
		冷剂温度 K				198
		热负荷 10^6 kJ				2.993
		功 耗 kW·h				973
总功耗 kW·h		0	857	1618	2591	
冷① 凝 器	热负荷 10^6 kJ	9.657	6.120	4.065	2.411	
	功 耗 kW·h	4452	2821	1874	1111	
再② 沸 器	热负荷 10^6 kJ/h	5.458	6.137	6.982	8.322	
	功 耗 kW·h	-147	-165	-188	-224	
总 功 耗 kW·h			4305	3513	3304	3478

①冷凝温度 175K,冷剂温度为 172K,每 10^6 kJ 冷量耗电 461kW·h。

②再沸器温度为 273.6K,故再沸器的热负荷可作为冷量使用,每 10^6 kJ 热负荷回收功 27kW·h。

若在冷却过程中将汽液两相分离,然后将汽相进一步冷却成为多股进料,则所需冷凝器和再沸器的负荷将有变化,脱甲烷塔分离所需的功耗见表 5-15,进料冷却流程见图 5-15。

表 5-15 脱甲烷塔多股进料功耗比较

进料股数	进 料				冷 凝 器		再 沸 器		总功耗 kW·h
	冷却 温度, K	冷剂 温度, K	热负荷 10 ⁶ kJ/h	功耗 kW·h	热负荷 10 ⁶ kJ/h	功耗 kW·h	热负荷 10 ⁶ kJ/h	功耗 kW·h	
一	223	218	7.074	1610	4.065	1874	6.932	-188	3304
二	238	233	4.173	357	4.743	2136	6.187	-167	3251
	223	218	1.427	374					
三	238	233	4.173	857	3.181	1466	6.216	-167	3045
	223	218	1.427	374					
	203	198	1.586	515					

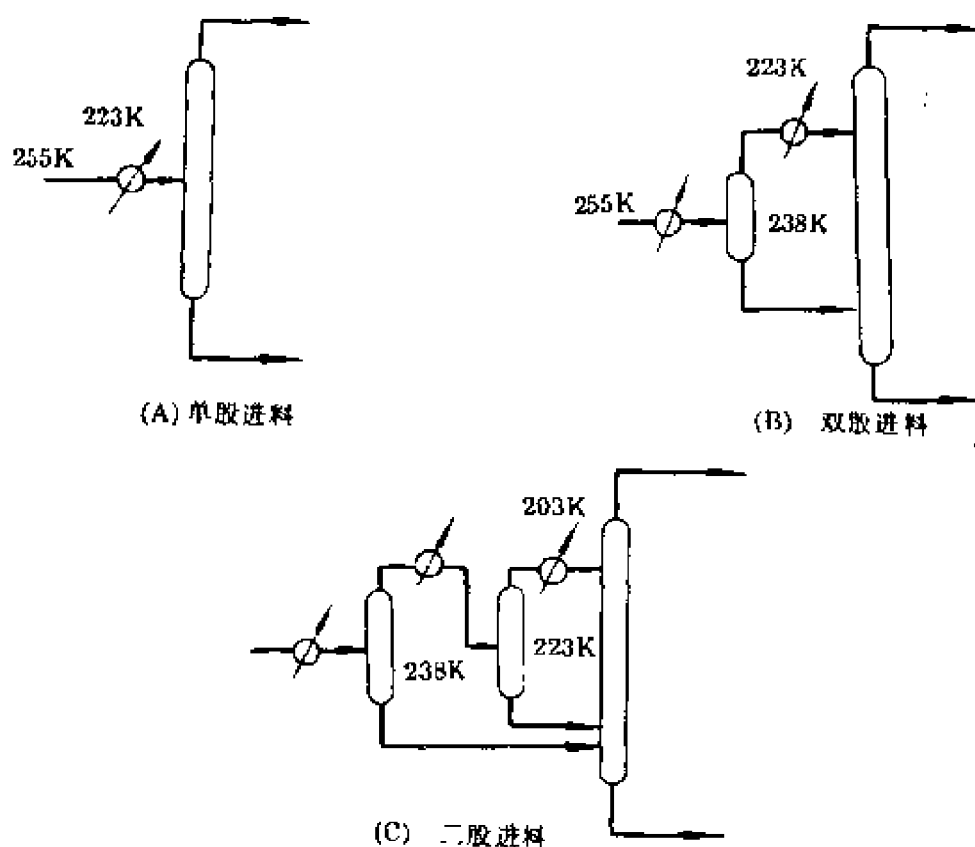


图 5-15 脱甲烷塔进料冷却示意图

由此可见,经过进料温度的优化和将单股进料改为三股进料,脱甲烷的能量消耗从 $4305\text{kW} \cdot \text{h}$ 降为 $3045\text{kW} \cdot \text{h}$,节省功耗 29.3% 。

5.5.2 侧线塔

在进行精馏塔系的流程设计时,开始阶段一般都按常规塔组织流程。当分离序列已经确定,若两个相邻的常规塔分离三个组分 A、B、C,其中某一个组分的含量很少或者 A、B、C 之间的切割要求并不严格,这时应研究能否用侧线塔代替两个相邻的常规塔,以节省基建投资和操作费用。Douglas^[14]认为:若第一个塔是 A/BC 切割,当采用侧线出料时,侧线板的位置在进料板之下;若 AB/C 切割,则侧线板位置在进料板之上。

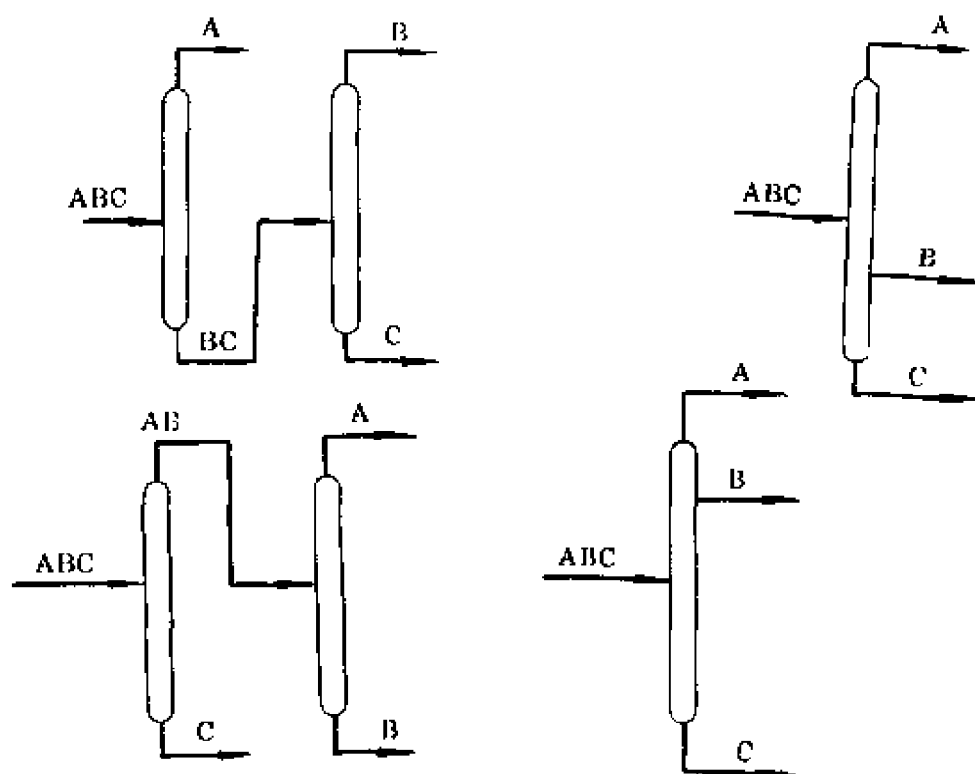


图 5-16 侧线板的位置

当侧线位置在进料板之上,主要产品是 B,并且相对挥发度 $\alpha_{AC} \gg \alpha_{BC}$ 时,侧线出料中 B 的最大浓度和 A 的最小浓度由进料组成所决定,与塔顶至侧线板之间的板数和回流比无关,Glinos^[12] 建议用下列公式估计侧线中 A 的最小浓度 $x_{AS,min}$ 和最小上升蒸汽量 V_{min} :

$$x_{AS,min} = \frac{x_{AF}(\alpha_{BC} - 1)}{(\alpha_{BC}x_{BF} + x_{CF})(\alpha_{AF} - 1)} \quad (5-19)$$

$$\frac{V_{min}}{F} = \frac{\alpha_{AB}x_{BF} \cdot x_{CF}}{\alpha_{BC} - 1} + x_{AF} \quad (5-20)$$

式中下标 A、B、C — 组分代号,

F — 进料,

S — 侧线。

由式(5-19)可知,当进料 A 含量很低,并且 $\alpha_{AB} \gg 1$ 时,有可能获得高纯度的侧线产品。

以上公式可作为过程合成的方案阶段是否可能采用侧线塔的判据。

例 5-10 乙烯精馏系统流程的改进。

乙烯精馏塔的进料来自脱乙烷塔的塔顶,组成如下:

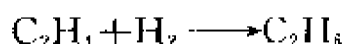
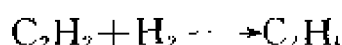
	CH ₄	C ₂ H ₂	C ₂ H ₄	C ₂ H ₆	C ₃ H ₈	合计
kmol/h	1.73	20.69	2107.46	713.32	28.34	2871.54
mol %	0.060	0.72	73.39	24.84	0.99	100

乙烯精馏塔塔顶产品为聚合级规格的乙烯,其主要指标如下:

$$C_2H_4 \geq 99.95\%$$

$$C_2H_2 < 5\text{ppm}$$

为了使乙炔含量合格,必须将脱乙烷塔塔顶出料中乙炔用催化加氢的方法脱除(见图 5-17),其反应式为:



若所使用的氢气浓度为 80%,其余 20% 为甲烷,反应进料中氢与乙炔的比例为 2.5 : 1,氢气在反应过程中全部消耗完毕,反

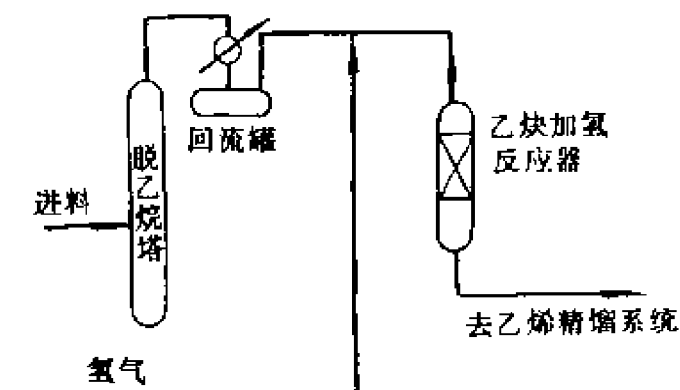


图 5-17 乙炔加氢示意流程图

应器出口物料组成如下：

	A—CH ₄	B—C ₂ H ₄	C=C ₂ H ₆
kmol/h	14.66	2097.11	744.36
mol %	0.51	73.43	26.06

设乙烷塔操作压力为 2.0MPa,在该操作条件下,

$$\alpha_{AB}=3.94 \quad \alpha_{BC}=1.49$$

解:若采用乙烯塔侧线出料的流程(图 5-18),用式(5-19)计算
乙烯产品中甲烷的最小含量:

$$x_{CH_4, \min} = \frac{0.0051 \times (1.49 - 1)}{(1.49 \times 0.7343 + 0.2606) \times (3.94 - 1)} = 0.06\%$$

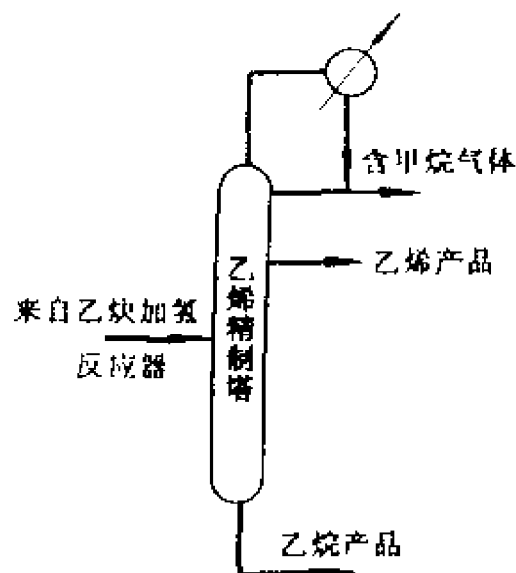


图 5-18 带侧线乙烯精馏塔

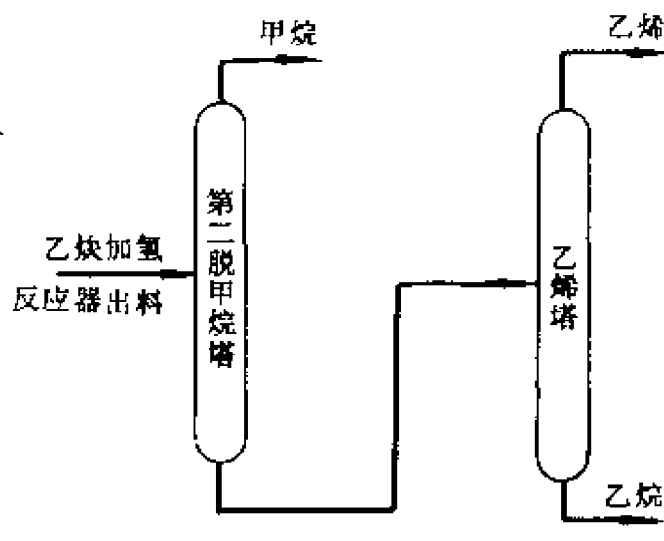


图 5-19 第二脱甲烷流程示意图

在侧线出料中还有 C_2H_6 ，其含量在 0.02%~0.04% 左右，乙烷和甲烷相加已达 0.1% 左右，因此，用侧线塔的方法不能满足聚合级乙烯规格的要求，必须用两个常规塔：进料先进入第二脱甲烷塔，脱除甲烷后再进入乙烯精馏塔分离乙烯和乙烷。

经平衡级计算，两个塔的主要计算结果和消耗的能量见表 5-16。

表 5-16 乙烯精馏系统常规塔与侧线塔方案比较

	常 规 塔 方 案		侧线塔方案
	第二脱甲烷塔	乙烯精馏塔	带侧线的乙烯精馏塔
塔顶组成	CH_4 % 24.38 C_2H_4 % 75.62	C_2H_4 % 99.93	CH_4 % 5.65 C_2H_4 % 94.34 C_2H_4 % 99.93
侧线组成			
塔釜组成	CH_4 % 0.03	C_2H_4 % 1.00	
回流比	43.54	3.32	4.31
塔顶出料流量	kmol/h 56.3	2048.62	60.44
侧线出料流量	kmol/h		2048.62
冷凝器			
物料温度 K	237	242	239
冷剂温度 K	230	230	230
热负荷 $10^6 kJ$	22.307	82.343	85.340
功耗 ^① kW·h	4945	18255	18920
再沸器			
物料温度 K	253	266	266
热剂温度 K	273	273	273
热负荷 $10^6 kJ$	10.285	68.479	62.250
功耗 ^② kW·h	-864	-5757	-5233
总功耗	16579		13678

①230K 的冷量功耗按 $221.7kW \cdot h/10^6kJ$ 计。

②再沸器为冷量回收，每 10^6kJ 冷量相当于 $84kW \cdot h$ 。

若经过工艺改进, H_2 的浓度提高到 95%, 反应进口的氢炔比降到 1.8 : 1, 则反应器出口物料组成如下:

	CH_4	C_2H_4	C_2H_6
kmol/h	3.69	2111.6	729.77
mol %	0.13	74.22	25.65

在这种情况下, 若取消第二脱甲烷塔而采用乙烯塔侧线出料, 乙烯产品中 CH_4 最低含量能降低到:

$$x_{CH_4, \min} = \frac{0.0013 \times (1.49 - 1)}{(1.49 \times 0.7422 + 0.2565) \times (3.94 - 1)} = 0.016\%$$

因此, 用侧线塔代替两个常规塔的方案是可行的。

经平衡级严格计算得到带侧线的乙烯精馏塔的计算结果见表 5-16。

由表 5-16 所列数据可知采用侧线出料的乙烯精馏塔代替第二脱甲烷塔和乙烯塔, 节省功耗 $2892 \text{ kW} \cdot \text{h}$, 占原方案功耗的 17.4%。

5.5.3 中间再沸器或中间冷凝器

精馏塔的温度从上到下逐步增高, 对于常规塔, 热量全部加在塔釜的再沸器, 即加在温度最高的地方, 冷量全部加在塔顶冷凝器, 即在最低的温度处移走全部热量, 对于热量而言温度愈高价格愈高; 对于冷量而言, 温度愈低价格愈高。因此, 若有可能在提馏段的某一块板加个中间再沸器, 用温度较低的热源取代部分塔釜再沸器所需的高温热量, 或在精馏段某一块板, 增设中间冷凝器, 用较高温度的冷量取代塔顶冷凝器所需的低温冷量, 都可以取得节省能量的效果。现在二元精馏的 McCabe-Thiele 图来说明中间再沸器的使用条件和对平衡级的要求。

图 5-20 中的 DA 为精馏段操作线, AB 为提馏段操作线, 若从 C 点抽出液体经过中间再沸器成为饱和汽相再回入塔内, 并且进料出料状态不变则提馏段总热负荷也不变, C 点以上的操作线不变。在中间再沸器出口气体返回塔内后由于该板以下的提馏段气

相负荷较原来减少,因此操作线由 C 移向 C',提馏段的操作线成为 ACC'B。当 C'点向左移动到与平衡线相交时,这时从 BC'的斜率可以算出最小蒸出比,从而可以得到中间再沸器所能加入热量的极限值。中间再沸器的位置愈高,单位回收能量的价值愈高。但是能回收的数量愈小,具体的位置是在权衡了这两个相互矛盾的因素后确定的。使用中间冷凝器时,McCabe-Thiele 图的变化可用同样的道理推论。

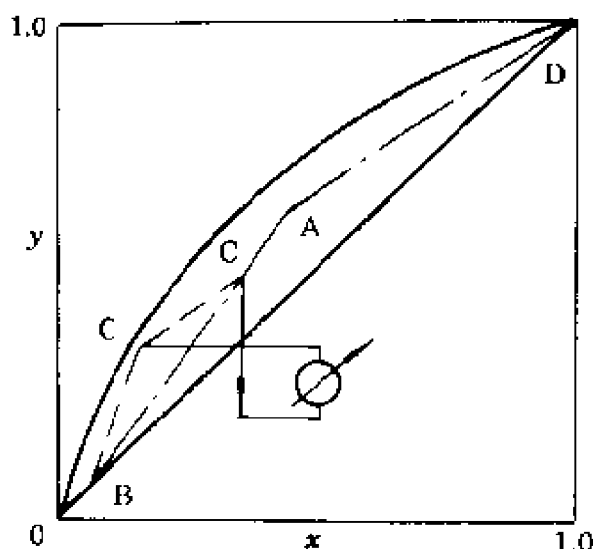


图 5-20^① 带中间再沸器的 McCabe-Thiele 图

由此可见,采用中间再沸器或中间冷凝器,使操作线向平衡线靠拢,减少了推动力,因而需要增加提馏段或精馏段的板数。倒过来说,在操作线和平衡线之间比较大的推动力时,才有可能使用中间再沸器或中间冷凝器。

例 5-11 某乙烯塔使用中间再沸器,其工艺操作条件如下:

	冷凝器	中间再沸器	再沸器
温度 K	233	258	276
热负荷 10^6kJ/h		12.956	16.388

假设无论中间再沸器是否使用,所需的提馏段上升蒸汽量不

^① 图 5-20 引自参考文献[22]。

变,且进出料焓差可略去不计,试用净功耗概念说明使用中间再沸器后所节省的功。

解:当没用中间再沸器时精馏塔净功耗 $W_0 = QT_0(\frac{1}{T_L} - \frac{1}{T_H})$ 。
 设中间再沸器与再沸器的温差为 ΔT ,中间再沸器加入的热负荷为全部热负荷的 x ,则有中间再沸器时的净功耗 W 为:

$$W = QT_0(\frac{1}{T_L} - \frac{1-x}{T_H} - \frac{x}{T_H - \Delta T}) \quad (5-21)$$

$$\frac{1}{T_H - \Delta T} = \frac{1}{T_H} \cdot \frac{1}{1 - \frac{\Delta T}{T_H}} = \frac{1}{T_H} [1 + \frac{\Delta T}{T_H} + (\frac{\Delta T}{T_H})^2 + \dots]$$

取级数的前两项

$$\frac{1}{T_H - \Delta T} = \frac{1}{T_H} + \frac{\Delta T}{(T_H)^2}$$

$$\begin{aligned} W &= QT_0(\frac{1}{T_L} - \frac{1-x}{T_H} - \frac{x}{T_H} - \frac{x\Delta T}{T_H^2}) \\ &= QT_0(\frac{1}{T_L} - \frac{1}{T_H} - \frac{x\Delta T}{T_H^2}) \end{aligned} \quad (5-22)$$

$$\text{现乙烯塔 } x = \frac{12.956}{12.956 + 16.388} = 0.4415$$

$$\Delta T = 276 - 258 = 18$$

$$\frac{1}{T_L} = 0.004292$$

$$\frac{1}{T_H} = 0.003623$$

$$\frac{1}{T_L} - \frac{1}{T_H} = 6.69 \times 10^{-4}$$

$$\frac{x\Delta T}{T_H^2} = \frac{0.4415 \times 18}{276^2} = 1.0432 \times 10^{-4}$$

节省功耗

$$\frac{6.69 - 1.0432}{6.69} = 15.6\%$$

5.5.4 热泵^{[2][23]}

一般精馏塔的共同特点都是在塔顶冷凝器取走热量,在塔釜

再沸器加入热量。若塔顶冷凝温度低于水温,就不能用水冷却而要用冷冻剂提供冷量,若能把塔顶气体冷凝的热量传递给塔釜再沸器就能大幅度降低能量消耗。但是同一个塔的塔顶温度总是低于塔釜温度,根据热力学第二定律,“热量不能自动地从低温流向高温”,除非自外界输入功,才能使热量从低温流向高温,如同用泵才能将液体自低位送向高位一样。这种通过外加功将热量自低位提至高位的系统称为热泵系统。

用于精馏塔的热泵有三种形式。第一种形式(见图 5-21)是用外界的工作介质为冷媒,液态冷剂在冷凝器中蒸发,使塔顶物料冷凝。蒸发的冷剂气体再进入压缩机升压,然后在压缩机出口压力下在再沸器将热量传递给塔釜物料,本身冷凝成液体,如此循环不已。这种塔内物料与制冷系统的工质两者之间封闭的系统称为闭式热泵。

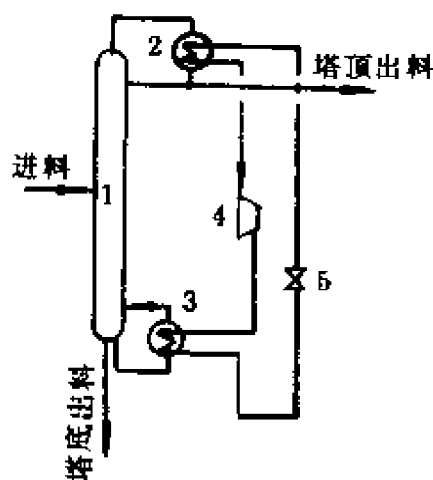


图 5-21 闭式热泵

1. 精馏塔 2. 冷凝器 3. 再沸器 4. 压缩机 5. 节流阀

第二种形式是以过程物料为制冷系统的工作介质,称为开式热泵系统。开式热泵系统可以以塔釜物料为工质[图 5-22(A)],取消再沸器,也可以塔顶物料为工质[(图 5-22(B)],取消冷凝器。

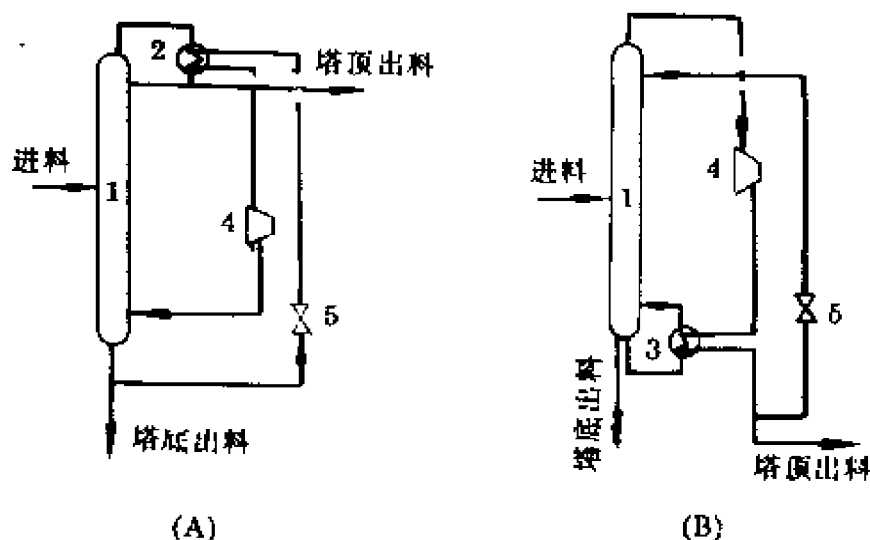


图 5-22 开式热泵

1. 精馏塔 2. 冷凝器 3. 再沸器 4. 压缩机 5. 节流阀

热泵的工作过程可以用压力-焓(图 5-23)来表示。气体从点 1 进入压缩机,经绝热压缩到点 2 成为过热蒸汽,从点 2 在等压的条件下冷却到点 3 又成为干饱和蒸汽,在点 3 和点 4 之间继续等温冷凝成为饱和液体,故通过一个循环所消耗的功是 W ,向系统供给的热量是 Q_2 。自系统取得的热量,即向系统提供的冷量是 Q_1 , $Q_1 = H_5 - H_1$ 。

热泵系统的理论效率用供热系数 ϵ 来衡量。 ϵ 有两种定义:第一种为单位功耗所输送的冷量,第二种为单位功耗输送的焓:

$$\epsilon_1 = Q_1 / W \quad (5-24)$$

$$\epsilon_2 = Q_1 (1 - T_0 / T_1) / W \quad (5-25)$$

式中 T_0 为环境温度。

实际的热泵循环过程存在着不可逆损失,在压缩过程中有一部分功转化为热,故实际消耗功为 W_1 , W 与 W_1 之比称为压缩机的等熵效率 η_s :

$$\eta_s = W / W_1 \quad (5-26)$$

其次,实际循环过程中的传热必然有温差,流动必然有压降。

工作介质的蒸发温度要比塔顶温度低 ΔT_1 , 工作介质的冷凝温度要比塔釜温度高 T_2 , 即压缩机的进口压力比 p_1 低, 出口压力要比 p_2 高, 实际热泵系统的功耗比理想热泵系统的功耗大, 其供热系数必小于理想循环的 ϵ 。我们称实际循环的供热系数为 COP。COP 表示热泵以机械能换取热能的增长率, 由 COP 的大小可以看出该热泵的性能。

$$\text{COP}_1 = \frac{Q}{W_1} \quad (5-27)$$

$$\text{COP}_2 = Q_1 (1 - \frac{T_0}{T}) / W \quad (5-28)$$

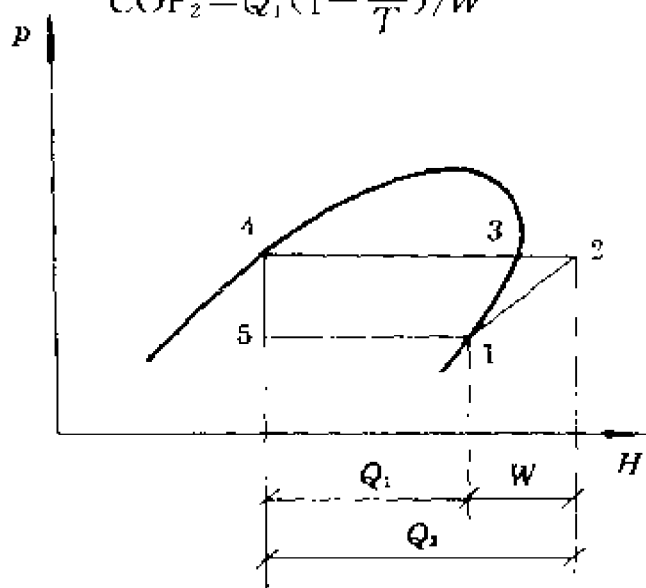


图 5-23 制冷循环的压-焓图

要提高热泵的 COP, 精馏过程应具有下列特性:

(1) 塔顶底温差小。

以闭式热泵为例, 若略去管道阻力不计, 压缩机的进口压力等于工作介质在冷凝器蒸发时的泡点压力, 其出口压力等于工作介质在再沸器冷凝时的露点压力, 因此其进出口压差取决于塔顶底温度与传热温差之和。这意味着塔顶底温差小, 即压缩机所需消耗的功少。但另一方面从热泵与全系统热集成的角度来看, 使用热泵的精馏系统其塔顶冷凝器温度和塔釜再沸器温度应在全系统挟点的两侧 (见 5.5.7 节), 若塔顶与塔釜温度均在挟点的一侧, 热泵实际上起不到净节能的效果。显然, 要同时满足塔顶底的温度差小而

又处于挟点的两侧这种情况是不多的,因此,热泵在精馏中的应用将是很有限制的。

(2)塔的阻力小。塔的阻力小即塔顶底压差小,塔顶底温差小。

(3)塔的负荷大消耗的能量也大。压缩机的效率和容量有关,压缩机的容量愈大其效率愈高。

(4)换热器温差小,理由同(1)。

(5)工作介质的潜热大。

压缩机消耗的功取决于物料的进口温度、压力、压缩比和绝热因子K。若两种工作介质的上述条件相同,则压缩一千摩尔物料的功相同,因此潜热大的工作介质每单位压缩功所能输送的热量大于潜热小者。

现以乙苯、苯乙烯的分离为例,说明热交换器的温差、塔的阻力和工艺操作条件对热泵方案经济效益的影响,具体数据见表5-17。

表 5-17 乙苯-苯乙烯分离热泵方案比较

塔顶压力 MPa		0.006		0.01		0.15		0.022	
塔顶温度 K		328.7		340.4		350.5		362.0	
塔底压力 MPa		0.021		0.02		0.0		0.037	
塔釜温度 K		368.1		373.1		378.1		385.8	
再沸器热介质温度 K		373.1	378.1	378.1	383.1	383.1	388.1	390.8	395.8
压缩机 功耗 kW·h	理论	672	746	540	611	449	532	382	451
	实际	960	1065	772	872	642	760	546	644
实际供热系数 COP		5.64	5.07	7.02	6.20	8.44	7.12	7.72	8.39
精馏操作费用节省 (万元/年)		54.2	45.8	67.6	61.2	79.6	70.2	87.3	79.5

由表5-17的数据可得出如下三点结论:

(1)热泵系统压缩机的功率随着塔压的升高而迅速下降。当塔

顶压力从 0.006MPa 提高到 0.015MPa 时,压缩机功耗从 $746\text{kW}\cdot\text{h}$ 降低到 $532\text{kW}\cdot\text{h}$,减少 29%。但是塔压升高受到塔釜温度要求的限制。因此,若有高效阻聚剂能提高塔的操作温度,则能大幅度提高供热系数。

(2)若有高效换热器能降低传热温差,即意味着能降低压缩机出口压力。若塔釜温度为 373K,当再沸器温度差 10K 降低到 5K 时,压缩机功率从 $872\text{kW}\cdot\text{h}$ 降为 $772\text{kW}\cdot\text{h}$,减少了 12%。

(3)用低阻力的塔板如林德筛板或高效填料代替普通的浮阀塔或筛板塔能降低顶底的压力降,其效果与升高塔顶压力或降低再沸器传热温差相同。

5.5.5 精馏系统之间的热集成

在 5.5.4 热泵这一节已经说明:若能把精馏塔塔顶气体冷凝的热量传给塔釜再沸器,就能大幅度地降低能量消耗。对于同一个精馏系统要做到这点必须自外界输入功,通过热泵就能实现上述设想。但对于两个精馏系统,精馏塔 A 的冷凝温度可能高于精馏塔 B 的再沸器温度,这时就可以把精馏塔 A 塔顶气体的冷凝热作为精馏塔 B 的再沸器热源,这就是精馏系统间的热集成。

精馏塔冷凝器的物料冷凝温度取决于物料的组成和压力,因此要使精馏系统之间的热集成可行,可以采取的措施有:

(1)提高精馏塔 A 的压力和(或)降低精馏塔 B 的压力;

(2)采用非清晰切割代替清晰切割,减小相邻两个精馏塔顶底物料的沸点差以实现热集成。

现以在第 3 章中曾经叙述过的乙基苯生产过程为例进行说明。

进入分离工段的物料要求分成苯、乙苯和比乙苯重的所有组分三个产品。根据进料的组成(见表 5-18)和选择分离序列的试探规则,分离流程采用顺序流程,见示意图 5-24。该流程不宜采用提高乙苯精馏塔的压力,让乙苯塔的冷凝热作为苯塔再沸器热源的热集成方案,也不能采用苯精馏塔的冷凝热作为乙苯塔再沸

器热源的方案,因为两者的沸点相差过远,较合理的方案是将苯塔从清晰切割改为非清晰切割,然后进行热集成,其示意流程见图 5-25。

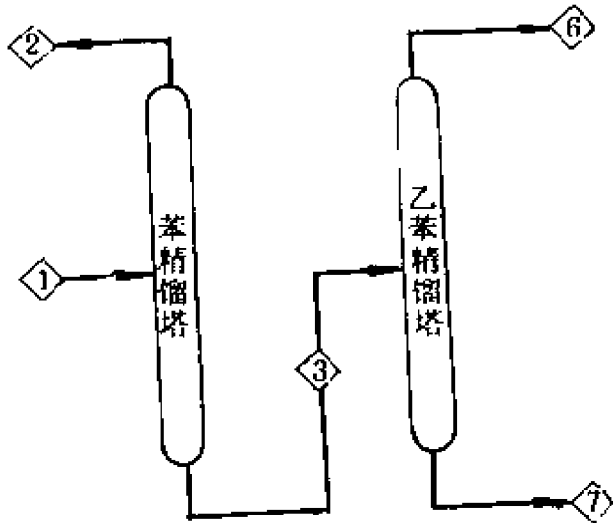


图 5-24 无热集成方案示意图

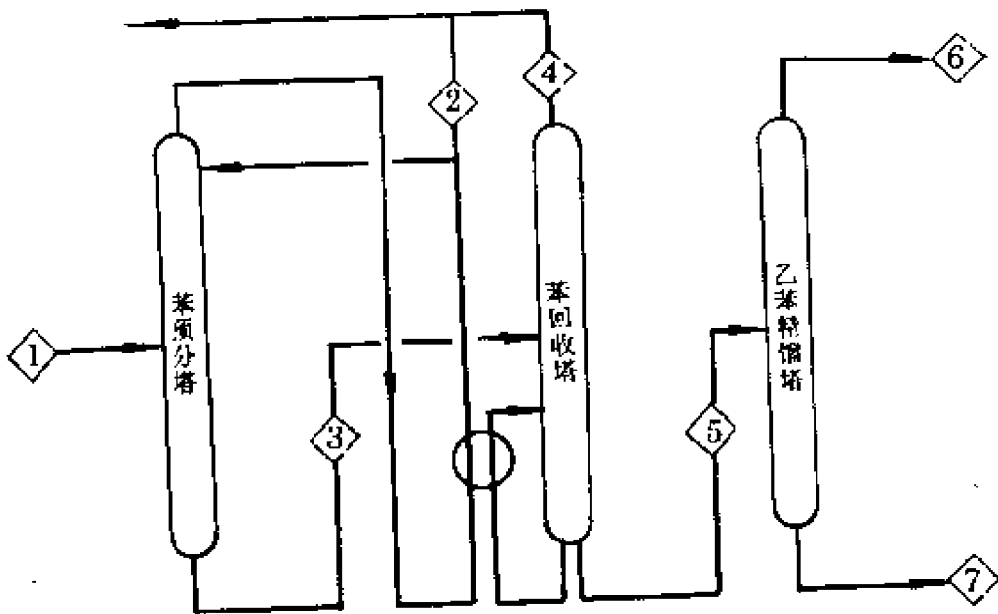


图 5-25 有热集成方案示意图

表 5-18 无热集成方案物流表

物流编号	①	②	③	⑥	⑦
总流量, kmol/h	400	312.097	87.903	68.923	18.980
各组分流量, kmol/h					
苯	312.0	311.977	0.023	0.023	0.00
乙基苯	69.08	0.12	68.96	68.888	0.072
正、异丙苯	4.92	0	4.12	0.012	4.908
二乙苯以上	14.00	0	14.00	0.0	14.00
高压方案					
压力, MPa	1.84	1.80	1.84	0.13	0.18
温度, °C	250	214.5	299.8	146.8	200.8
密度, kg/m ³	48.2	633.3	543.4	749.1	697.9
液化率	0.0	1.0	1.0	1.0	1.0
低压方案					
压力, MPa	1.84	0.4	0.44	0.13	0.18
温度, °C	250	132.8	208.6	146.0	200.8
密度, kg/m ³	48.2	752.8	680.6	749.1	697.9
液化率	0.0	1.0	1.0	1.0	1.0

表 5-19 有热集成方案的物流表

物流编号	①	③	③	④	⑤	⑥	⑦
总流量, kmol/h	400	137.07	262.93	175.03	87.903	68.923	18.98
苯	312.0	136.96	125.04	175.02	0.023	0.023	0
乙基苯	69.08	0.11	68.97	0.01	68.96	68.888	0.072
正、异丙苯	4.92	0	4.92	0	4.92	0.012	4.908
二乙苯以上	14.00	0	14.00	0	14.00	0	14.00
压力, MPa	1.84	1.80	1.84	0.33	0.317	0.13	0.18
温度, °C	250	214.5	237.8	124.3	199.6	146.0	200.8
密度, kg/m ³	48.2	633.3	609.7	763.2	691.3	749.1	697.9
液化率	0.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0

表 5-20 精馏塔计算条件和结果

塔 名 称	无 热 集 成				有 热 集 成		
	高压方案		低压方案		苯预分塔	苯回收塔	乙苯塔
总理论板数	45	40	40	40	14	30	40
进料板位置	25	25	25	25	14	14	25
回流比	2.065	2.5	1.346	2.5	2.024	2.08	2.50
冷凝器负荷 $Q_c, 10^6 \text{kJ/h}$	20.000	8.730	20.436	8.730	9.840	10.450	8.730
再沸器负荷 $Q_w, 10^6 \text{kJ/h}$	11.029	5.192	4.497	7.633	0.0	5.891	7.853
塔径, m	1.676	1.524	1.829	1.524	1.219	1.372	1.524
板间距, m	0.5	0.5	0.5	0.5	0.45	0.5	0.5

从表 5-20 的数据可知虽然有热集成方案比无热集成方案多一个精馏塔,但是前者两个塔的总板数和后者一个塔的板数接近而塔径较小,并且换热总热负荷小于后者,因此其投资不一定比有热集成方案的高,要进行设备投资估算后才能得出结论。至于经常操作费用,因缺乏在不同温位下可靠的能量价格,只能进行理论分析,下面用较简便的净功耗 W_n 的概念比较上述各方案。假设环境温度 T_0 为 25°C , 计算结果见表 5-21。

表 5-21 各方案的净功耗

	无 热 集 成				有 热 集 成		
	高压方案		低压方案		苯预分塔	苯回收塔	乙苯塔
	苯塔	乙苯塔	苯塔	乙苯塔			
T_w, K	537.0	473.9	481.8	473.9	512.8	472.7	473.9
$(T_w - T_0), \text{K}$	274.8	175.8	183.6	175.8	214.7	174.6	175.8
$Q_w, 10^6 \text{kJ/h}$	11.029	5.192	4.493	7.633	0	5.891	7.850
T_D, K	487.6	419.1	405.9	419.1	487.6	397.4	419.1
$(T_D - T_0), \text{K}$	189.5	121.0	107.8	121.0	189.5	99.3	121.0
$Q_D, 10^6 \text{kJ/h}$	20.000	8.730	20.436	8.730	9.840	10.450	8.730
$W_n, 10^6 \text{kJ/h}$	-2.483	-0.593	-3.714	0.312	-3.824	-0.435	0.392
$W_n, 10^6 \text{kJ/h}$	-3.075		-3.402		-3.867		
$\Delta W_n, 10^6 \text{kJ/h}$	0.792		0.465		0		

由此可见有热集成的分离方案能量消耗最省。

净功耗是负值的原因是进料温度高于出料温度,但因为几个方案的进出料条件都相等,不影响能耗相对大小这个结论的准确性。

5.5.6 精馏系统与全过程的热集成^{[19][20]}

5.5.6.1 必要性

化工装置中有各种用途的换热器,不仅有精馏塔的冷凝器和再沸器,还有反应器进出口的加热器、冷却器,压缩机出口冷却器以及其他单元过程的吸收、萃取、结晶等过程所需要的换热器。第4章所述的换热网络正是由过程的全部换热器组成的。精馏塔和过程中其他换热器进行热集成有无必要取决于精馏塔与过程热夹点的相对位置,有以下三种可能:

(1)冷凝器和再沸器位于热夹点两侧,即夹点温度在冷凝器温度 T_D 和再沸器温度 T_W 之间;

(2) T_D 和 T_W 都高于夹点温度,即冷凝器和再沸器都处于热端;

(3) T_D 和 T_W 都低于夹点温度,即冷凝器和再沸器都处于冷端。

现对这三种情况进行讨论。图5-26表示了换热网络在各种情况下的热流图,即第4章表4-2所介绍的换热网络问题表的最后一列:热流量输出。横线表示各个子网络的区间,横线的数字为从横线上的子网络向横线下的子网络传递的热量,因此在数值为零处即为夹点。在方框图外左侧的数字表示各个子网络的温度, T_H 、 T_P 、 T_L 分别为网络的最高温度、夹点温度、最低温度。比较图A、B、C、D的热流量数据可以得出以下结论:

(1)若精馏系统位于夹点的两侧,是否进行热集成对能量消耗不发生影响,热集成后需要的热量为 $(Q_m + Q_w)$,冷量为 $(Q_{out} + Q_D)$,与不进行热集成时相同,因此无必要进行热集成以简化操作。

(2)位于热端的精馏塔进行热集成能节约能量消耗,热、冷公

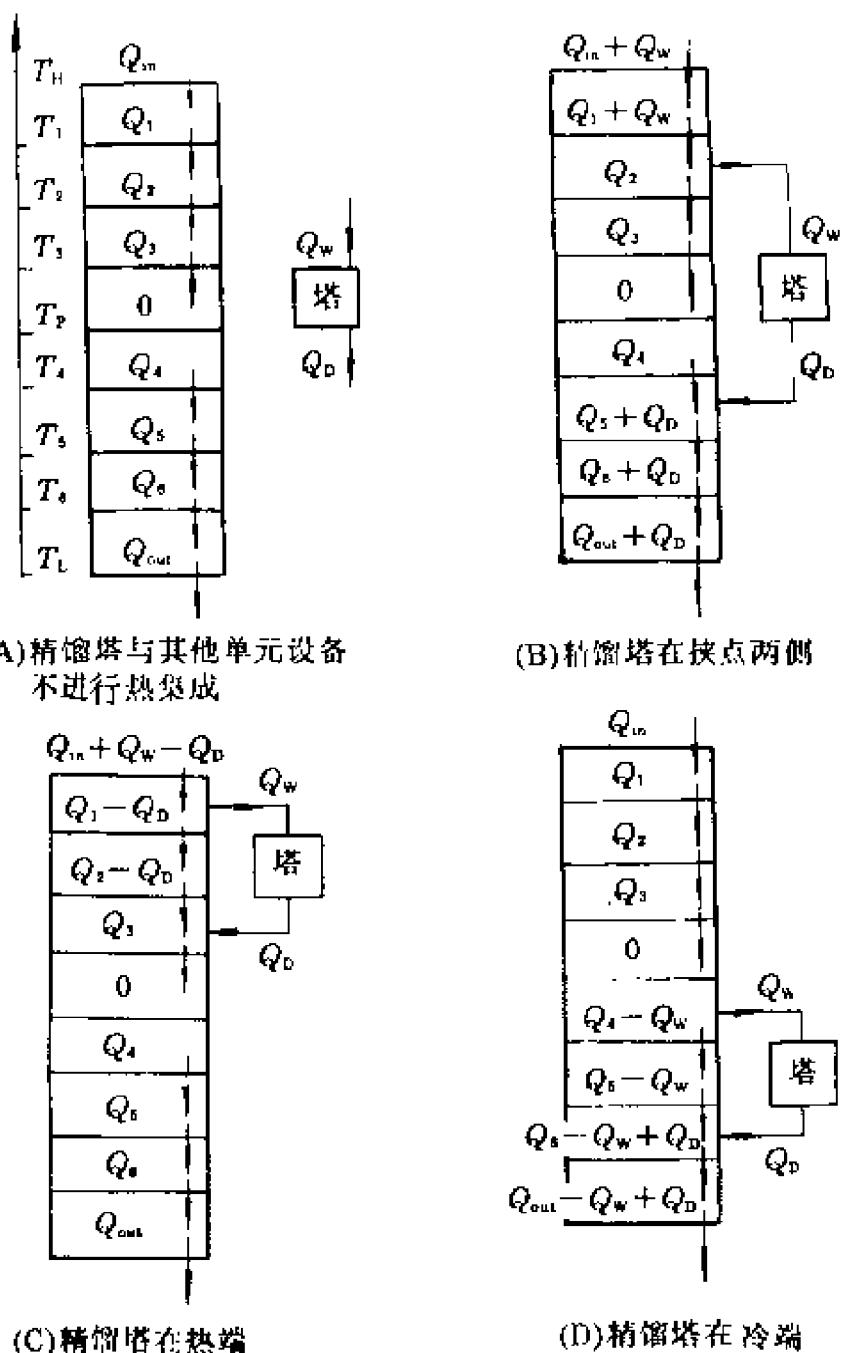


图 5-26 换热网络热流图(本图参考了文献[19])

用工程都减少了 Q_D 。

(3) 位于冷端的精馏塔进行热集成也能节约能量消耗, 热、冷公用工程都减少了 Q_w 。

因此, 我们把精馏塔位于热端或冷端的热集成称为合理布置, 跨越挟点的热集成称为不合理布置。

5.5.6.2 可能性

从图 5-25 还可以得到一些信息, 即是否可能进行精馏系统与

过程其余部分的热集成以及在怎样的条件下能简化操作。

对位于热端的精馏塔,要能进行热集成必须在 T_H 、 T_1 和 T_2 处的热流量都大于零。即 Q_{in} 大于 $(Q_D - Q_W)$, Q_1 、 Q_2 大于 Q_D , 否则将使 T_H 、 T_1 和 T_2 处的热流量为负值,这是违背热力学第二定律的,在这种情况下虽有必要进行热集成,但不可能实现。

若 Q_{in} 不仅大于 $(Q_D - Q_W)$ 而且大于 Q_D , 则精馏塔再沸器所需热源可直接取自热公用工程,仅冷凝器放出的热量与过程进行热集成,见图 5-27(A)。这样比图 5-26(C)所示情况减少热集成单元之间的相互影响,使操作方便。

同理,对位于冷端的精馏塔要进行热集成,冷端各处的热流量 $Q_4 - Q_W$, $Q_5 - Q_W$, $Q_6 - Q_W + Q_D$, $Q_{out} - Q_W + Q_D$ 都必须大于零。若 Q_6 、 Q_{out} 都大于 Q_W , 则冷凝器可以直接用冷公用工程冷却,见图 5-27(B)。

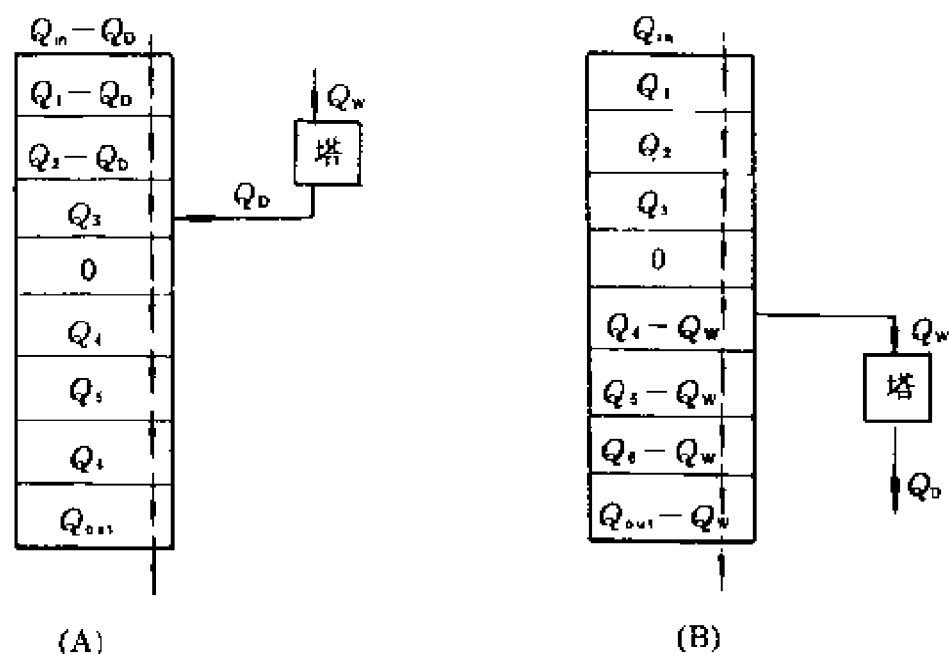


图 5 27 改进的热集成过程

(本图来源于参考文献[19])

5.5.6.3 设计可采取的措施

从以上叙述可以清楚地得知:使精馏与过程的其余单元的热集成成为必要与可能的措施都是为了下列两个目的:

(1)改变塔顶、底的温度,使精馏塔从位于挟点两侧移到位于挟点的一侧。

(2)减少精馏塔的冷凝器和(或)再沸器负荷,使进行热集成时各换热子网络之间的热流量不出现负值。

可以采取的措施在本章的前几节已提及,现再从有利于实现热集成的角度简述于下:

为达到第一个目的,可以研究的措施有:

(1)改变精馏塔的压力以提高塔顶温度或降低塔釜温度。

(2)将精馏塔从清晰切割改为非清晰切割,使塔顶、底的温差减小。

(3)采用中间再沸器,研究是否能使中间再沸器位于冷端,使冷凝器和中间再沸器同时位于挟点的一侧。

(4)采用中间冷凝器,研究是否能使其位于热端,使中间冷凝器和再沸器同时位于挟点的一侧。

除了改变塔压这个措施外,所有(2)、(3)、(4)三点措施都同时有利于达到第二个目的。

5.5.7 热与功的集成

5.5.7.1 热机与热泵

化工装置除了反应、分离、换热等单元外,尚有热机与热泵。热泵的原理在 5.5.4 节已经叙述,热机是自温度为 T_H 的高温热源吸收热量 Q_H ,将其一部分转换为功 W 对外输出,一部分剩余热量 Q_L 在低温 T_L 下输出:

根据热力学第一定律:

$$W = Q_H - Q_L \quad (5-29)$$

根据热力学第二定律,不可能将 Q_H 全部转化为 W ,使 Q_L 等于零,对于卡诺循环热机

$$W_c = \frac{T_H - T_L}{T_H} Q_H \quad (5-30)$$

实际热机不可能是可逆的卡诺循环热机,输出的功 W 为

$$W = \eta Q_H \quad (5-31)$$

$$\eta < \frac{T_H - T_L}{T_H} < \left(1 - \frac{T_L}{T_H}\right) \quad (5-32)$$

式中 η 为热机的效率。

由式(5-32)可知 T_H 的温度愈高热机的效率愈高。

5.5.7.2 热机与全过程挟点的相对位置

如同精馏系统与过程其余部分的热集成有合适的相对位置一样,热机、热泵与过程的热集成也同样存在这问题,图 5-28 表示了热机与热挟点不同相对位置时的热流图。

图 5-28(A)表示热机的 T_H 和 T_L 都高于或等于过程的最高温度 T_H 。此时热机与过程热集成后的系统与无热集成时相比较,热公用工程减少了 Q_L ,对热机而言,可以认为消耗了 $Q_H - Q_L$ 的热量,产生了 W 的功,热机效率为 100%

图 5-28(B)表示热机处于挟点以上,但排出热量的温度低于过程的 T_H 。假设部分排出的热量 X_1 温度在 T_H 和 T_1 之间,另一部分排出的热量 X_2 在 T_2 和 T_3 之间,那只要过程原来的热流量 Q_m 大于 Q_L , Q_1 和 Q_2 大于 X_2 ,则仍然能使热机效率为 100%

图 5-28(C)表示热机跨越挟点的两侧,热机与过程热集成后与无热集成时相比,并不改变冷、热公用工程用量,即热公用工程消耗($Q_m + Q_H$),冷公用工程消耗($Q_{out} + Q_L$),但是都增加了挟点以下各处的热流量,因此是一种不合理的结构。热机应单独成为系统,不与过程进行热集成。

图 5-28(D)表示热机处于挟点以下,对全系统而言,热集成后冷公用工程减少了 W ,而且得到功 W ,这种结构是非常有利的。

热机在大规模化工装置上应用的例子并不罕见,如乙烯装置的压缩机抽汽透平是位于挟点以上的热机与过程集成的例子。压缩机的透平进口为 11.5MPa 超高压蒸汽,作功后排出 4MPa 的高压蒸汽和 1.3MPa 的中压蒸汽供过程使用,这属于图 5-28(B)的情况。

脱甲烷塔塔顶的尾气膨胀机属于热机处于挟点以下和过程热

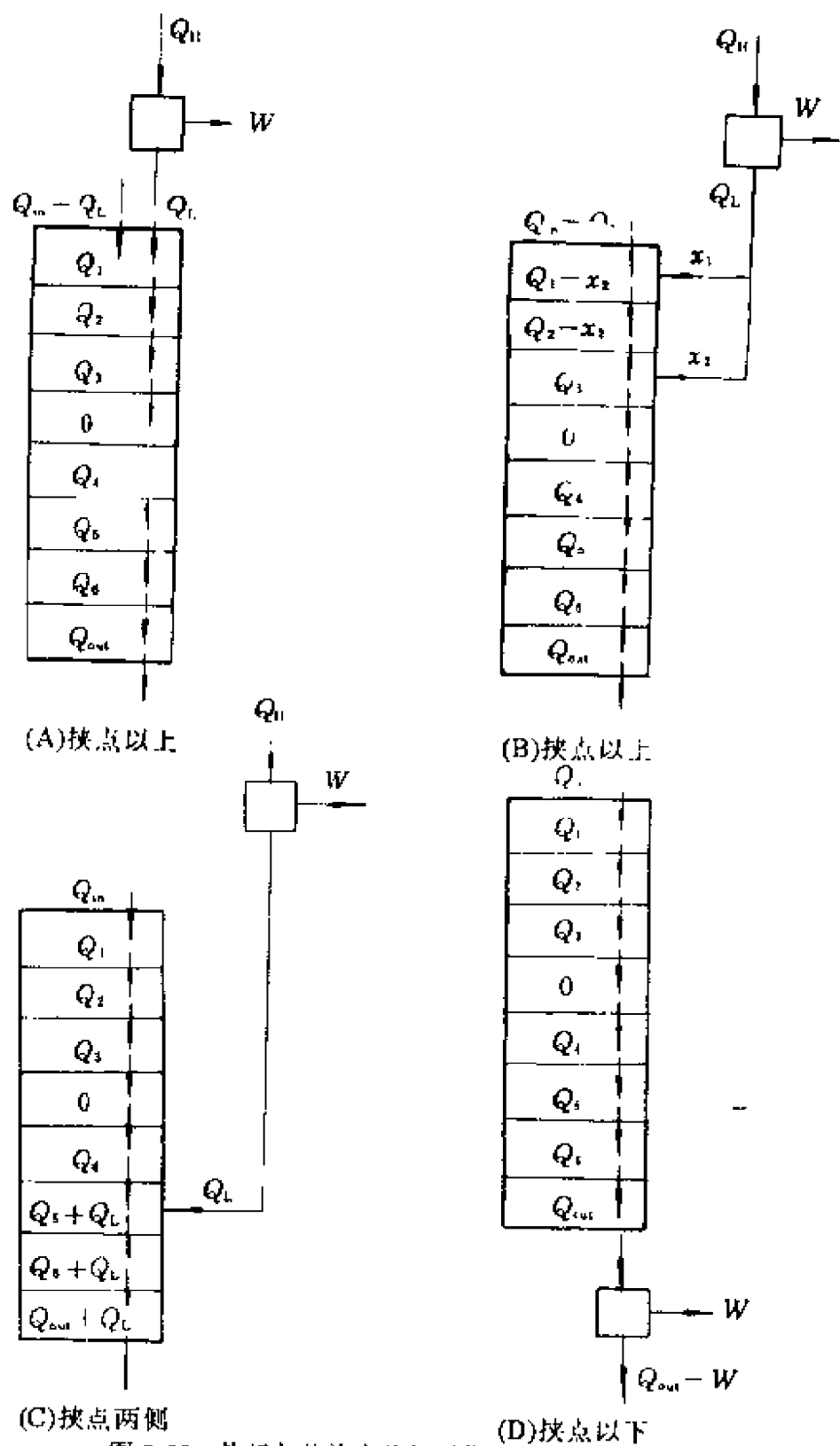


图 5-28 热机与热夹点的相对位置

(本图参考了文献[20])

集成的例子由图 5-28(D)所示。脱甲烷塔顶出口气体组成为 96℃ 甲烷, 4% 氢气, 温度为 -96℃, 压力 3.1MPa, 经过尾气膨胀机减压至 1MPa, 不仅得到膨胀机产生的功率, 而且使出口气体温度降至 -140℃ 左右, 得到极高品位的冷量。

5.5.7.3 热泵与过程热夹点的相对位置

热泵与过程热夹点不同的相对位置时的热流图如图 5-29。

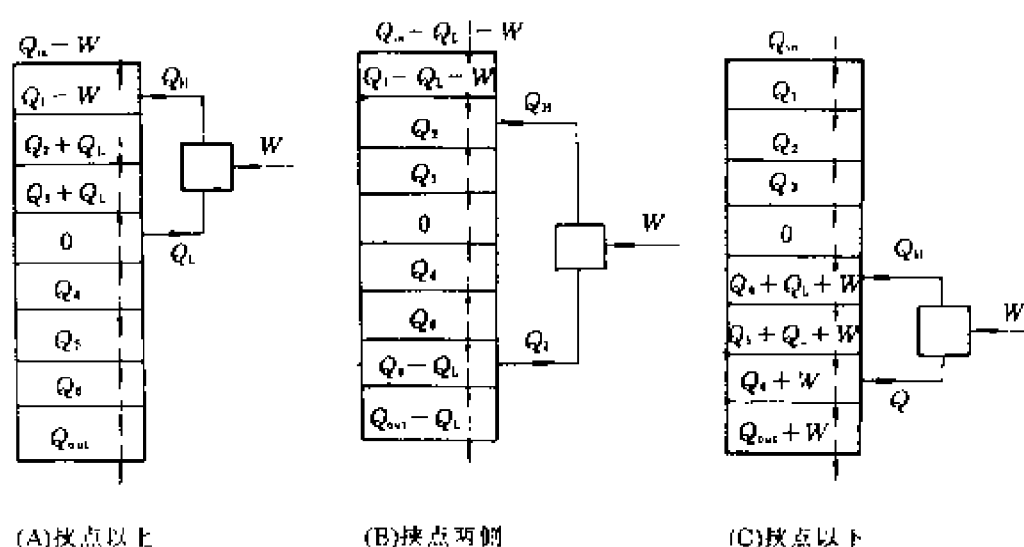


图 5-29 热泵与热夹点的相对位置

(本图参考了文献[20])

图 5-29(A)表明,若热泵处于挟点以上,对于集成系统而言其净结果是输入的功 W 转化为热公用工程,这是一种能量的贬值,显然是不合理的。

图 5-29(C)表示,若热泵处于挟点以下,对于集成系统而言是把功转化为低温热量,还需消耗冷公用工程来吸收,这种结构比热泵处于挟点以上的情况更要不合理。

只有图 5-29(B)表示的热泵跨越挟点两侧的情况,在热泵与过程集成后,能节省热公用工程($Q_L + W$)和冷公用工程 Q_L ,并且减少了换热器网络之间传递的热量,使换热器的面积减少。在这种

情况下,采用与过程热集成的热泵系统才是有利的。

最后,在本章结束前,有必要重复一下第 1 章叙述的几个论点:

(1)化工装置是一个由各种单元设备以系统的、合理的方式组合起来的整体。因此在进行过程合成和分析时必须从全系统,而不是从单元设备的角度出发,否则会得出从单元设备来看也许是正确的,但从全局来看是不正确的结论。

(2)设计是一个多目标的优化问题,不同于常规的数学问题,不是只有唯一正确的答案,在作出选择和判断时要考虑各种往往是相互矛盾的因素——技术、经济 and 环境保护的要求。设计师必须在允许的时间范围内选择一个兼顾各方面要求的方案,作出妥协。

(3)整个设计过程是个交替地进行过程合成与分析,不断作出选择,修改原有设想的迭代过程。

希望通过以前各章所介绍的内容,读者能同意这几个论点是正确而有用的。

参 考 文 献

1. King C J. Seperation Processes. 2nd ed. McGraw-Hill Book Company, 1980
2. 邹仁崧. 石油化工分离原理与技术. 北京:化学工业出版社, 1988
3. Nadgir V M, Lin Y A. Studies in Chemical Process Design and Synthesis. AIChEJ, 1983, 29(6): 926~934
4. Nath R, Motard R L. Evolutionary Synthesis of Seperation Processes. AIChE J, 1981, 27(4): 578~587
5. Seader J. D, Westerberg A W. A Combined Heuristic and Evolutionary Strategy for Synthesis of Simple Seperation Sequences, AIChE J, 1977, 23(6): 951~954
6. Westerberg A W, Stephanopolous G, Studies in Process Synthesis-I Branch and Bound Strategy with list Techniques for the Synthesis of Seperation Schemes. C E S, 1975, 30: 963~972
7. Stephanopoulos G, Westerberg A W. Studies in Process Synthesis- II Evolutionary Synthesis of Optimal Process Flow-sheets. C E S, 1976, 31: 195~204
8. Tedder D W, Rudd D F. Parametric studies in Industrial Distillation. AIChE J, 1978, 24(2): 303~334
9. Peters & Timmerhaus. Plant Design And Economics For Chemical Engineers. 3rd ed. Mc Graw-Hill Book Company, 1980
10. 陈上煌, 倪进方. 切点系统最小回流比的改进算法. 化工学报, 1991, (3)
11. Albers C W, Wells T A. Olefins Plant Optimization keyed to Demethanization. Oil & Gas J, 1978 (Sep4) 72~78

12. Mah RSH, et al. Distillation with Secondary Reflux and Vaporization; A Comparative Evaluation. *AIChE J*, 1977, 23(5): 651~658
13. Petterson W C. Energy-Saving Schemes in Distillation. *Chem. Eng*, 1977, (Sep 26): 78~86
14. Douglas J M. *Conceptual Design of Chemical Processes* Mc Graw—Hill Book Company, 1988
15. Rose L M. *Distillation Design in Practice*, Elsevier Science Publishers B. V, 1985
16. Sawistowski H, Smith W. *Mass Transfer Process Calculations*. London International Publishers (A division of John Wiley & Sons), 1963
17. Glinos K, Malone M F. Minimum Reflux, Product Distillation and Lumping Rules for Multicomponent Distillation. *I E C. PDD* 1984, 23(4): 764~768
18. Glinos K, Malone M F. Minimum Vapor Flows in a Distillation Column with a Sidestream. *I E C. PDD* 1985, 24(5): 1087~1090
19. Linnhoff B. H. Smith R. Heat Integration of Distillation Columns Into Overall Processes *Chem. Eng Sci*, 1983, 38(8) 1175~1188
20. Linnhoff B. Heat and Power Networks in Process Design Part I and Part II *AIChE* 1983, 29(5): 742~771
21. Stephanopoulos G. Synthesis in *The Design of Chemical Processing Systems*. M. I. T. 教材
22. 上海医药设计院内部资料. 多元精馏几个问题的探讨
23. Null H R. Heat Pumps in Distillation *C E P*. 1976 (7): 58~64

第 6 章 流程模拟与优化

流程模拟(Flowsheeting)这个名词是随着电子计算机在化学工程领域得到广泛应用而产生的。它的含义就是建立,或者应用已经建立的,能足够准确地描述整个过程的数学模型,在计算机上对数学模型求解,得到该过程的全部信息,如过程内各物流的组成及状态,各单元设备的状态变量等。数学模型主要由物料平衡、能量平衡和相平衡方程组成。因此,如果用简单而通俗的语言来表达,流程模拟的含义就是对流程用计算机进行严格的物料和能量衡算。本章将介绍流程模拟的基本概念、流程模拟软件的使用方法及应用。

6.1 流程物料衡算的几个问题

单元设备的物料衡算都是已知进料条件和设备参数,求出口物料的组成和其他参数。然而在进行流程的物料衡算时,除了要进行组成流程的各个单元设备的物料衡算外,还要考虑下列几个问题。

6.1.1 计算基准

设计过程中的各种计算通常是以 h(小时)或是以设备为单位进行的,而设计任务却是指定年产量。因此,要选择合适的方法将两者关联起来。

对连续生产过程使用年操作时的概念,小时处理量等于年产量除以年操作时;对间歇生产过程,不仅要考虑年操作时,而且还要根据关键设备的操作时间表确定每小时的投料量、产出量和设备及管道的能力。

例 6-1 设计一个年产量为 10000t(吨)的间歇本体法聚丙烯设备装置,由两个反应釜并联操作,反应釜的操作时间表如下:

置 换	0.5 h
进 料	0.5 h
聚合反应	5.0 h
出 料	1.5 h
清 理	0.5 h

设年操作日为 8000h,消耗定额为 1.1t 丙烯/t 聚丙烯,试决定所需反应器的体积和管道的通过能力。

解:每个反应釜的生产能力为 5000 t/a(年),每批操作周期为 8h,故每个反应釜每批的生产量为:

$$5000 \times 8 / 8000 = 5 \text{ t (吨)}$$

在操作状态下丙烯的密度为 470 kg/m³,反应釜装料系数为 0.9,则所需反应釜的容积为

$$1.1 \times 5 / 0.47 / 0.9 = 13.0 \text{ m}^3$$

$$\begin{aligned} \text{进口管道的通过能力} &= \text{每批投料量} / \text{进料时间} = 1.1 \times 5 / 0.5 \\ &= 11 \text{ t/h} = 23.4 \text{ m}^3/\text{h} \end{aligned}$$

$$\text{出口管道的通过能力} = 5.5 / 1.5 = 3.67 \text{ t/h}$$

6.1.2 比率系数

进行物料衡算最方便的方法是按照工艺过程的顺序依次进行计算。对于一个较复杂的过程,在开始进行物料衡算时常不能确切地知道每吨产品的原料消耗,因而不能确定原料的投料量。可以任意选择一个进料的数值,例如 100 kmol/h,到系统计算完成得到产品数量时,再将各股物流的数量和设备负荷乘以比率系数。

比率系数 = 每小量要求的产量 / 100 kmol 原料得到的产量

6.1.3 物流的循环^{[4][2]}

如果在一个流程中存在由后单元流向前单元的物流,这就构成一个循环过程,这种物流就称为循环物流。

化工装置中存在循环物流的例子是很多的。例如,对于转化率较低或有一种反应物过量的反应系统,需将未反应的原料与产物分离后返回到反应器的进口;可逆副反应的产物循环回反应器进口以抑制副反应产物的生成等。

流程中循环物流的存在增加了物料衡算的复杂程度。如果一个过程已知其进口条件,若其中无循环物流,则仅需从进口开始计算,依次求解每个单元,直至流程结束。但是如果其中有循环物流,而循环物流在初次计算时是未知的,依次求解就无法进行。通常有两种方法处理带有循环物流的过程:

(1)代数方程解法。将包含循环物料在内的各组分的物料平衡用代数方程形式表达,然后联立求解该方程组。

(2)迭代法。将循环流在某处“切断”,并假设该股物流的初值,即数量、组成、温度和压力等,该股流就被称为断裂流股,然后按顺序求解各个单元,得到断裂流股的计算值,将假设值与计算结果作比较,如果误差超出指定值,重新假设初值,重复以上步骤,直至假设值与计算值的差别在允许范围内为止。

断裂流股的变量称为断裂变量或迭代变量,重复计算的过程称为迭代过程。若前后两次计算值的差值达到或小于指定值 ϵ ,即

$$\left| \frac{x^{(K+1)} - x^{(K)}}{x^{(K)}} \right| \leq \epsilon \quad (6-1)$$

则称为该过程收敛, ϵ 称为收敛精度。但是迭代过程不一定会收敛,断裂变量在迭代过程可能呈现如图 6-1 所示的四种情况,即单调收敛、振荡收敛、振荡发散和单调发散。过程是否收敛是非线性方程组的收敛性问题,由于篇幅有限,不能详细讨论收敛的充分条件和必要条件以及各种收敛方法的优缺点等属于系统工程专著的内容,本书仅从流程模拟软件应用的角度简要地介绍两种常用的迭代方法。

6.1.3.1 直接迭代法

直接迭代法就是把上一次迭代得到的断裂变量值,不加任何修正直接作为下一次运算的设定值,即

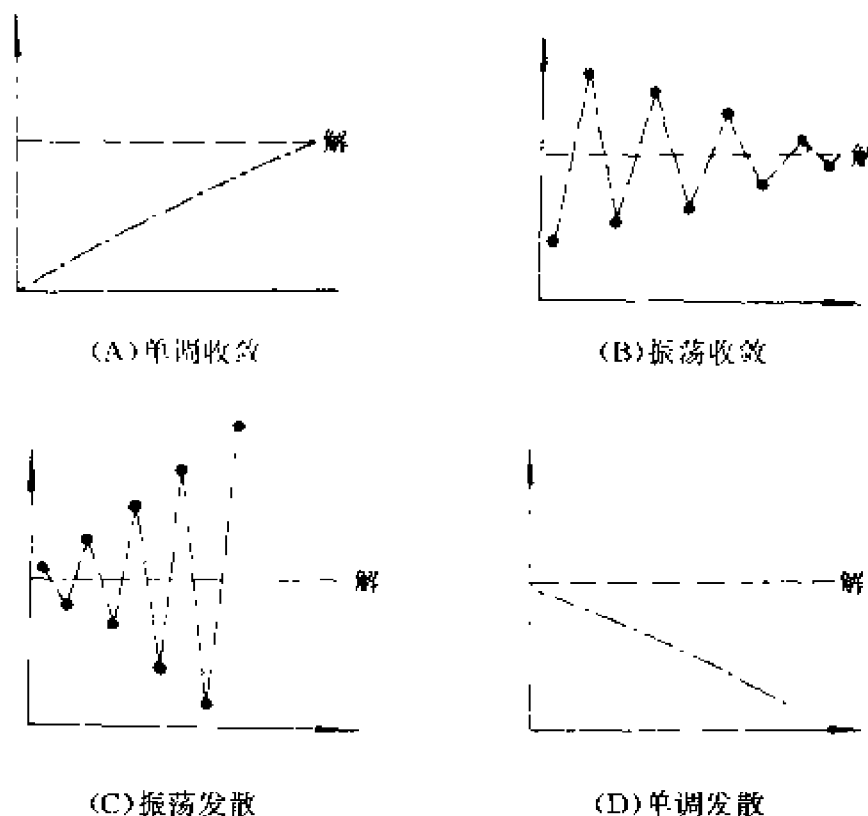


图 6-1 断裂流股迭代的几种情况

$$x^{(K+1)} = F(x^{(K)}) \quad (6-2)$$

对于一个实际的循环过程,只要断裂变量的初值不违背物料平衡和热量平衡的基本规律,直接迭代法是能收敛的,因为直接迭代相当于模拟一个化工装置的开工过程。但是如果初值离开解不够近,收敛的速度将很慢。为了加速收敛,最简单的办法是采用松弛因子 ω ,用不同的 ω 值来调节收敛特性。

$$x^{(K+1)} = \omega x^{(K)} + (1-\omega)F(x^{(K)}) \quad (6-3)$$

式中 ω 若在 0 到 1 的范围内,是对直接迭代增加阻尼作用,这对在收敛值附近振荡的过程可加速收敛且改善稳定性。 ω 小于零时为外推迭代,使收敛加快但稳定性下降。 ω 值究竟多大较为合适用直接迭代法尚无法预先估计。

6.1.3.2 Wegstein 法

Wegstein 法是在 1958 年提出的,至今它仍是应用最广泛的

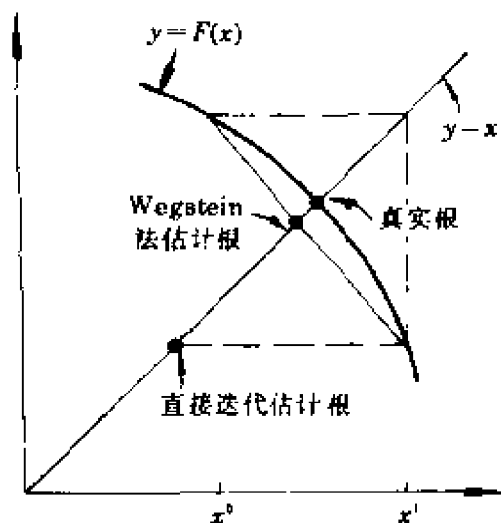


图 6-2 Wegstein 法思路

一种加速收敛的方法,现以单维方程的情况说明它的思路,其计算步骤如下:

(1)指定变量的初值 $x^{(0)}$ 代入函数式,进行两次直接迭代计算,即再用 $x^{(1)} = F(x^{(0)})$ 代入,得到 $F(x^{(1)})$ 。

(2)用两次计算结果决定一直线 AB,直线的斜率为 s

$$s = \frac{F(x^{(1)}) - F(x^{(0)})}{x^{(1)} - x^{(0)}} \quad (6-4)$$

直线方程:

$$F(x) = F(x^{(0)}) + s(x - x^{(0)}) \quad (6-5)$$

(3)取直线 AB 和 $y=x$ 的 45° 线的交点为下一次迭代中迭代变量的设定值:

$$x^{(2)} - F(x^{(1)}) = s(x^{(2)} - x^{(1)}) \quad (6-6)$$

$$\text{令 } s = \frac{q}{q-1} \quad (6-7)$$

$$\text{即 } q = \frac{s}{s-1}$$

$$\text{则式(6-6)成为 } x^{(2)} = qx^{(1)} + (1-q)F(x^{(1)}) \quad (6-8)$$

式(6-8)和式(6-3)完全相同,可见 Wegstein 法实质上是用两次迭代计算结果来求取松弛因子,它的图解意义见图 6-2。

由于每一次迭代所得到的 $F(x)$ 的值都在变化。因此 q 值也一直在变化,但经过几次迭代后, q 就逐步达到一个较稳定的值,可

以根据 q 值的大小判断收敛性质： $q < 0$ 时为单调收敛， $0 < q < 0.5$ 为振荡收敛， $0.5 < q < 1$ 为振荡发散， $q > 1$ 为单调发散。因此若在迭代过程中发生 q 值过大或过小的情况，可以不使用计算所得到的值而人为地将 q 限制在一定范围内，这就是界限 Wegstein 法。各种流程模拟软件允许用户输入 q 的最大和最小值，若用户没有经验不输入，软件就将使用补缺值(Default Value)。ASPEN 和 FLOW TRAN 使用的补缺值都是 $q_{\max} = 0, q_{\min} = -5$ 。

对于多维的情况，也能将此法分别用于每一个组元，迭代公式为：

$$s_i = \frac{F_i(\bar{x}^{(K)}) + F_i(\bar{x}^{(K-1)})}{x_i^{(K)} - x_i^{(K-1)}} \quad (6-9)$$

$$q_i = \frac{s_i}{s_i - 1} \quad (6-10)$$

$$x_i^{(K+1)} = q_i x_i^{(K)} + (1 - q_i) F_i(\bar{x}^{(K)}) \quad (6-11)$$

由以上三式可知各变量的 q_i 值完全根据各变量在迭代过程中各自的变化，忽略了各变量之间的交互作用，因此只适用于变量之间交联较弱的情况；若变量之间为强交联，则应采用 Broyden 法，或主特征根法。所幸在多数化工过程模拟问题中各迭代变量之间的相互影响可以忽略，因此 Wegstein 法在流程模拟中得到广泛的应用。

例 6-2 由乙烯与氯生产氯乙烯的过程如下图所示：

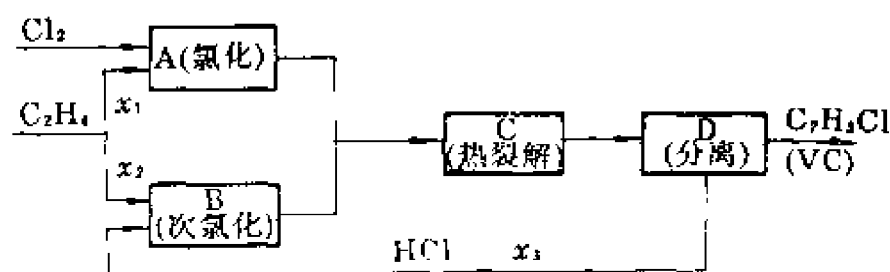
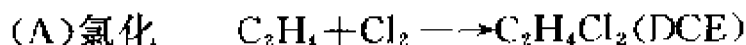
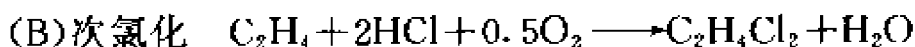


图 6-3 氯乙烯生产过程示意图

在各反应器中发生如下反应：

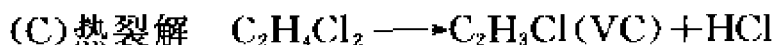


DCE 收率为 98%



DCE 以乙烯为基准的收率为 95%，

以 HCl 基准的收率为 90%



VC 的收率为 99%，HCl 的收率为 99.5%

设 VC 产量为 12500kg/h, 试用联立代数方程法和迭代法求解 Cl_2 和 C_2H_4 流量及 HCl 的循环量。

解: (1)代数方法

VC、DCE、HCl 分子量分别为 62.5, 99.0, 36.5

$$\text{VC} = 12500 / 62.5 = 200 \text{ kmol/h}$$

设 C_2H_4 进入 (A) 的流量为 x_1 , 进入 (B) 的流量为 x_2 , HCl 循环流量为 x_3 , 则有 $x_3 = 0.995(0.98x_1 + 0.95x_2)$ (1)

在 (B) 中, 以 HCl 为基准, DCE 产量为 $0.90x_3/2$; 以 C_2H_4 为基准, DCE 产量为 $0.95x_2$ 。所以, $0.90x_3/2 = 0.95x_2$,

$$\text{即 } x_3 = 0.95 \times 2x_2 / 0.90 = 2.111x_2 \quad (2)$$

联立 (1) 和 (2),

$$x_2 = 0.995(0.98x_1 + 0.95x_2) \times 0.9 / 1.9$$

重新排列得

$$x_2 = 0.837x_1 \quad (3)$$

在 (C) 中,

$$0.99(0.98x_1 + 0.95x_2) = 200 \quad (4)$$

联立 (3) 和 (4), 得

$$x_1 = 113.8 \text{ kmol/h}$$

$$x_2 = 95.3 \text{ kmol/h}$$

因此,

$$\text{Cl}_2 \text{ 流量} = x_1 = 113.8 \text{ kmol/h}$$

$$\text{C}_2\text{H}_4 \text{ 流量} = x_1 + x_2 = 209.1 \text{ kmol/h}$$

$$\text{HCl 循环量 } x_3 = 0.995 \times (0.98 \times 113.8 + 0.95 \times 95.3)$$

$$=201.1\text{kmol/h}$$

(2)直接迭代法

设以 HCl 的循环量 x_3 作为迭代变量,将式(2)和(4)重新排列得:

$$x_2=0.4737x_3 \quad (5)$$

$$x_1=206.14-0.969x_2 \quad (6)$$

迭代的步骤为:

1)假设 x_3

2)用式(5)和式(6)求出 x_2 和 x_1

3)用求出的 x_2 和 x_1 代入式(1),和假设值进行比较,若误差已达到收敛指标则结束计算,否则用计算得到的 x_3 代入式(5)重复计算,直到收敛为止。

若 x_3 的初值为 150kmol/h,迭代过程各变量的值如下

迭代次数	x_3	x_2	x_1
1	150	71.055	137.287
2	202.044	95.708	113.399
3	201.04	95.234	113.858
4	201.04		

由此可知迭代 4 次即可收敛。

(3)Wegstein 法

用 Wegstein 法时 x_3 的初值与直接迭代法相同,取 150kmol/h,利用直接迭代法的数据得:

$$x^{(0)}=150$$

$$F(x^{(0)})=202.044$$

$$x^{(1)}=202.044$$

$$F(x^{(1)})=201.04$$

因此

$$s=\frac{202.044-201.04}{202.044-150}=0.01929$$

$$q=\frac{s}{s-1}=\frac{0.01929}{0.01929-1}=-0.01967$$

$$x^{(2)} = qx^{(1)} + (1 - q)F(x^{(1)}) = -0.01967 \times 202.044 + 1.01967 \times 201.04 = 201.02$$

$$F(x^{(2)}) = 201.04$$

误差已小于 0.0001, 过程收敛

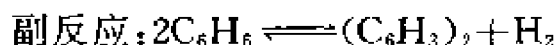
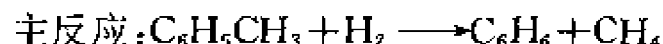
6.1.4 物料的排放

物料的排放是为了防止循环过程中某些组分的积聚。例如在反应器进料中含有不参加反应的组分, 或者在反应过程中生成某组分, 该组分难以在后续分离过程中分离, 我们将这样两种组分称为惰性组分。如果有循环物流, 惰性组分就将随同循环物流返回至反应器进口而在系统中积聚起来。所以, 必须排放掉一部分物料以保证这些组分的量在允许范围内。很明显, 排放的地点应是该组分的高浓度区, 排放的量在稳态操作时应满足下式:

排放气中所含惰性组分量 = 该惰性组分随进料加入的量 + 反应过程中生成量

排放气中惰性组份的浓度是个需要决策的工艺参数。因为, 若排放气中惰性组分浓度高, 反应物或产物的损失就少, 但是循环气体所需的压缩功和其他循环所需的费用大。综合考虑这两个因素, 必然有最佳惰性气排放浓度。

例 6-3 有甲苯脱烷基制苯过程, 其反应式如下:



反应器的进口压力为 3450kPa, 为提高选择性和减轻反应器结焦, 氢与甲烷进反应器的分子比为 5:1。当转化率 X 为 70% 时, 选择性为 97.69%。进料氢气的组成为 95% H₂, 5% CH₄。设循环气体压缩功的设备折旧费和操作费用为 0.4 元/(kw · h), 氢气的价格为 4000 元/吨, 不计循环中物料加热冷却所需的费用, 试确定排放气体的 CH₄ 浓度。

解: 根据题意该过程的流程结构如下:

(1) 列出各组分物料平衡方程^[14]

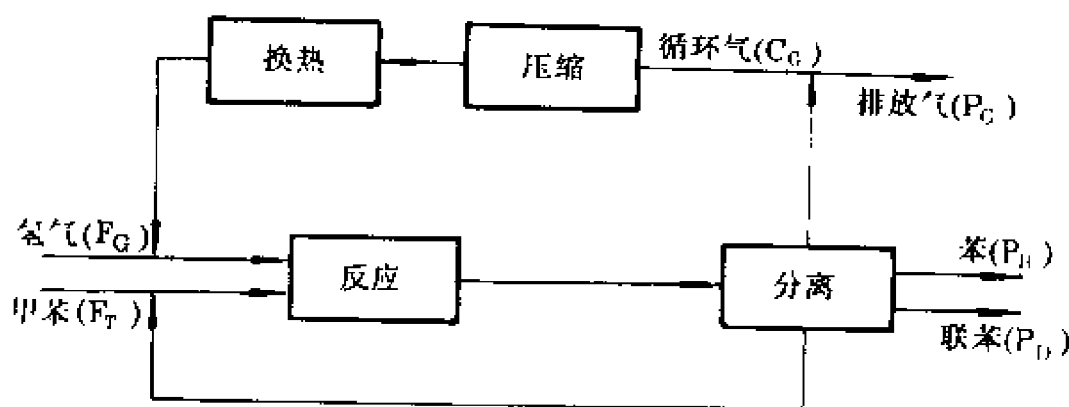


图 6-4 甲苯脱烷基制苯过程示意图

$$\text{甲苯: } F_T = P_B / S \quad (1)$$

$$\text{联苯: } P_D = P_B \times \frac{1-S}{2S} \quad (2)$$

$$\text{氢: } 0.95F_G = P_B / S (1 - \frac{1-S}{2}) + y_{PH} \cdot P_G \quad (3)$$

$$\text{甲烷: } 0.05F_G + P_D / S = (1 - y_{PH}) P_G \quad (4)$$

(3)加(4):

$$\text{排入气量 } P_G = F_G + P_B (\frac{1-S}{2S}) = F_G + P_D \quad (5)$$

以(5)代入(3)

$$\text{补充氢气 } F_G = \frac{P_B}{S(0.95 - y_{PH})} [1 - \frac{1}{2}(1 - y_{PH})(1 - S)] \quad (6)$$

$$\text{循环气量 } C_G = [(F_T / x) \times 5 - (F_G \times 0.95)] / y_{PH} \quad (7)$$

上述各式符号如下:

F_T, F_G ——甲苯和氢气进料量;

P_B, P_D ——苯和联苯产量;

P_G ——排放气量;

y_{PH} ——排放气中氢的含量, mol %;

C_G ——循环气量;

S ——选择性;

x ——转化率。

(2) 假设 $F_T = 100 \text{ kmol}$, $y_{PH} = 40\%$, 求循环气量、补充气量和循环压缩机功率。

$$F_G = \frac{100}{0.9769(0.95-0.4)}(1-0.5 \times 0.6 \times 0.0231) \\ = 184.3 \text{ kmol}$$

$$P_G = 184.8 + 100 \times \frac{1-0.9769}{2} \\ = 186 \text{ kmol}$$

$$C_G = \frac{100/0.7 \times 5 - 184.8 \times 0.95}{0.4} \\ = 1348 \text{ kmol}$$

设反应器出口至循环气压缩机进口的压降为 450kPa, 进口温度 313K, 压缩机出口压力为 3500kPa, 压缩过程的多变指数 $n=1.4$, 效率 $\eta=0.72$, 压缩因子 $z=1$, 每 kmol 循环压缩机的理论功耗:

$$W = \frac{n}{n-1} \times zRT \left[\left(\frac{p_2}{p_1} \right)^{(n-1)/n} - 1 \right] \\ = \frac{1.4}{1.4-1} \times 1.0 \times 8.314 \times 313 \times \left[\left(\frac{35}{30} \right)^{0.4/1.4} - 1 \right] \\ = 410.11 \text{ kJ/kmol}$$

故循环压缩机理论功率消耗:

$$W \times C_G = 1348 \times 410.11 = 5.53 \times 10^8 \text{ kJ} = 154.6 \text{ kW} \cdot \text{h}$$

实际功率消耗:

$$W \times C_G / \eta = 154.5 / 0.72 = 214.5 \text{ kW} \cdot \text{h}$$

(3) 计算各种 y_{PH} 下的 F_G 和压缩功, 计算结果列于下表:

y_{PH}	0.05	0.1	0.2	0.4	0.6	0.8
P_G	113.7	120.4	136.4	186	292.3	682
F_G	112.5	119.2	135.2	184.8	291.1	680.5
C_G	12192	6034.2	2942.5	1356.5	739.7	102.7
W	1929	954.7	465.6	214.6	117.0	16.3

(4) 计算各种 y_{PH} 下的氢气成本和操作费用

y_{PH}	0.05	0.1	0.2	0.4	0.6	0.8
氢气成本	958.3	1015	1152	1574	2480	5800
操作费用	771.6	318.9	106.2	85.8	46.8	6.5
总生产费用	1729.9	1336.9	1258.2	1659.8	2226.8	5806.5

由此可见,应取 $y_{PH}=20\%$,此时总生产费用最低。

6.2 流程模拟的几种方法^{[1][4]}

图 6-5 表示一个仅含三个单元过程的简单系统:

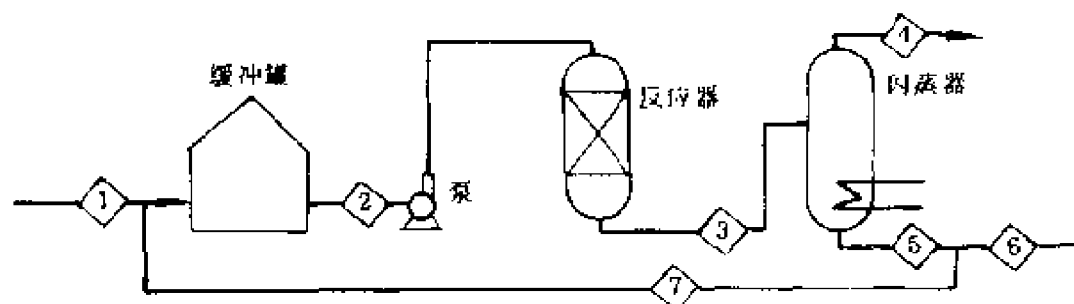


图 6.5 流程示意图

进料流①与循环物流⑦在缓冲罐混合后经泵进入反应器,其反应式如下:



产品 P 的气液平衡常数较原料 A 和副产品 S 大得多,因此通过一级闪蒸就能达到较高的分离度。闪蒸塔塔顶主要是产品 P,塔釜主要是 A 和 S。为了使副产品 S 不在系统内累积,需从系统中排放部分釜液物流⑥。

即使描述这样一个简单的子系统,也包含了许多线性和非线性方程。因此化工过程数学模拟就是求解这些线性和非线性方程的过程,而不同的解法就形成了不同的模拟计算方法,下面作简单介绍。

6.2.1 序贯模块法

序贯模块法的基本思路是:

(1)对每一类单元设备或设备的组合或过程,都根据其数学模型编制一个子程序,这种子程序就称为模块。序贯法中所有模块都

是核算型的,即给定输入流值和单元设备参数值计算所有的输出流股值。分析图 6-5 所示的流程,需建立或调用的模块是混和、反应、闪蒸和分流。

(2)将流程用一个框图来表示,图中的节点是单元模块,流股(物流、能流)是连接节点的边,表 6-5 所示流程的框图见图 6-6。

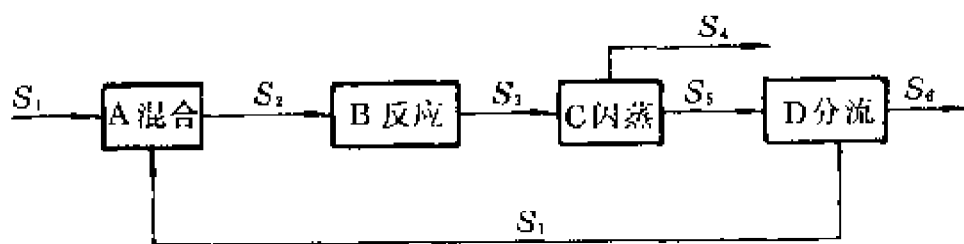


图 6-6 图 6-5 的框图

(3)寻找一个适当的顺序,依次计算组成流程的各个单元模块,若流程中有循环物流,必须对循环物流进行“切断”,假设循环物流的初值,再依次进行计算。

图 6-6 所示框图进行计算时需切断的流股是 S_7 ,进行计算的顺序是 A、B、C、D。

(4)进行迭代计算,直到过程收敛为止。

由此可知,序贯模块法的数学实质是将大系统分解成若干块小的子系统,将高阶方程组降阶为低阶方程组进行迭代求解。这种算法在运算时严格按信息流方向进行,与过程实际进行的方向和步骤一致,因而直观,容易掌握,特别是用计算机进行模拟计算时,可以将各单元模块编制成规格化的子程序,使其具有广泛的通用性质,使用方便,因而是目前使用最多的流程模拟算法。

但是应该充分认识到,迭代计算严重影响计算效率,通常用序贯法进行化工过程计算要进行三个基本层次的迭代收敛运算:物性计算、单元设备计算和系统环路迭代,尤其对多环路系统,要进行多环的逐层收敛,计算量很大。此外,序贯法由于有些设计规定不能直接作用于单元模块的输入,也不能直接在系统水平的收敛

中处理,因此必须通过一个控制模块用一个附加的迭代环路(控制环路)来反复处理模拟过程,直到设计规定满足为止,从而严重降低计算效率。

6.2.2 联立方程法

为了克服序贯模块法计算效率低的缺点产生了联立方程法。与序贯法相比,该法以一次收敛来代替逐层收敛过程,因而改善了全局收敛性质。

已经提到,实际化工过程是由许多线性与非线性方程来描述的,若将全部方程放在一起就构成一组大型非线性方程组。如果不考虑每一个方程或方程组的具体物理意义和具体功能,而将所有方程同时求解,那么模拟计算问题就是一个与流程结构无关的纯数学求解问题。这种方法就是联立方程法。

具体地说,就是将描述过程的全部方程式,即物料平衡方程、能量平衡方程、相平衡方程、化学反应计量方程、反应速率和化学平衡方程、热物理性质估算方程、物性估算、质量、热量及动量传递方程收集在一起,建立起一个大型非线性方程组,然后分析其自由度,选定设计规定或设计变量,使方程组的自由度数为零,再采用一定的数学方法求解该非线性的方程组。有关如何求解这种大型的,特殊的方程组同样有许多专论,在此不展开讨论。对于图6-5所示的流程,联立方程法的求解步骤如下:

(1)建立各单元的数学模型。

为了简化计算起见。不行动量计算,假设各单元阻力为零。

1)混合器

物料进口流股号为1,7,出口流股号为2

$$\text{压力平衡 } p_2 = \min(p_1, p_7) \quad (1)$$

$$\text{组分物料平衡 } F_1 \cdot x_{1,j} + F_7 \cdot x_{7,j} = F_2 \cdot x_{2,j} \quad j=1,2,3 \quad (2) \sim (4)$$

$$\text{热量平衡 } F_1 \cdot H_1 + F_7 \cdot H_7 = F_2 H_2 \quad (5)$$

上述各式中 F 、 P 、 H 指物流的流量、压力、比焓,下标数字指

流股号,下标j指组分编号,以下同。

2) 反应器

假设反应器为最简单的收率模型的绝热反应器,即指定各反应的转化程度 α_{12} 和 α_{13} ,计算出口物流参数。

进口流股号为2,出口流股号为3。

令A的组分编号为1,P为2,S为3

$$\text{压力平衡} \quad p_3 = p_2 \quad (6)$$

$$\text{组分物料平衡} \quad F_3 x_{3,2} = F_2 x_{2,1} \cdot \alpha_{12} \quad (7)$$

$$F_3 x_{3,3} = F_2 x_{2,1} \cdot \alpha_{13} \quad (8)$$

$$F_3 x_{3,1} = F_2 x_{2,1} \cdot (1 - \alpha_{12} - \alpha_{13}) \quad (9)$$

$$\text{热量平衡} \quad F_1 \cdot H_2 = F_1 \cdot H_3 \quad (10)$$

式中 α_{12} 为A反应生成P的转化率;

α_{13} 为A反应生成S的转化率。

3) 闪蒸器

进料流股号为3,出口汽相为4,出口液相为5

$$\text{组分物料平衡} \quad F_3 x_{3,j} = F_4 x_{4,j} + F_5 x_{5,j} \quad j=1,2,3 \quad (11) \sim (13)$$

$$\text{相平衡} \quad x_{4,j} = x_{5,j} K_j \quad j=1,2,3 \quad (14) \sim (16)$$

压力平衡

$$p_4 = p \quad (17)$$

$$p_5 = p \quad (18)$$

归一方程

$$\sum_{j=1}^3 K_j x_{5,j} - 1 = 0 \quad (19)$$

$$\text{热量平衡} \quad F_3 H_3 + Q = F_4 H_4 + F_5 H_5 \quad (20)$$

4) 分流器

进口流股号为5,出口流股号为6,7

$$F_6 x_{6,j} = F_5 \cdot x_{5,j} \cdot \alpha \quad j=1,2,3 \quad (21) \sim (23)$$

$$F_7 x_{7,j} = F_5 \cdot x_{5,j} \cdot (1 - \alpha) \quad j=1,2,3 \quad (24) \sim (26)$$

$$T_6 = T_5 \quad (27)$$

$$T_7 = T_5 \quad (28)$$

$$p_6 = p_5 \quad (29)$$

$$p_7 = p_5 \quad (30)$$

式中 α 为分割系数 $\alpha = F_6/F_5$

T 为温度。

(2) 进行自由度分析, 确定设计变量。

变量数

物流变量: 共 7 个流, 每个流的组分数为 3, 故变量数^① 为:

$$7(3+2) = 35 \quad 35$$

单元变量: 反应器 2

 闪 蒸 2

 分 流 1

$$\text{变量总数} \quad 40$$

$$\text{自由度} = 40 - 30 = 10$$

一般情况下, 应取进料变量或出料变量、设备参数变量为设计变量。在此案例中, 进料(或出料)变量数为 5, 设备参数变量也为 5 个, 两者相加等于自由度。因此, 独立方程数和独立变量数相等, 方程组可以求解。但再仔细分析一下方程组, 可以发现其中有 $K_1 \sim K_3$, $F_1 \sim F_7$, $H_1 \sim H_5$ 共 15 个因变量没有赋值, 而这些因变量为 x, p, T 的函数, 因此应至少补上至少 15 个方程。需求解的方程组是一个大于 45 阶的非线性方程组。

从上面分析可以看出, 联立方程法一次同时求解所有的方程, 对变量不加任何区别, 任何变量都可以作为独立变量, 具有很大灵活性。这种变量选择的灵活性还使得设计型计算和操作型计算在难度上和处理上没有区别, 因为设计问题和操作问题的差别就在于独立变量的选择。如果将进料和设备参数取为独立变量, 那就是操作问题, 如果将产品流股变量或其他序贯法的非独立变量取为独立变量, 那就是设计问题。所以联立方程法进行设计型计算比序

① 物流变量数的确定是 6.5.1 节。

贯法具有显著的优越性。

此外,由于联立方程组中各变量之间,各方程之间彼此地位同等,因而使联立方程法特别适用于控制和优化问题。因为此时只需简单地添加若干说明方程,然后纳入联立方程组一起求解即可,从而省去了控制优化模块的相应的迭代环路计算。

但是联立方程法也存在很大弱点。

①是必须解决大型非线性方程组的快速和稳定的求解问题。

②对一个较大规模的过程而言,待解的方程组的阶数可能成千上万,对这样的高阶方程组即使采用计算机,也需要有足够的内存和运算速度。

③尽管联立方程法一般有较快的求解速度,但是这有赖于较好的初值。

④联立方程法处理问题的出发点是方程(或变量)而不是单元模块,这就决定了它在计算机上的通用性不及序贯模块法,并加深了计算机程序编制和调试的难度。

⑤对有些化工过程要精确地写出其物理或化学模型的数学表达式以供联立求解并非易事。(以上诸原因使联立方程法的应用受到一定的限制。)

6.2.3 联立模块法

如前所述,由于联立方程法特别适宜求解线性系统,而序贯模块法因各个模块求解时只涉及该模块的输入流股变量和设备参数而使待解方程组的维数大大降低,且单元模块严格而通用,因此启发人们将两者结合成一种新的模拟方法:利用单元模块求系统的简化线性关系,然后联立求解,得到系统内各流股的值,如此反复进行,从而实现以一个线性系统逐步近似实际非线性系统的目的,这种方法就称联立模块法。显然,这种方法存在两个层次的计算:流程规模的联立求解和各单元模块的严格计算,整个模拟计算是在两个层次的交替计算中完成的,故又称为两层法。

这种方法由 Rosen 在 1962 年首次提出,后多年来经不少学

者的努力,正逐步实用化。

必须注意,联立模块法的计算效率取决于过程线性化的质量,这主要指两个因素:即构成线性模型所需的计算量和线性模型对实际过程的近似程度。这是两个互相联系而又有矛盾的因素,如果要使模型线性化合理、逼真,从而达到减少迭代次数的目的,则构造线性模型的计算量就可能很大。相反,欲减少构造线性模型的计算量,那么,线性近似效果就可能不够理想,甚至差别很大,从而造成迭代次数的增多。因此,联立模块法的线性化是这个方法成败的关键。

6.3 流程模拟软件的用途

流程模拟软件是化工过程合成、分析和优化最有用和不可缺少的工具,可以认为没有流程模拟软件就不可能得到技术先进合理、生产成本最低的化工装置设计。不仅如此,一个化工过程设计人员如果不了解流程模拟的基本原理和不会应用流程模拟软件,就不能利用这个工具进行训练,从中得到在没有流程模拟软件时,设计人员需要经过多年的设计实践和自觉的总结才能得到的对过程的深刻理解和工程判断能力,因此流程模拟软件能帮助和训练设计人员,使他们加速成熟,并达到一般不能使用流程模拟软件和不会分析计算结果的设计人员无法达到的高度,具体地说,流程模拟软件有如下六种用途。

(1)合成流程。

有经验的设计人员常用探试规则合成初始流程。根据不同的探试规则常能生成几个不同的流程方案,最终判断流程的优劣需要经过几个方案全流程的物料、能量衡算以及单元设备计算才能得出结论。没有流程模拟软件,要在一定的时间内完成如此繁复的工作是非常困难的,因此只能根据设计师的主观判断或少量方案比较结果作出决策,这在多数情况下不能得到最优的流程。

(2)工艺参数优化。

第5章用案例研究方法进行精馏塔参数优化的几个例题已充分说明工艺参数优化工作对流程模拟软件的依赖性,在6.9节即将叙述的灵敏度分析或直接优化法都要使用流程模拟软件才能快速而全面地进行。

(3)脱除瓶颈。

由于原料、公用工程条件或产品数量、质量要求的变化,或由于原设计考虑不周,可能使已建成的装置有某一设备成为瓶颈(薄弱环节)。分析生产数据可以得出哪个设备能力不足的定性结论,但究竟怎样改造要在新的条件下重新进行流程模拟和单元设备能力计算,得到定量数据后才能确定脱除瓶颈的方案。

(4)研究某些设计问题或操作问题。

流程模拟软件可以认为是一个具有各种单元设备的实验装置,能得到在一定的物流输入和过程条件下的输出,例如可以用闪蒸模块来研究泵的进口是否会抽空,减压或调节阀后液体是否有汽化,为保持所需要的相态应有的温度和压力等,也可利用精馏模块来研究进料组成变化对顶底产品组成的影响和应怎样调节工艺参数,为设计和操作分析提供定量的信息。

(5)进行参数灵敏度分析。

设计所采用的数学模型参数和物性数据等数据有可能不够精确,在实际生产过程中操作条件有可能受到外界干扰而偏离设计值,因此一个可靠的、易控制的设计应研究这些不确定因素对过程的影响以及应采取什么措施才能保证操作平稳,以始终满足产品的数量和质量指标,这就必须进行参数灵敏度分析。而流程模拟系统是进行参数灵敏度分析最有效最精确的工具。

(6)参数拟合。

高水平的流程模拟软件的数据库都有很强的参数拟合功能,即输入实验或生产数据,指定函数形式,模拟流程软件就能回归出函数中的各种系数。

因此,在过程开发阶段应用流程模拟软件,可以评价和筛选各种生产路线和方案,减少甚至取消中试的工作量,节省过程开发的

时间和经费的消耗;在过程设计阶段应用流程模拟软件,可以有效地优化流程结构和工艺参数,提高设计成品的质量;用流程模拟软件分析工厂的实际生产数据,可以确定最佳的工艺参数,达到改进操作,降低成本和/或提高产量的目的。因此,一个当代的化工过程工程师,应当掌握流程模拟的基本原理和方法,用这个有效的工具提高自己工作的价值。

6.4 流程模拟软件的组成

流程模拟虽然有 6.2 所述三种方法,但是至今为止得到广泛应用的是序贯模块法。序贯模块法软件由执行程序,单元模块,数据库,算法子程序,单元设备价格估算模块等几部分组成。下面介绍它的具体内容。

6.4.1 执行程序

执行程序又称为主控模块,它的具体任务是:

(1)检查输入数据,并将这些数据送至相应的单元模块,例如:

①检查数据是否在允许的范围内,例如精馏塔的塔板数不能超出程序允许的最大板数,反应器某组分的转化率应低于 1 等。

②输入的决策变量数是否和单元设备的自由度相等。

③流体编号是否重覆使用,即一个流体编号是否重覆出现在两个单元设备的输出物料中,或者某单元的进料物流无来源。

(2)决定计算次序。

用户在输入表示流程的拓朴表后;执行程序就决定流程的分割和计算顺序。所谓分割就是把整个流程分成可以独立运算的部分,各部分之间没有循环物流或其他反馈信息,如图 6-7 所示的流程可以分成三个部分,即 A 和 B,C、D、E、F、G、I 和 J 以及 H 三个部分。流程分割和排序的原理请参阅有关参考书。

不管拓朴表输入的单元模块的顺序如何,执行程序都将自动分割流程,并按照 A、B、C、D、E、F、G、I、J、H 的顺序进行计算。

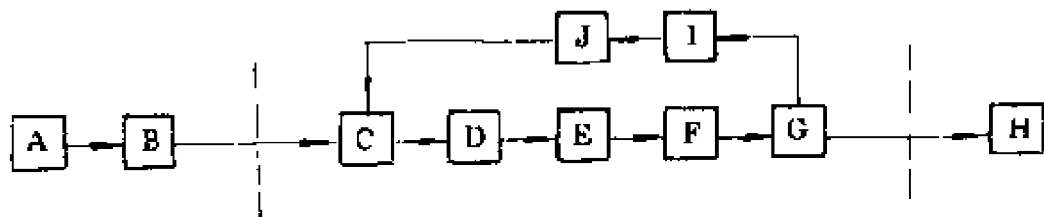


图 6-7 流程方块图

(3)向模块传递进行计算所需要的物流数据和模块参数,并贮存单元模块所产生的各种信息。

(4)判别循环物流或热流是否收敛,并根据用户的要求输出数据。用户要求指输出的单位和水平,输出的单位可以是SI制、米制或英制,物流的组成可用质量、体积或百分数表示等。输出水平指输出信息量的多少,例如塔器模块最少的输出信息量可以只有进出流股数据、冷凝器和再沸器负荷、逐板的温度和气液相流率,但根据要求可以输出逐板的气液相组成和各组分的气液平衡常数等数据。对于物流可以只输出组成、温度和压力,也可以要求输出焓、压缩因子、密度、比热容和粘度等状态变量。

6.4.2 物性数据库

物性数据库包括两个部分:物性数据和计算物性的子程序。一般通用流程模拟系统的物性数据库,有几百个至一千多个组分,物性数据包括分子量、临界温度、临界压力、临界分子体积、临界压缩因子、偏心因子、溶解度参数、偶根矩、标准生成热和标准生成自由焓、标准沸点、标准沸点下汽化热、零焓系数以及物性子程序所需要的各种系数,如安妥因常数,亨利常数、二元交互作用系数等。物性子程序用于估算单元模块计算和物流输出时所需的热力学性质和传递性质,如逸度、活度、汽液平衡常数、焓、熵、密度、粘度、导热

系数、扩散系数、表面张力等。因此在流程计算过程中,只要是数据库中包含的组分,使用者就不需输入任何物性数据。

物性数据库在流程模拟中有重要作用。第一,虽然流程模拟软件的鲁棒性和正确性取决于数学模型的质量,但计算精度却受制于物性数据的精度。第二,在流程模拟计算中,物性计算占据了大量计算时间,对于精馏、闪蒸等平衡级过程的计算更是如此,可能占总机时的 80% 以上。因此物性数据库能否快速而精确地向单元模块传递物性和物性是否齐全是评价流程模拟软件优劣的一个重要指标。有的流程模拟软件如 ASPEN, PROCESS 还有强大的参数回归功能,如果使用者有生产数据或实验数据,可以指定函数形式,拟合其中的系数。

6.4.3 算法子程序

算法子程序包括各种非线性方程组的数值解法,稀疏代数方程组解法,最优化算法,参数拟合、插值计算和各种迭代算法等。

6.4.4 成本估算和经济评价

第 2 章已经介绍了静态和动态的经济评价指标和各要素的估算方法,其中设备投资的估算公式即为 ASPEN 流程模拟软件采用的公式。成本估算和经济评价工作可以独立进行,也可以和流程模拟软件连接在一起,进行投资、操作费用和经济分析。

6.4.5 单元操作模块

一个化工过程通常包括反应、换热、压缩、闪蒸、精馏或吸收等分离单元。每一个单元过程都可用一个相应的模块表达。模块的数学模型,包括物料平衡、能量平衡、相平衡和速率方程,在输入进入单元的物流变量、设计变量和自数据库取得物性数据后,求解这些方程就能得到输出物流变量和单元的状态变量。

表 6-1 列出了 ASPEN 的单元模块名称,其他流程模拟软件如 Process 和 ChemCAD 也有这些模块,但模块名称不相同。

表 6-1 ASPEN 单元模块名称

序号	单元设备	模块名称	补充说明
	换热器		
1	加热(冷却)器	HEATR	一股为工艺物料,另一股为公用工程,只计算热负荷 可以根据用户提供的传热系数计算传热面 只计算热负荷
2	两股物料换热	HEATX	
3	多股物料换热	MHEATX	
	闪蒸		
4	二相闪蒸	FLASH2	
5	三相闪蒸	FLASH3	
	多级平衡级计算		
	简捷精馏		
6	设计型	DSTWU	
7	核算型	DISTL	
8	严格精馏	RADFRAC	
9	多塔精馏	MULTIFRAC	
10	吸收塔	ABSORBER	
11	萃取塔	EXTRACT	
	反应器		
12	化学计量反应器	RSTOIC	
13	规定产率反应器	RYIELD	
14	化学平衡反应器	REQUIL	
15	最小自由能平衡反应器	RGIBBS	
16	连续搅拌釜反应器	RCSTR	
17	活塞流反应器	RPLUG	
18	间歇反应器	RBATCH	
19	混合器	MIXER	把物流或热流或功合并成一个流股
20	分割器	FSPLIT	把一股物流或热流或功分成性质相同的几股流
21	分离器	SEP	根据各个组分的分割率,分成两股以上组成不同的流股
22	泵	PUMP	
23	单级压缩	COMPR	
24	多级压缩	MCOMPR	

6.5 化工过程的自由度分析

在第一章中已经说明描述化工过程的方程数极多,对复杂过程其方程数可能有成千上万个,而其中包含的变量数还超过方程数,两者之差值等于自由度,即

$$D = M - N \quad (6-12)$$

式中 D ——自由度;

M ——变量数;

N ——方程数。

为了使方程有解,必须在求解以前设定 D 个变量,并且既不能设定不足,也不能过量设定,这 D 个独立变量称为决策变量或设计变量。因此,必须对单元的全过程进行自由度分析,才能正确地建立模型和求解模型。

6.5.1 物流的独立变量数

在流程计算中,单元操作模块由物流连接,因此,首先需要解决物流的独立变量问题。

描述一物流性质的变量有各组分流率(或总流量和组成)、温度、压力、相态、焓、熵、自由能、粘度、密度、比热容等,这些变量中究竟有多少个是独立变量,即规定几个物性就能求出其他变量值,这就是物流的自由度问题。

根据 Duhem 定理,对一个已知每个组分初始质量的封闭系统,不论有多少相,多少化学反应或多少组分,其平衡状态完全取决于两个独立变量。我们可以应用这一原理来求物流的独立变量数。设一个物流在一定时间内流入一个封闭容器,此时就可应用 Duhem 定理。当每个组分为已知时,其自由度为二。因此,虽然进行单元设备计算时需要知道物流很多特性,如焓、逸度、熵、密度、粘度和导热系数等等,但是一个物流的独立变量数为组分数加二,用公式表示是 $D = c + 2$, D 为自由度, c 为组分数。因此在确定各

组分流量和两个状态变量后,物流的其他性质就完全确定,这两个状态变量通常取温度和压力。表示物流性质,数量至少为 $c+2$ 个的变量数组称为流数组。

6.5.2 单元模块的自由度

6.5.2.1 设备参数

一个单元设备有很多变量,但用于模块自由度分析的变量是指和物料衡算直接有关的变量。例如,精馏塔有实际板数、板间距、溢流堰高度、长度、开孔率、降液管体积等参数,但这些参数都是间接地通过理论板数这一变量和物料平衡发生关系,因此这些变量都不是自由度分析中所指的设备参数,仅理论板数是设备参数。

6.5.2.2 独立方程

推导一个单元模块的数学模型,似乎是个简单的问题,不外乎物料平衡、热量平衡和动量平衡,但当单元模块内有化学反应发生或者存在一个以上处于平衡的相态时,物料衡算必须服从化学反应和相平衡的规律。若物料和热量衡算方程组中出现若干个流股的非独立变量,则必须增加相应的方程,这时单元模块的自由度不变。需注意不要写多余的、不能独立的方程或者漏掉某些方程。单元模块的独立方程数等于进料的独立变量数加设备参数,每个方程应能得出出料的一个独立变量。

6.5.2.3 单元模块的自由度分析

现以平衡级过程和反应过程为例进行说明。

A 闪蒸单元

闪蒸过程有一股进料和两股出料,物流的独立变量数为 $3(c+2)$ 。闪蒸器的压力和温度(或热量)为设备参数,因此闪蒸单元的变量数为 $3(c+2)+2=3c+8$ 。

闪蒸的独立方程组如下:

组分物料平衡 $F \cdot Z_i = V \cdot Y_i + L \cdot X_i \quad i=1,2,\dots,c$

相平衡 $Y_i = K_i X_i \quad i=1,2,\dots,c$

热量平衡 $FH_F + Q = VH_V + LH_L$

$$\text{归一方程} \quad \sum_{i=1}^c K_i x_i - 1 = 0$$

压力平衡

$$p_v = p$$

$$p_L = p_v$$

以上共 $2(c+2)$ 个方程, 因此闪蒸器的自由度为 $(3c+8)-2(c+2)=c+4$ 。若进料变量 $c+2$ 个全部指定, 闪蒸单元的自由度为 2。

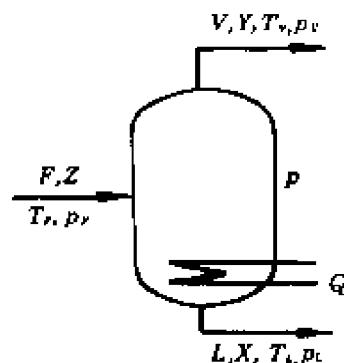


图 6-8 闪蒸单元

除此以外, 在方程组中还出现了 K_i, H_F, H_v, H_L 等变量也需补上相应的辅助方程; 因此, 解单元模块所用到的方程数大于独立方程数, 其他模块的情况也相同。

B 塔器单元

设塔有 N 个平衡级和 m 个进料, 可以从任意块塔板气相或液相出料。

物料变量数

进料	$m(c+2)$
----	----------

出料	$2N(c+2)$
----	-----------

塔器变量数

塔压	N
----	-----

平衡级数	1
------	---

进料板位置	m
-------	-----

出料数量	$2N$
------	------

塔板上加入或抽出热量	$N-2$
------------	-------

变量数合计	$m(c+3)+2N(c+4)-1$
-------	--------------------

独立方程数

组分物料平衡	cN
--------	------

相平衡	cN
-----	------

热量平衡	N
------	-----

归一方程	N
压力平衡 $p_v = p$	N
$p_v = p_L$	N
总计	$2cN + 4N$
自由度 $m(c+3) + 2N(c+4) - 1 - (2cN + 4N)$	
$= m(c+3) + 4N - 1$	

C 反应器单元

反应器自由度的确定同其他单元设备不同,不同类型的反应器有不同的自由度数目,例如绝热固定床反应器当进口物流状态和反应器体积或反应时间确定后,反应器的其他参数和出口物流状态就完全确定。但对列管式反应器而言,还必须输入冷剂或热剂的进出口温度、流向及一些设备结构参数才能确定出口物流状态。在流程模拟中主要目的是计算物料和能量平衡,常用指定产率或转化率模型,这时需输入的设计变量为反应器压降、出口温度或反应过程传热量、化学反应的转化率或某组分的产率。所以自由度等于 $(c+2)+2+r$,其中 r 为反应数或指定产率的组分数。若选择化学计量反应器还必须输入反应的计量系数。

表 6-2 汇总了各主要单元模块自由度分析和序贯法常用的设计变量。

由表 6-2 所列数据可见,各个单元模块的自由度等于进料的独立变量数加设备参数的数量之和这个结论是正确的。

6.5.3 流程的自由度

由单元模块的自由度分析可知,其自由度由两部分组成:一部分是进口物流的自由度,另一部分为设备参数。在流程中除与进料相连接的单元设备外,其余单元设备的进料均来自上游单元,因此流程的自由度等于进入流程的各物流的自由度之和加上各单元设备的设备参数之和。

表 6-2 各单元自由度分析和序贯法常用设计变量表

单元名称	图 例	变量数	独立方程数	自由度	序贯法常用设计变量	备 注
混合器		$3(c+2)$	$c+2$	$2(c+2)$	①②的全部变量	c 组分数
反应器		$2(c+2) + 2$	$c+2$	$(c+2) + 2$	①全部变量及设备参数	r —反应数或指定产率的组分数 Q —热量 t —停留时间 V —反应器体积 y —反应转化率 p —出口压力
闪蒸器		$3(c+2) + 2$	$2c+4$	$(c+2) + 2$	(1) $c+2, p, Q$ (2) $c+2, p, T_2$ (3) $c+2, p, F, (F_2)$	T —温度 F —流量
分流器		$3(c+2) + 1$	$2c+4$	$(c+2) + 1$	① $c+2, F_2/F_1$	
换热器		$(c+2) + 2$	$c+2$	$(c+2) + 2$	(1) $c+2, Q, \Delta p$ (2) $c+2, T_2, \Delta p$	Δp 压力降
塔器		$m(c+3) - 4N - 1$	$2N(c+2)$	$m(c+2) + m + 4N - 1$	进料全部变量和位置 $m(c+3)$, 出料数量 $2N-2$ 塔板加热量 $N-2$ 塔压 N , 总板数 L 其它变量 2 个	m —进料个数 n —平衡级数 D —顶出物 S_v, S_L —气液相侧线出料 B —塔底出料 F_i, F_m —进料
压缩机		$2(c+2) + 2$	$c+2$	$(c+2) + 2$	进出口压差, 效率	
泵		$2(c+2)$	$c+1$	$(c+2) + 1$	进出口压差	

例 6-4 脱甲烷系统的进料①含有 7 个组分, 经过逐级分凝和分离气液相, 得到气相物流⑧为甲烷氢混合物, 排出系统; 得到

的四股液相作为脱甲烷塔 D301 的进料,脱甲烷塔的理论板数为 30,塔顶有气液两相出料。塔釜为液相出料,无侧线,无塔板间换热。物料流程示意图见图 6-9(A),试分析该过程的自由度并指定设计变量。

解:(1)建立框块图见图 6-9(B)

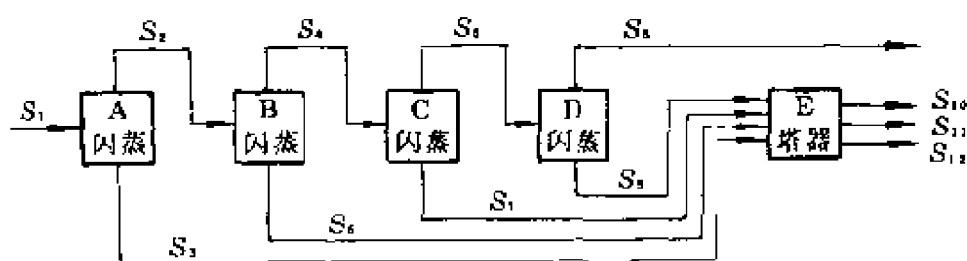
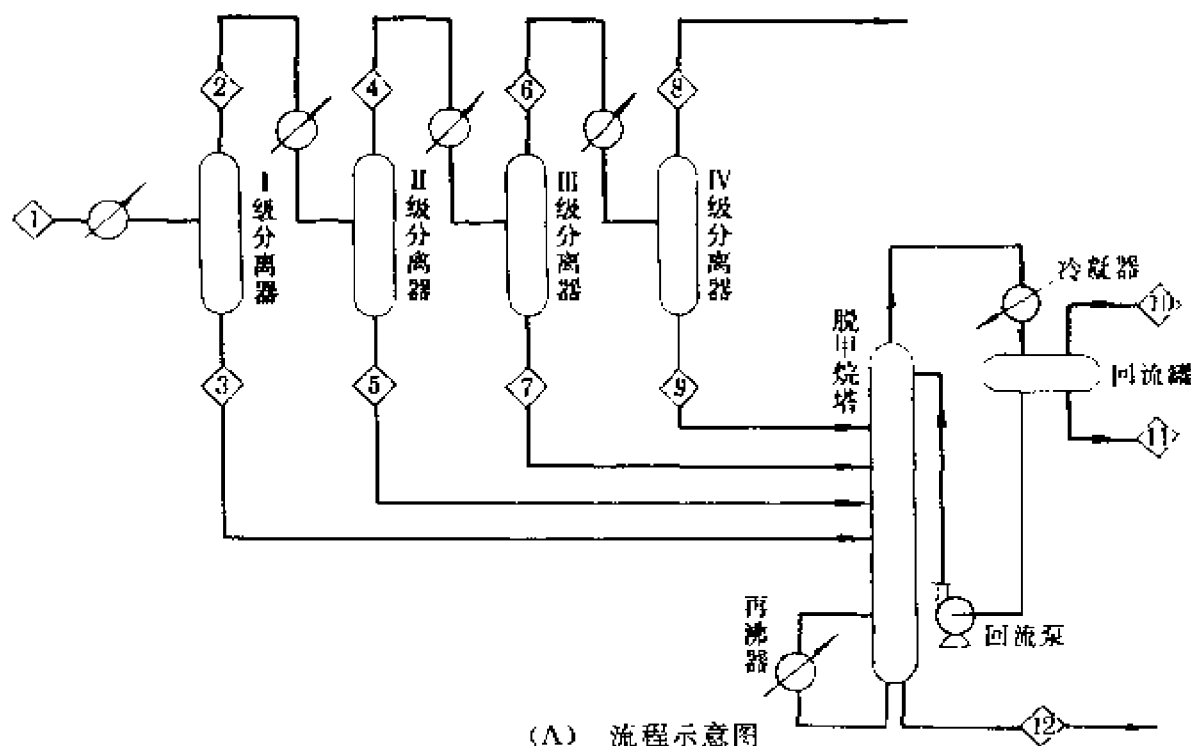


图 6-9 脱甲烷系统框块图

(2)单元模块的自由度

四个闪蒸模块各有两个设备参数,由于过程对闪蒸的冷凝率和热负荷并无特定要求,因此取最常用的设计变量组:出口压力和

出口温度。在四个闪蒸模块的温度和压力设定以后,物流③、⑤、⑦、⑧、⑨流数组的各个分量就都已确定。

D301 的设备参数有 $(m+4N-1)$ 个,根据题意 m 等于 4,设计变量取四股进料的进料板位置,其他设计变量是塔板压力 N 个,塔板加热量 $(N-2)$ 个都为零,总理论板数 1 个,侧线 $2(N-2)$ 个,出料和塔釜汽相出料共 $(2N-3)$ 个为零。剩下的三个变量可以取物流⑩、⑪、⑫中两个流量和回流比(或回流量)。

(3)全流程的自由度分析如下表所示:

	设计变量数	设计变量
进口物流①	$c+2$	z_1, p_1, T_1
单元设备		
V301	2	p_2, T_2
V302	2	p_4, T_4
V303	2	p_6, T_6
V304	2	p_8, T_8
D301	$m+4N-1=123$	塔板压力 30 个,塔板加热量 28 个,出料量 59 个,总理论板 1 个,进料板位置 4 个,回流量 1 个
全流程	$9+8+123=140$	

6.6 流程模拟的数据输入

流程模拟软件有两种输入方式,第一种是用关键字输入,第二种是表格式输入。表格式输入方式直观而明了,按照屏幕上出现的表格形式填入各种数据,因此较易避免错误,特别适合于使用流程模拟软件尚不熟练的人员。关键字输入对熟练用户能达到比表格式输入更快的输入速度,且能用 FORTRAN 语句表达表格式输入不能体现的要求,使用户有更大的自由度。

6.6.1 文件名称

一个课题的研究,一般不可能通过一次计算就完成,或者不要

求贮存计算结果以备查用,因此应输入文件名,计算机管理程序就将用户输入的各种信息和计算结果贮存在指定的文件内,使下次运算时不必重新输入各种数据或不必重覆运算就能查阅已有的计算结果。

6.6.2 单位的选择

用户根据需要可以选择 SI 制、英制、或米制。用户不加选择时系统就采用补缺值。

6.6.3 组分集

组分集(Component Set)是进入系统和在过程中产生的组分名称的集合。数据库根据组分集去寻找各组分的物性数据,把庞大的物性数组压缩成课题的专用数组。

6.6.4 热力学性质

流程模拟软件中包含有多种热力学性质计算方法,用户应根据物流的性质和过程的条件进行选择。郭天民^[3]曾对不同热力学性质计算公式的适用范围和精度作过评述。

6.6.4.1 极性溶液^[3]

适用于极性溶液的活度系数模型有由过剩自由焐概念导出的 Margules、Van Laar 模型,由局部组成概念导出的 Wilson、McCann、NRTL、UNIQUAC 模型和由官能团概念为基础的 UNIFAC 模型。Margules、Van Laar 模型由于需要不同分子间的交互作用系数,因而对二元以上溶液的活度计算需要很多由多元汽液平衡数据确定的参数,应用较困难。由局部组成概念导出的活度系数模型,对于多元系统计算所需的参数均可由相应各对二元系数数据确定,无需任何多元数据,因而得到广泛的应用,但是由于各种生产过程所涉及的组分极为广泛,即使仅需要二元汽液平衡数据仍不一定能从文献中获得,若不进行实验测定,仍然无法进行分离过程的计算。在这种情况下,采用 UNIFAC 模型是唯一的选择。这

种模型基于分子中各个官能团所起的作用是独立的,和分子中其他官能团无关的假设,因而各组分的性质可以通过叠加其结构官能团的有关性质来取得。这样尽管组分数极多,各种组分的混合物更是多得无法计数,但构成这些组分分子的官能团却不超过 100 个。流程模拟软件的数据库中包含了计算所需的官能团体积参数、表面积参数和相当数量的官能团交互作用参数,这就使得难以收集齐全的二元汽液平衡数据的极性溶液系统的汽液平衡常数估算成为可能。

上述各模型的简单比较如下:

(1)应用范围:

①除两参数 Wilson 模型外都能应用于部分互溶系统。

②除 UNQUAC 模型外都不能应用于大分子(聚合物溶液)。

(2)估算精度。

NRTL、Wilson 和 Mc Cann 模型均能对二元汽液平衡数据作较好的拟合;UNIFAC 模型也能对大多数系统作出较好的预测,但对某些系统有较大的偏差,对部分互溶系统预测的准确性也不如 NRTL 和 McCann 模型。

(3)计算速度。

Wilson 和 NRTL 模型最快,UNIFAC 模型次之,Mc Cann 模型最慢,需要的计算时间是 Wilson 或 NRTL 模型的 2-3 倍。

6.6.4.2 烃类溶液^{[3][7][8][9][10][11][12]}

烃类溶液有两类计算汽液平衡常数的模型:

(1)用不同的公式计算汽相逸度系数和液相活度系数

$$K_i = \frac{\gamma_i f_i^0}{\varphi_i p}$$

式中 k_i ——气液平衡常数;

γ_i ——液相活度系数;

f_i^0 ——标准态逸度;

φ_i ——汽相逸度系数;

p ——系统压力。

属于这一类的模型较著名的有 Chao-Seader, Lee-Erbar-Edmister, Pransnitz-Chueh 模型, 但给 ASPEN, Process 等流程模拟软件采用的只有 Chao-Seader 模型, 该模型适用于各类烃和含氢的烃类混合物, 对除甲烷以外的烃类适用的范围为对比温度 $T_r = 0.5 \sim 1.3$ (按纯组份的临界温度计), 对比压力 $p_r < 0.8$, 对氢气和甲烷, 系统温度不能低于 -73°C 。

(2) 用同一个 p - V - T 状态方程计算汽液相逸度和焓, 这一类模型中常用的有 Soave-Redlich-Kwong, Peng-Robinson, BWRS 和 Lee-Kesler 模型。

将上述各模型计算所得的汽液平衡常数与实验数据相比较, 可以得出下述结论: 计算结果与实验数据都比较接近, 但对不同的组分以及同一组分在不同温度、压力范围内, 各模型准确性的排列顺序是有变化的, 一般认为:

(1) 在接近临界区时 Chao-Seader 模型偏差很大不宜采用, 这是因为该模型假设液相中 i 组分的偏摩尔体积和纯液体 i 的摩尔体积相等。在高压下, 特别是接近临界区时上述假设产生严重的偏差。

(2) SRK 和 PR 模型具有简单、准确的优点。一般情况下 PR 方程的精度还高于 SRK, 但两者原来的模型都不适宜应用于含氢和温度低于 -70°C 的系统, 使应用受到限制。近来有学者提出了几种修正方法, 如用 Gray 关系式估算氢和石油馏分的交互作用系数, 修正液相氢的参数 a_i 和 b_i 企图使 PR 方程能适用于含氢系统。目前 SRK 和 PR 方程是被广泛使用的模型。

(3) BWRS 方程被认为是当前烃类分离计算中最佳模型之一。

用状态方程计算各种热力学性质都必须首先计算汽液相密度。SRK 和 PR 方程都只需求解一个三次方程就能得到密度, 而 BWRS 方程要求解一个六次方程才能得到密度, 因此前者可以用解析解而后者只能迭代求解, 使两者的计算速度相差几倍。但是 BWRS 精度高而且适用范围广, 适用的温度可以低到对比温度 T_r

$=0.3$, 压力可以高达对比密度 $\rho_r=3$, 在接近临界区时仍有很高的精度, 而且还适用于含氢系统。因此, 对于轻烃的低温分离, 它是一种不可缺少的热力学性质计算方法。

(4) 将 Lee-Kesler 方程应用于低温轻烃分离可能得到与实际生产数据最精确的结果。它的焓计算公式也被认为优于其他模型。

6.6.5 流 程

流程输入的信息包括设备位号, 设备名称, 使用的模块名称和设备之间的连接关系。连接关系用物流来表示。每一个物流都有一个编号, 各个物流的编号不能重复。在用表格式输入时, 输入的流程信息称为流程拓扑表。拓扑表中进入模块的物流编号为正值, 离开模块的物流编号为负值。若设备的进口物流与另一设备的出口物流编号相等, 则这两个设备相连接。

6.6.6 进料和循环物流

物流的独立变量数(在 6.5.1 节)已说明物流的自由度是 $c+2$, 因此只要输入 $c+2$ 个变量这个物流就完全确定。 c 个变量是输入物流的总流量和组成, 或者是每一个组分的流量; 其他两个变量一般选择温度和压力, 当然也可以用焓代替温度, 或者在物流为两相时用冷凝率代替温度或压力。但不必输入两个以上参数, 以免使几个参数在热力学上不一致而出错。

6.6.7 单元模块参数

根据表 6-2 所示各单元的自由度和序贯法常用设计变量输入所选择的设计变量的值。需注意的是除设计变量外有时还需要输入一些状态变量的估计值, 如塔器单元中的出料量、回流比、塔顶底温度等, 这些变量即使不作为设计变量也需输入估计值以加速收敛。

6.6.8 迭代方法和收敛精度

当有循环物流时需注明迭代方法。当采用 Wegstein 法或主特征根法等加速收敛方法时尚需输入 q 值或阻尼因子的上下限和延迟因子(Delay Factor)。所谓延迟因子(或等待系数)是指采用一次加速收敛方法前的直接迭代次数,若每次迭代都采用加速收敛方法可能会引起过程不稳定。

收敛精度一般在 $0.001 \sim 0.0001$ 范围内,如果用户对此值无经验可采用系统补缺值。

例 6-5 图 6-10 表示了例 6-3 所述的甲苯脱烷基制苯过程。进料甲苯①经过泵输送和加热后与氢气进料④以及循环气体⑤合并、进入反应器进行反应,生成主产物苯和副产物联苯。出口物流⑥经冷却成为气液两相混合物,在闪蒸器中进行分离,气相⑦是氢气、甲烷和少量的苯,液相⑧是苯、未反应的甲苯、联苯及少量甲烷和氢。物流⑦一部分排空,一部分经过循环压缩机升压后返回反应器进口,液相⑧去苯精馏塔分离苯和甲苯。由于进料中含有少量甲烷和氢,苯从侧线出料,塔顶排出甲烷和氢。物流⑨去甲苯回收塔,塔顶出料⑩经泵加压后与进料甲苯混合,塔底

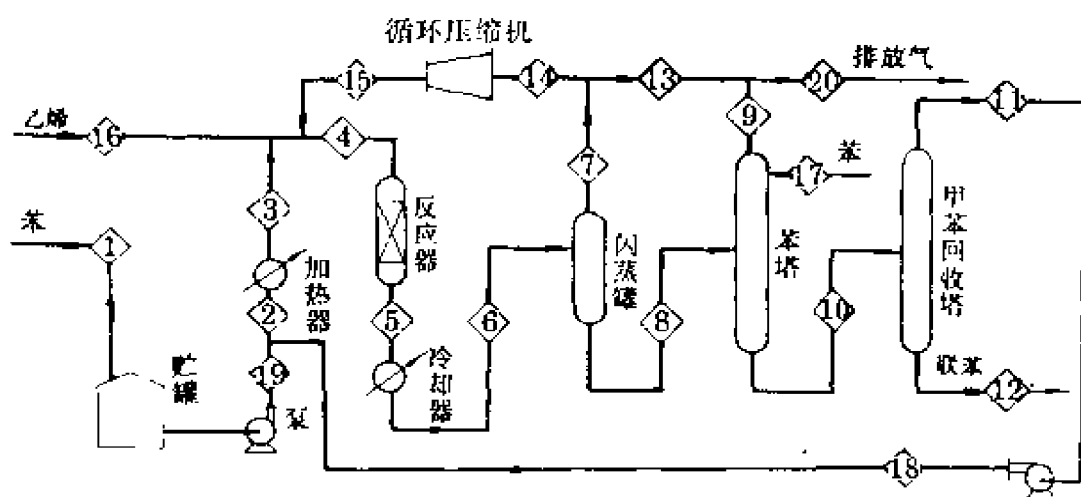


图 6-10 甲苯脱烷基制苯过程简化流程图

出料为联苯,送出装置。该过程的框块图见图 6-11。

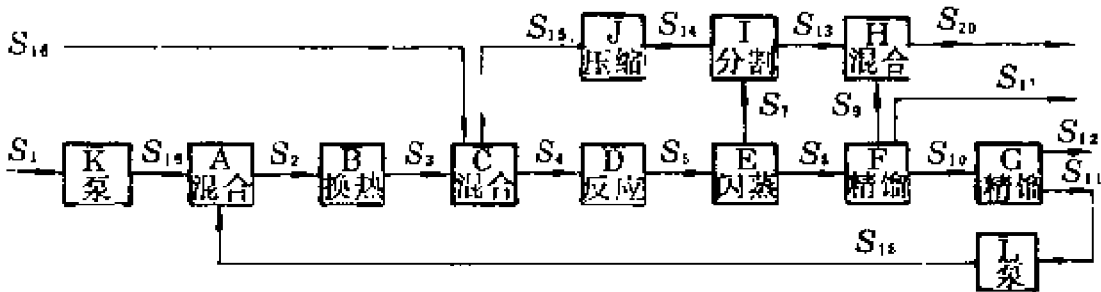


图 6-11 甲苯脱烷基制苯过程简化框图

现按流程模拟要求输入各种信息

- (1)文件名称:HDA-1
- (2)单位选择:SI 制
- (3)组分集:氢、甲烷、苯、甲苯、联苯。
- (4)热力学性质: Peng Robinson
- (5)流程:

假设用流程拓扑表形式输入。

设备位号	单元模块名称	进口物流		出口物流	
P101	PUMP	1		—19	
M101	MIXER	19	18	—2	
E101	HEATER	2		—3	
M102	MIXER	3	16 15	—4	
R101	RSTOIC	4		—5	
V101	FLASH2	6		—7	—8
S101	FSPLIT	7		—13	—14
C101	COMPR	14		—15	
D101	RADFRC	8		—9	—17 —10
M103	MIXER	9	13	—20	
D102	RADFRC	10		—11	—12
P102	PUMP	11		—18	

(6) 输入进料和循环物流

进料有流①和流④, 循环物流有流⑤和流⑥, 分别输入这四股物流的温度, 压力, 流量和组成, 四段物流的流量按照例 6-3 所述, 用解各组分的物料平衡方程所得流量数值输入。

(7) 输入各模块参数

设备位号	模块参数	备 注
P101	泵出口压力	
M101	出口物流的压力	
E101	物流出口温度和压力	
M102	出口物流的压力	
RJ01	每个反应的化学计量关系说明为串联反应或并联反应。关键组分的转化率。反应压力或反应器压降。温度或热负荷	若为串联反应, 要说明串联反应的顺序
V101	出口压力, 温度	
S101	流④的摩尔流率	
C101	出口压力, 效率	
DJ01	流⑤的摩尔流率, 回流比	其他设计变量的选择同表 6-2 的推荐
M103	流⑥的压力	
DI02	流①的摩尔流率, 回流比	其他设计变量的选择同表 6-2 的推荐
P103	泵出口压力	

(8) 迭代方法 直接迭代

收敛精度 0.0001

6.7 流程模拟计算的几个注意点

6.7.1 物料流程的正确描述

虽然流程模拟软件中有模拟各单元设备的模块, 但是流程拓

扑表中调用的单元模块与物料流程图中的单元设备不一定对应，下面用几个例子说明。

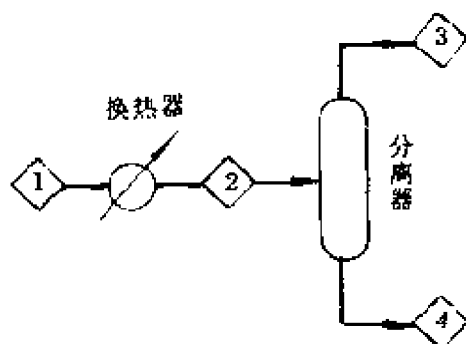


图 6-12 闪蒸

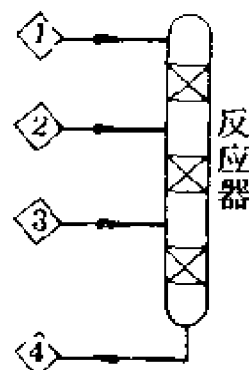


图 6-13 多段固定床反应器

例 6-6 换热器出口物料进行气液相分离的过程不用换热模块，而用闪蒸模块模拟。

解：流程拓扑表

设备位号	单元模块	进口物流	出口物流
V101	FLASH2	1	—3 —4

例 6-7 一个多段绝热固定床反应器，要用多个反应器和混合器模块模拟。若反应器模块允许多个进料，则不必有混合器模块。

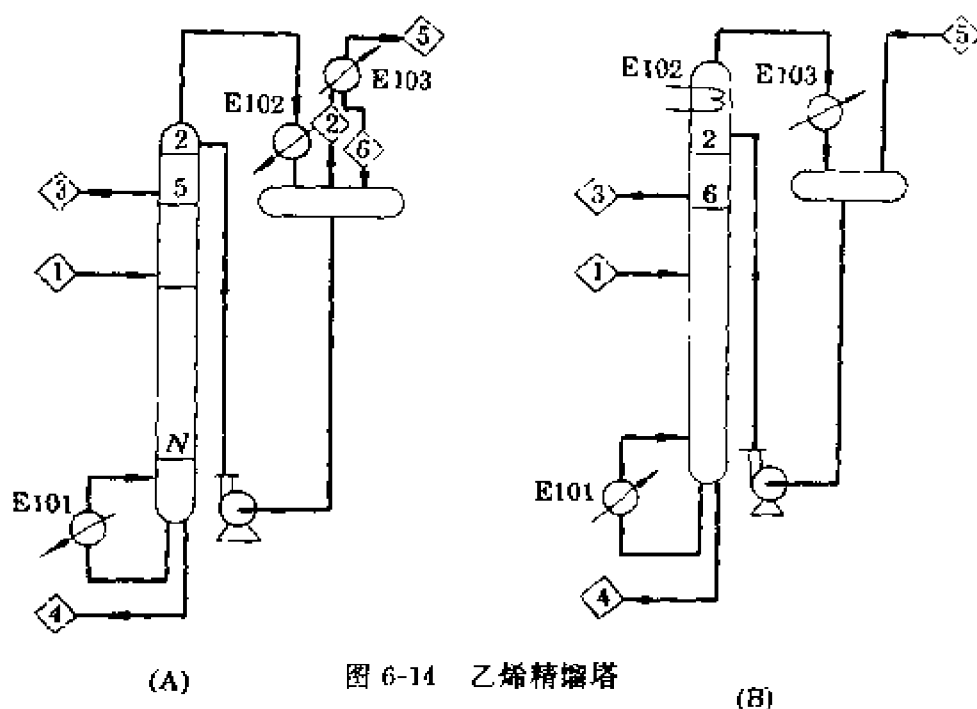
解：流程拓扑表(A)(反应器模块只允许有一个进料)

设备位号	单元模块	进口物流	出口物流
R101	RYIELD	1	—11
M101	MIXER	11 2	—12
R102	RYIELD	12	—22
M102	MIXER	22 3	—23
R103	RYIELD	23	—33

流程拓扑表(B)(反应器模块允许多个进料)

设备位号	单元模块	进口物流	出口物流
R101	RYIELD	1	-11
R102	RYIELD	11	-22
R103	RYIELD	22	-33

例 6-8 乙烯精馏塔塔顶气相出料进入一个过冷器,使出料②的重组分进一步降低。冷凝的液体经过回流罐进塔。气体作为产品离开塔系(见图 6-14A),这样的过程可以用两种不同的流程拓扑表来模拟。



解: 流程拓扑表 1

设备位号	单元模块	进口物流	出口物流
D101	RADFRC	6 1	-2 -3 -4
E103	FLASH	2	-5 -6

流程拓扑表 2

设备位号	单元模块	进口物流	出口物流
D101	RADFRC	1	-5 -3 -4

流程拓扑表 1 的精馏塔和过冷器构成一个回路,过冷器冷凝的液体⑥作为精馏塔的第一股进料,在进行计算时要首先假设⑥的初值。

流程拓扑表 2 是把过冷器 E103 作为精馏塔的冷凝器,而把精馏塔的冷凝器 E102 作为第一块塔板上的冷却器处理(见图 6-14B)。显然,流程拓扑表 2 的优点是消除了循环物流⑥,减少了模块之间迭代的计算工作量,但对设计变量的设定值要求较严格,若输入值不合适,精馏塔本身可能不收敛。选择哪些变量作为设计变量可以参考表 6-2,两个其他变量可以在下列变量中任意取两个:塔顶出料量 D ,冷凝器负荷 Q_D ,回流量 R ,回流比 RR ,产物的一个或两个质量要求,塔釜出料量 B ,再沸器负荷 Q_R ,蒸出比 V_N/B 。但是要注意不能作出可能违背物料平衡,热量平衡规律的选择,例如不能同时指定 L_1 和 Q_D ,不能在无侧线出料时同时指定 D 和 B 等。

对于拓扑表 1, $(N-2)$ 个塔板上的热量都指定为零,塔顶出料 D 指流⑤,总理论板数为 N ;而拓扑表 2,总理论板数为 $N+1$,进出料板的位置都相应增加 1,第二块理论板(即塔的第一块塔板)上的换热量需指定一个合适的值,其余 $N-2$ 个塔板上的换热量指定为零。其他两个变量的选择,流程拓扑表 1 和 2 可以相同,也可以不相同。

6.7.2 设计变量的选择

一个功能强大的流程模拟系统,它的单元模块都有超过自由度数目的设计变量种类可供选择。怎样选择设计变量对于流程或单元模块收敛起着十分重要的作用。应根据过程特性分析,用过程最重要或必须满足的参数作为设计变量,若几个参数的重要性相等,应选择较易估值的参数作为设计变量。

例 6-9 脱乙烷塔 D401 塔顶出口的气体经过换热器 E301 后进入乙炔加氢反应器 R301 脱除乙炔,然后进入冷却冷凝器

E402,产生的液体作为脱乙烷塔的回流,气体去乙烯精馏塔。

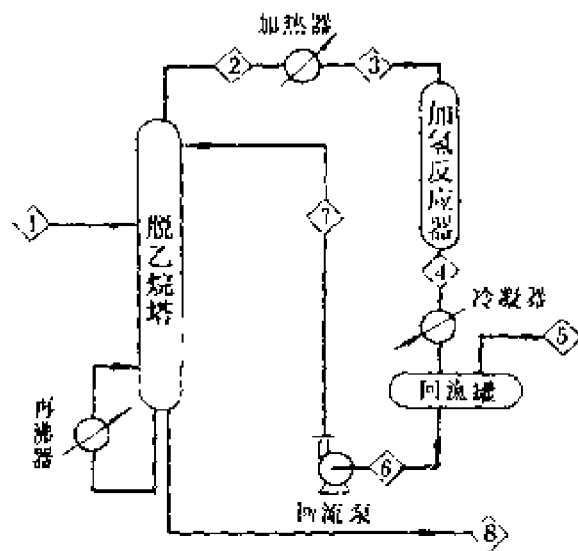


图 6-15 脱乙烷系统流程图

解: 流程拓扑表如下

设备位号	单位模块	进口物料	出口物流
D401	RADFR	7 1	-2 -8
E401	HEATER	2	-3
R301	RYIELD	3	-4
E402	FLASH2	4	-5 -6
P401	PUMP	6	-7

由此可知,上述五个单元模块构成一个回路,循环物流是流②。D401 无侧线出料,无塔板上的加热或冷却,塔釜为液相出料,塔顶为气相出料。因此 $(N-2)$ 个塔板换热量和 $(2N-2)$ 个出料量都为零。由于塔器模型为核算型,全部进料和进料板位置、总理论板数必须指定,剩下的两个自由度中有一个必须指定冷凝器的负荷为零,另一个设计变量可以是流②或流③的流量。

FLASH2 模块可以指定的设计变量是温度、压力、热负荷和

气相分率四个,需要指定的设计变量是两个,其中一个必须是压力或温度,另一个可以任意选择。在一般情况下,闪蒸的压力应作为设计变量,除非闪蒸的温度和气相分率都必须指定;其他一个变量在温度、热负荷和气相分率三者中选择一个。在本例的情况下,以指定气相分率为宜,这是由以下两个原因所致:

(1)在计算开始前必须输入循环物流⑦的初值,物流⑦的流量等于出料物流⑤的流量乘以回流比。出料量可以根据简单的物料平衡作估算,回流比可以根据已有的经验或用简捷精馏模块计算得到,因此物流⑦的流量初值可以较正确地估算得到,即FLASH2模块的气相分率可以较正确地估计。

(2)指定气相分率即指定回流比,脱乙烷塔有稳定的回流比就能使出口物流⑤的数量和组成在迭代过程中都较稳定而易收敛。

若以温度为设计变量,由于脱乙烷塔塔顶出料主要是乙烯和乙烷的混合物,两者的沸点差较小,因此,即使塔顶冷凝器的温度不变,若流⑤的组成或流量发生变化,冷凝器的气相分率和冷凝液量就会变化,而在本例的情况下,脱乙烷塔回流量的变化等于进料量变化,在进料量变化时若指定脱乙烷塔塔顶出料⑤的流量不变,则塔釜出料量和塔顶出料组成必然发生变化;若指定脱乙烷塔塔釜出料④的流量不变,则物流⑦的数量和组成都发生变化,这种变化又反向影响回流⑦的数量和组成,因此使过程收敛速度很慢甚至不收敛。

6.7.3 设计变量数值的决定

设计变量的数量由单元模块的自由度决定,但每个设计变量的值,若经过优化,则由人们的主观判断所决定。数值可自由决定不等于任意取值都能满足设计要求。例如塔器单元有一个设计变量指定为塔顶气相出料 V_1 , V_1 值的确定可根据所要求的产品组成进行物料衡算,算出 V_1 的数量,若任意指定 V_1 的值, V_1 过大则塔顶产品中的重组分不合格, V_1 过小则塔釜轻组分不合格。在

计算结果表明分离度不符合要求时,若不能正确分析原因,盲目地认为是回流比太小或理论板数不够而去调节这两个参数,则无论怎样调节都不能使分离度合格。又例如例 6-9 中闪蒸模块 E401 的气相分率,气相分率过大则脱乙烷塔的回流量过小,可能使脱乙烷塔计算不能收敛或者分离度不合格;气相分率过小则使冷凝器负荷过大,同时还可能使冷凝器的传热温差不够。因此要使决策变量数值设定正确,应该对过程特性有深刻的认识和分析,进行必要的手算和(或)局部的计算机计算,以保证全流程的顺利运算,减少不必要的机时浪费,对有循环物流的过程这一点尤其重要。

6.7.4 逐步扩大流程计算的范围

任何一个化工过程都包含多个单元操作,不要急于求成,企图一次就完成全过程计算,除非是对同样的过程已经过多次运算,有丰富经验者。

一般应首先计算流程中第一个单元或前几个单元,到这些单元计算完成后再逐步往下计算,直到最后一个单元计算完成,再把全部单元连接起来进行全流程计算。需分批计算的原因是:

(1)每个单元模块需要输入数量不等的的数据,若其中有一个数据选值不当就将导致全部计算结果无效,而工作中难免考虑不周,尤其对于使用流程模拟系统不熟练者更是如此。

(2)不知上游单元的计算结果很难对下游单元的输入变量作出正确的设定,例如例 6-9 所述塔器单元的塔顶出料量 V_1 ,若该塔器位于流程的中下游,它的进料是上游单元的出料,若全流程一起计算,除非用手工计算全流程的物料衡等,或者用 SEP 模块代替平衡级计算模块,计算出全过程物流的流量和组成,否则不能得出进料的确切数值,也就不能正确设定 V_1 。

(3)各个单元的参数都有优化的问题,若各个单元的工艺参数并不相关,则分别计算各个单元并优化参数,再把全流程连接起来,这样所需的计算工作量最小。

6.7.5 有效地选择单元模块

流程模拟中的分离、反应、换热单元过程可以用不同的模块表示,应根据各个阶段的不同需要进行选择。

(1)在不少化工过程中有循环物料,而各单元的输出是进口物流和工艺参数的函数,因此应尽可能得出精确的循环物料的初值以加速收敛。在求取循环物料的初值时,不必过多考虑出口物流对工艺参数的依赖关系,对反应单元可用最简单的产率模型;精馏、吸收、蒸取、闪蒸等分离过程可用分离器模块 SEP 模拟;换热和流体输送过程不考虑。这样就能用极少的计算机机时得出比较精确的循环物流初值。

(2)目前广泛应用的流程模拟软件的平衡级分离模块都是核算型的,即指定总理论板数和进料板位置求出产品的分离度或者回流比。若指定的理论板数或者进料板位置不合适,就会导致过高或过低的回流比而增加生产成本。若开始就用严格精馏模块反复计算求取适宜的理论板数,将使机时消耗过多,因此对常规塔可用简捷精馏模块算出所需要最小回流比和最少理论板数,再用严格精馏模块确定理论板和回流比。

(3)在完成了上述两个步骤,比较有根据地得到了各单元模块设计变量的设定值后,再用严格的单元模块计算全过程的各个单元。

总结以上三个步骤可以得到一个结论:我们应在流程模拟的各个阶段,用不同水平的模块,由简到繁来模拟各个单元过程,以得到合理的决策变量的设定值,减少用严格模型进行全流程计算的时间。

6.8 设计优化的基本概念^{[1][4]}

在市场经济的条件下,一个工厂能否生存与发展的决定性因素是在保证产品质量的前提下产品的成本要低。这不仅要求工厂

的基建投资低,而且要求原材料消耗和能量消耗也低,但这两种要求往往是矛盾的。例如管道直径的选择,管径大则物料的流速低,流体流动的阻力低,因而动力消耗少;但是管径大需要的基建投资大。因此必有一管道直径,使由管道投资乘折旧率得到的固定成本与作为可变成本的动力费用之和的总成本最低,这就是一个工艺参数的优化问题。因此优化的含义可以理解为:在全部可行的方案中用有效的定量方法选择其中最佳者。设计优化包括流程优化和参数优化两部分,在第3、第4和第5章已对流程合成和参数选择的基本概念进行了讨论,应用这些概念,可以使优化问题的决策变量有一个好的初值和缩小搜索的区域。以下各节的内容是介绍怎样应用流程模拟软件来进行参数优化工作。

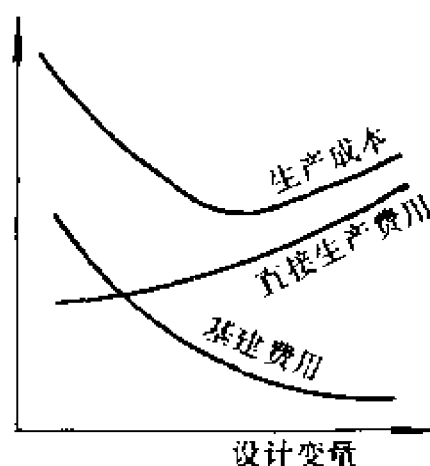


图 6-16 参数优化示意图

6.8.1 优化问题的数学表达

优化用数学的术语来表达是非常严格而清晰的,即对于一个解析式(目标函数),以设计变量为自变量求导数,使导数为零的值即为该设计变量的优化值。

数学表达式为:

$$\text{目标函数} \quad \text{Min} \phi = F(x_D, x_I) \quad (6-13)$$

服从于

$$\text{等式约束} G(x_D, x_I) = 0 \quad (6-14)$$

$$\text{不等式约束}(x_D, x_I) \geq 0 \quad (6-15)$$

对于一个化工大系统, 目标函数尚需服从于

$$\text{流程描述方程组} \quad s(x_s, x_I) = 0 \quad (6-16)$$

$$x_D = \Psi(x_I, x_s) \quad (6-17)$$

式中 x_I ——决策变量;

x_D ——状态变量;

x_s ——流股变量。

6.8.2 目标函数

目标函数又称评价函数, 是优化问题的目标和评价标准, 第一章曾述及设计是个多目标优化问题, 但作为目标函数只能有一个评价标准, 并且在绝大多数情况下是经济目标, 其他要求作为约束条件处理。目标函数可以是第二章所述及的经济指标, 如净现值, 内部收率或还本期等, 也可以是简化的经济指标, 如原材料或能量消耗定额最低, 投资最低等。

6.8.3 决策变量和状态变量

在 6.5 节中已对决策变量的含义作了说明, 状态变量是在决策变量设定后, 由描述过程的方程组解出的变量, 其数量与方程数相等。在优化问题中使目标函数达到最大或最小的设计变量值称为最优化问题的解。

6.8.4 等式约束

等式约束是一组用来描述过程的物料平衡, 能量平衡、相平衡和反应规律、传递规律的方程, 即为过程的数学模型。通过这些方程的求解, 可以消去与方程组相等的变量数, 从而减少了最优化问题求解的工作量。

6.8.5 不等式约束

任何一个变量都有上限和下限, 如压力和组成不能是负数, 精

馏塔内的气液相流量不能是负数,温度和压力的上限取决于设备的材质等。这些变量的解在一定区域内才是合理的,所以要用不等式把解的区域限制在一定范围内,以减少优化计算工作量和排除不合理的解。这种不等式称为最优化问题的不等式约束,满足所有不等式约束条件的点的集合称为最优化问题的可行域。

6.9 解决最优化问题的几种途径

最优化问题的数学表达是清晰而严格的,但在实际设计过程中往往无法或者不值得在这样严格的意义上进行设计优化工作。这是由于化工过程的优化问题是个多变量、非线性、混合整数优化问题,设计变量有整形量(或离散变量)和连续变量两种。下列五种变量都是离散变量^[17]。

(1)过程流程可用过程矩阵或相邻矩阵来表达,矩阵中每一个元素表示设备之间的连接关系,用0或1表示。

(2)设备或设备元件的串联个数,如多段绝热固定床的段数,精馏塔的平衡级数,压缩机的级数等。

(3)标准设备的规格,如换热器、电动机。

(4)设备型式、材质的选择。

(5)管道直径、保温层厚度的选择等。

属于连续变量的设计变量则更是数量众多,如反应器的进料组成,反应温度、压力和转化率(停留时间),换热器的传热温差和压降,精馏塔的压力,进料温度、回流比和产品回收率,加热炉的排烟温度和过剩氧系数等。目前的科学发展水平尚不可能解这样一个复杂的问题。因此不得不把优化问题先分解成结构优化和参数优化两大问题,再对每一问题进行进一步的分解和简化。即使如此仍然有下列情况使采用直接优化法成为不可能或不必要:

(1)无法以足够精确的方法定量地表示目标函数;

(2)没有足够的物理或化学数据建立符合最优化要求的过程数学模型;

- (3)约束条件为强非线性方程,在搜索最优解时不收敛;
- (4)根据过去的经验能够得到相当合理的解;
- (5)在规定的进度要求下没有足够的时间进行严格的最优化工作。

因此还得采用其他较简单的、可行的方法,即案例研究和参数灵敏度分析,这两种方法可以称为“次优化”。

6.9.1 案例研究

案例研究是对于一些设计变量用不同的数值代入,重复计算目标函数,寻找使目标函数不断改进的设计变量值,直至找到最优值,或者受时间限制找到接近最优值时就停止。计算方法可以是手算或者用计算机计算,第5章分离过程中有些例题就是用案例研究方法来进行优化工作的例子。要使案例研究工作进行得有效,除了需要有流程模拟软件能进行过程的物料、能量衡算和设备尺寸计算外,还需要有基于对过程特性认识的工程经验,使得在案例研究工作开始时输入的决策变量的设定值就已接近最优值,减少搜索解所需的计算工作量。第3章和第5章的工艺参数选择这两节都是这些决策变量初值选取的导则,第5章所有例题中的数据都是用流程模拟软件计算得到的。因此要进行设计优化工作必须掌握流程模拟的基本概念和应用方法。

6.9.2 参数灵敏度分析^[15]

案例研究方法运用于设计变量数较少,且相互之间交连较弱的情况。如果变量数多或者彼此之间为强交连,就要采用参数灵敏度分析法。

参数灵敏度分析和案例研究是非常类似的,它的具体做法是选择一个合理的操作初值,然后对每个变量各向前和向后变动一步,用案例研究相同的方法得出目标函数值,由此得出这些变化对目标函数的影响,即为了改善目标函数有哪些变量应比初值增大,有哪些应减小,有哪些参数变化时对目标函数的影响很小。根据这

些趋势分析重新确定操作点和进行计算,如此反复进行,直到目标函数无显著改进为止。

6.9.3 直接优化法^{[1][4]}

直接优化法是用最优化算法直接搜索最优的决策变量值。由于化工过程的数学模型非常复杂,采用这种方法时必须将优化程序和流程模拟软件结合在一起,怎样将这两者相结合,杨友麒^[4]曾作过详细的叙述。

流程模拟软件在 6.2 节中已经叙述共有序贯模块法、联立方程法和联立模块法三类,而最优化程序根据如何处理约束条件可分为两大类:

(1)可行路径法(Feasible Path Strategies)

整个搜索在可行域内逐步逼近最优解,即对于决策变量的每次取值都必须满足等式约束、不等式约束及流程描述方程。这种方法稳定可靠,但是计算工作量很大。

(2)不可行路径法(Infeasible Path Strategies)

整个搜索不一定在可行域内进行,即在优化程序给出一组设计变量值调用流程模拟软件进行迭代计算时不必每一次、每一个单元模块都要得到精确解,所有变量 x_D 、 x_I 、 x_S 同时向使目标函数最优又能满足所有约束条件的方向移动,在最终得到最优解时才满足全部约束条件。这种方法能减少工作量,但有可能不稳定。

采用可行途径法时若搜索失败不能得到最优解,迭代过程中每一个解仍然表明过程的一种状态,可作为案例研究的一个方案;而采用不可行途径法时,由于每一次迭代并不满足约束条件,各次迭代结果无意义。

不同流程模拟方法和上述两种最优化方法的结合,形成了不同类型的最优化策略,为了评价各种策略的优劣,引进“优化-模拟比” R_{os} 这个概念,其定义是

$$R_{os} = \frac{\text{流程优化计算的机时消耗}}{\text{流程模拟一次所需机时消耗}}$$

下面简述最初实行的优化策略以及为了降低 R_{∞} 所作的努力。

6.9.3.1 黑箱搜索法

早期的优化方法是把流程计算(稳态过程的物料和能量衡算)作为内层,而将计算目标函数和选定决策变量的优化程序放在外层。在流程计算开始以前,先对各设计变量和迭代变量指定初值然后作流程计算,当达到收敛指标后结束计算,把全部决策变量和部分需要的状态变量的值送至优化程序。优化程序根据这些数值计算目标函数,检查是否达到最优点,如果没有达到,根据采用的优化方法修正决策变量值,把新的值重新送至流程计算程序。如此反复迭代直到满足最优的判据,迭代次数可能高达千百次。在计算机的速度达不到我们希望的水平时,这样大量计算所需的时间是难以忍受的,这种优化程序与流程模拟程序结合的方式实际上是把流程模拟作为黑箱,优化程序只利用流程计算所得到的输入和输出关系,是一种黑箱搜索法,应加以改进。Biegler 等用序列二次规划法(S. Q. P.)代替流程模拟中原来的收敛方法。序列二次规划法不仅输出决策变量值,而且同时输出断裂变量值,它所需要的各梯度用摄动法得到,当作扰动计算时并不需要流程计算收敛,这种方法较原来的黑箱搜索法计算效率可以提高一个数量级。

6.9.3.2 单元模块逼近法

Parker 和 Hughes 用单元模块的严格模型发展出简化模型,将这种简化模型作为优化程序的等式约束。这种方法是联立模块法和可行途径法的结合。解题的具体步骤是:

(1)确定一个基础点,即假定各决策变量的初值,用严格的单元模型进行一次流程模拟计算,得出各流股的值。

(2)用单元模块的严格模型通过摄动法得到多组计算结果,将这些结果进行参数拟合,得出简化模型,此简化模型为决策变量 x_i 和流数组 x_s 的函数。

(3)以简化模型作为优化问题的等式约束,进行最优化问题计算,得到最优点的决策变量和目标函数值。

(4)用严格模型计算一次最优点的目标函数值,若此值与步骤

3 计算得到的结果相差不大,则这点就是最优解。若两者的值相差较大,则以严格模型得到的最优点为基础点,从步骤 1 开始重新计算,直到用简化模型和严格模型计算得到的结果的差值足够小为止。

这种方法的问题是:

(1)用摄动法从严格模型求取简化模型系数的计算工作量很大。

(2)也许不能用简单的方程达到与严格模型足够的近似。

(3)由于简化模型运用的范围较小,因而只能在一个狭窄的空间内进行最优点的搜索,这就可能使搜索失败。

6.9.3.3 双层法

双层法和单元模块逼近法相似,也是以联立模块法为基础的。简化模型可以是较简单的工程模型,例如用 Underwood-Fenske 公式计算精馏塔或 Kremser 公式求解吸收塔,也可以同单元模块逼近法一样,用摄动法从严格模型求取简化模型的系数。得到简化模型后,同时求解所有模块得到各流股变量,将得到的流股变量再输入严格模型。和单元模块逼近法不相同之处是,它采用改进的序列二次规划法,在联立求解方程组时同时调整决策变量和断裂变量,采用不可行路径法来寻求最优解。即它把迭代过程分成内层和外层两层,内层是采用不可行路径法结合联立方程法的优化程序,由于约束条件是简化模型,方程已简化而且维数也下降,使计算工作量大为减少,采用不可行路径法又使在找到最优解之前不必满足约束条件,使计算工作量进一步下降;外层是利用序贯模块法的单元模型来修正简化方程的系数,因此计算效率较高。将此法应用于包含 10 个决策变量的合成氨过程的优化,得到 R_{os} 等于 1.11~4.62 的优异结果。

6.9.3.4 系统分解

一个化工过程的优化通常包含多个待优化的设计变量,若有不相关的设计变量,就能把大系统分解成几个子系统,即优化问题原为 $\text{MAX } \varphi = F(x_1, x_2, x_3)$ (6.18)

$$\text{可分解为 } \text{MAX}\varphi = F_1(x_1) + F_2(x_2) + F_3(x_3) \quad (6-19)$$

子系统由于维数降低而容易求解。

另一种情况为全部设计变量都相关,这时把大系统分解成

$$\text{MAX}\varphi = F_1(x_1, x_2) + F_2(x_2, x_3) + F_3(x_1, x_3)$$

求出各子系统决策变量的最优值,然后将优化解送入协调程序进行协调,到满足一定的判据后收敛。

6.9.4 减少决策变量数

前文已说明,由于化工系统的优化是个多变量、非线性、混合整数的优化问题。为了解决这个难题,除了数学家要解决最优化算法和非线性方程组解法等数学问题外,作为过程工程师,应对过程特性进行分析,在简化目标函数、进行系统分解和减少决策变量个数三方面作出努力。本节重点说明减少决策变量个数的问题。现以 3.4.3 节中曾说明的苯烷基化制乙苯过程为例,重点说明如何减少决策变量数。图 6-17 为该过程的简化物料流程图。

苯经过加热炉与乙烯混合后进入多段绝热固定床反应器。反应器出口气体与循环苯换热后进入苯回收塔,该塔的塔顶产品为循环苯,塔底产品去乙苯精馏塔。从乙苯精馏塔的塔顶得到产品乙苯,塔釜出料为副产品二乙苯。

反应过程的特性是高苯烃比,有利于提高选择性和反应器的操作周期。选择性对温度不敏感,催化剂使用的上限温度是 470℃。各种物料和公用工程的价格如下:

苯	1800 元/吨
乙烯	2400 元/吨
水	0.3 元/吨
电	0.4 元/(kW·h)
燃料	40 元/10 ⁶ kJ

解:

(1)定性分析各工艺参数对生产成本的影响。

流程的自由度等于各单元设备的自由度加进入系统物料的自由度

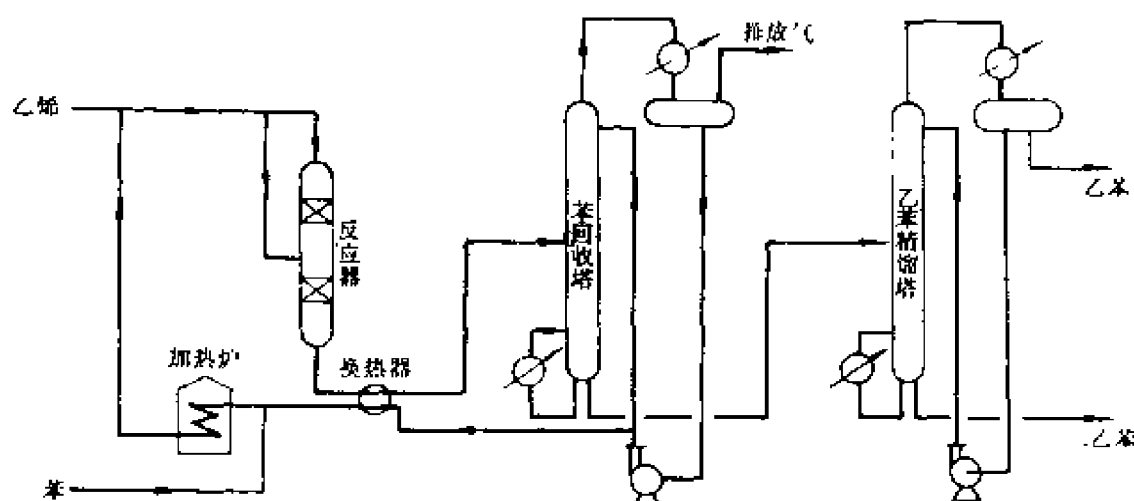


图 6-17 乙基苯生产过程流程图

由度。物料的组成、流量和温度、压力等条件都是作为设计基础预先决定的,根据表 6-2 各单元自由度分析和序贯法常用设计变量表,苯烷基化过程除六个换热器设备外,其余单元设备的决策变量如下:

设备名称	自由度	决 策 变 量
反应器	4	温度、压力、乙烯转化率、苯烃比
苯回收塔 ^①	4	塔压、进料温度、回流比、产品回收率
乙苯精馏塔 ^①	4	塔压、进料温度、回流比、产品回收率

因此该过程共有 $12 + 6 \times 2 = 24$ 个决策变量,这些决策变量可以根据已有的工程经验和对过程特性的了解加以设定或者确定其上下限,以尽量减少待优化的决策变量数和缩小变量搜索的区域。

① 总理论板和进料板位置按定值考虑。

①乙烯转化率:未转化的乙烯作为排放气排至火炬系统或回收作为燃料气,因此反应转化率应大于 99%,但过高的转化率将使反应器体积过大,应使转化率不大于 99.7%。

②反应温度:选择性对反应温度并不敏感,因此应采用高反应温度以缩小反应体积。温度的上限是催化剂的最高使用温度,但应留有裕量,取反应器出口温度为 440℃。

③反应压力:主反应是分子数减少的气相反应,压力高有利于提高主反应速度,但压力高使副产物二乙苯生成量增加,且反应器的压力不能超过乙烯的进料压力,否则需增加乙烯压缩机使投资和操作费用都上升,因此取反应器的进口压力为乙烯的进料压力减去系统阻力,为 2.0MPa。

④进料苯烃比:苯和乙烯比例高则选择性高,操作周期长,但分离回收系统的费用高。根据试验和生产数据,该数值应在 3~7 范围内。

⑤热交换器温差:根据现有经验,取表 5-6 所列数据,不再进行优化工作。

⑥加热炉烟气出口温度:工业加热炉排烟温度的下限取决于燃料中的含硫量,烟气温度必须高于其露点温度。若燃料不含硫化物,则排烟温度取决于过程中有无合适的冷流及其温度。

⑦热交换器阻力:一般取 0.02~0.025MPa,对于板翅式换热器和低阻力换热器可取 0.005~0.01MPa。

⑧塔压:根据 5.3.1 节所述确定。

⑨苯回收塔进料温度:反应器出口换热器的温差可取表 5-6 所列数据,在终端温差决定后苯回收塔进料的温度取决于热量平衡。

⑩乙苯塔进料温度:过程中无温度介于乙苯精馏塔塔顶和塔釜温度之间的热源,根据 5.3.4 节所述原则,乙苯塔进料不预热。

⑪精馏塔回流比:根据经验数据取 $R = 1.05 \sim 1.30 R_{\min}$ 。

⑫精馏塔的产品回收率:苯回收塔的回收率受乙苯质量指标的制约必须大于 99.9%。乙苯塔适宜的回收率应在 99%~99.9%

范围内。

通过以上分析可知:可能需要优化的工艺参数有反应器进料的苯烃比和转化率,两个精馏塔的回流比,乙苯精馏塔的回收率,其中仅苯烃比是系统优化参数,其他都是单元设备的待优化参数。

(2)定量分析各个工艺参数优化的必要性。

通过定性分析虽然已经设定了一些工艺参数值,但是待优化的参数仍然数量较多,因此应定量分析在该参数合理的变化范围内进行参数优化的得益,对得益小的参数不进行优化以便将待优化的变量减少到最少程度。

Fisher^[16]等建议用等级次序参数和近似参数作为该决策变量(工艺参数)是否值得优化的判据,这两个参数的计算方法如下:

确定一基准状态,然后变化决策变量值,求出基准状态和变化后状态的各单项的生产成本差 ΔTAC 及各单项的梯度 $\partial(TAC)/\partial x$,将各单项梯度的绝对值乘以该决策变量的变化范围 Δx ,再将各项的乘积相加,即得到等级次序参数 r_j :

$$r_j = \sum \left| \frac{\partial TAC}{\partial x_j} \right| \Delta x_j \quad (6-20)$$

在优化点各单项之代数和为零,因此可将各单项之代数和除以等级次序参数,得到比值的绝对值为近似参数 P_j :

$$P_j = \left| \frac{\sum \frac{\partial TAC}{\partial x_j} \cdot \Delta x_j}{r_j} \right| \quad (6-21)$$

决策变量的 P_j 愈接近于零,该决策变量的原设定范围就愈接近最优点。Fisher 等认为,若 $P_j < 0.3$ 则不一定有必要对该决策变量进行优化,因此定量分析各个工艺参数优化的必要性实际上就是求取各参数的 r_j 和 P_j 。表 6-3 和表 6-4 列出了苯烷基化制乙苯过程的待优化工艺参数的梯度、等级次序参数和近似参数。

① Δx_j 为正值。

表 6-3 待优化参数的梯度

工艺参数	乙 烯 转化率	苯 烃 比	乙 苯 回收率	苯 塔 回流比	乙 苯塔 回流比
原料	2425	10.2	3953	0	0
副产品	-292	-3.65	-721	0	0
反应器	-220	0.53	12	0	0
换热器和加热炉	0	-1.45	16	0	0
苯回收塔系统					
塔	0	-4.33	-105	-117	0
冷凝器	0	-2.02	-49.1	35	0
再沸器	0	-0.91	-22.1	18	0
公用工程	0	-12.82	-311.1	84	0
乙苯塔系统					
塔	0	0	-210	0	-14.8
冷凝器	0	0	-60	0	48
再沸器	0	0	-70	0	54
公用工程	0	0	-180	0	154

表 6-4 等级次序表和近似参数

工艺参数 范围	乙 烯 转化率	苯 烃 比	乙 苯 回收率	苯 塔 回流比	乙 苯塔 回流比
	99%~99.9%	3~7	99%~99.9%	1.05~1.30	1.05~1.30
原料	21.83	40.8	35.58		
副产品	-2.63	-14.6	-6.489		
反应器	-1.98	2.12	0.108		
换热器和加热炉		-5.80	0.144		
苯回收塔系统					
塔		-17.32	-0.945	-29.25	
冷凝器		-8.08	-0.433	8.75	
再沸器		-3.64	-0.199	4.50	
公用工程		-51.28	-2.800	21.00	
乙苯塔系统					
塔		0	-1.89		-40.0
冷凝器		0	-0.54		12.0
再沸器		0	-0.63		13.5
公用工程		0	-1.62		48.85
r_j	26.44	143.64	51.378	63.5	114.35
p_j	0.651	0.402	0.395	0.079	0.300

从表 6-4 的数据可以得出如下结论:苯回收塔的回流比范围和最优值已接近或已包含了最优值,在此范围内进行优化工作的得益已不大。乙苯塔回流比的 P_j 等于 0.3,由于其各单项梯度的绝对值大,即 r_j 值大,和 r_j 值较小的工艺参数相比,在 r_j 值相同的情况下取得收益的绝对值较大。因此,除苯回收塔的回流比外其他各工艺参数都值得优化。

通过上述分析,使苯烷基化过程 24 个决策变量中的 20 个有了合理的设定值,需要和值得优化的决策变量降低到 4 个,大大降低了优化的工作量,使采用直接优化法有了可能。

参 考 文 献

1. Edgar T F, Himmelblau D M. Optimization of Chemical Processes. McGraw-Hill Book Company, 1988
2. 朱开宏. 化工过程流程模拟. 北京: 中国石化出版社, 1993
3. 郭天民. 多元汽液平衡和精馏. 北京: 化学工业出版社, 1983
4. 杨友麒. 实用系统工程. 北京: 化学工业出版社, 1991
5. Sinnott R K. Chemical Engineering Vol 6. London: Pergamon Press, 1983
6. Reed R C, Prausnitz J M, Sherwood T K. The Properties of Gases and Liquids 3rd ed. New York McGraw-Hill Book Company, 1977
7. Chao K C, Seader G D. A General Correlation of vapor Liquid Equilibria in Hydrocarbon Mixtures AIChE J, 1961, 7(4): 598~605
8. Peng D Y, Robinson D B. A New Two-Constant Equation of state. Ing Eng Chem Fundam, 1976, 15(1): 59~64
9. Soave G. ,Equilibrium constant from A Modified Redlich-Kwong Equation of State. Chem Eng Sci, 1972, 27(6): 1197~1203
10. Starling K E. Thermo Data Refined for LPG Part1 Equation of state and computer Prediction. Hydroc Proc, 1971, 50(3) 101~104
11. Starling K E. Han M S. Thermo Data Refined for LPG part 14 Mixtures. Hydroc Proc, 1972, 51(5): 129~132
12. Starling K E. Han M S. Thermo Data Refined for LPG Part 15: Industrial Application. Hydroc Proc, 1972, 51(6): 107

~115

13. Yen L C, Alexander R E. Estimation of vapor and Liquid Enthalpies. *AIChE J*, 1965, 11(2);334~339

14. Douglas J M. A Hierarchical Decision Procedure for Process Synthesis. *AIChE J*, 1985, 31(3);353~362

15. Wells G, Rose M. *The Art of Chemical Process Design*. Amsterdam; Elsevier Science Publishers, B. V. 1986

16. Fisher W R, Doherty M F, Douglas J M. Evaluating Significant Economic Trade-offs for Process Design and Steady State Control Optimization Problems *AIChE J* 1985, 31(9);1538~1547

17. Stephanopoulos G. *Synthesis in The Design of Chemical Processing Systems*. MIT 教材

第 7 章 过程控制

7.1 控制要求^[1]

为了达到设计的各项要求,必须对生产装置进行连续的监视和控制,由操作人员和控制设备(测量仪表、传感器、控制器、执行器记录仪表)组成控制系统,共同完成该项任务。控制系统应满足抑制外部扰动的影响和使过程在优化的工况下工作这两项基本要求。

7.1.1 抑制外部扰动的影响^[1]

这是化工过程控制最通常的目的。扰动是指外界因素变化对系统的影响,如原料和公用工程的流量、温度、压力的波动,这种干扰是客观存在的,不可避免的。因此,需要引入控制机构,消除干扰对系统可能造成的不良影响。

过程变量 x ,如温度、压力、流量、浓度等,在受到外部因素影响时,可能有两种变化状况,一种情况是 x 在开始时受到外界的影响而变动,但随着时间的变化, x 无需外界干预就能稳定,即不需要利用控制机构使其回复到初值,见图 7-1。

另一种情况是变量在外界影响下发生变动后不能随着时间的变化恢复原状,而是按图 7-2 所示的各种形式变化。

现以有冷却夹套的连续搅拌反应釜为例进行说明。

例 7-1 设有串联反应, $A \rightarrow B \rightarrow C$,副反应为放热反应,其放热量通过器壁传给夹套中的冷媒。通过对该反应器的分析,可知反应放热量可用釜温 T 的 S 形函数 A 来表示,而冷媒吸收的热量是釜温 T 的线性函数 B (图 7-3)。在稳态条件下,反应放热量和冷剂

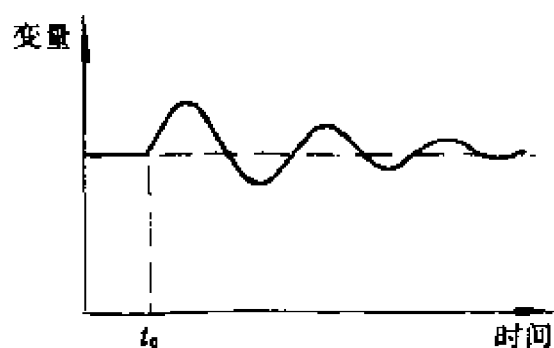


图 7-1^① 稳定系统的响应特性

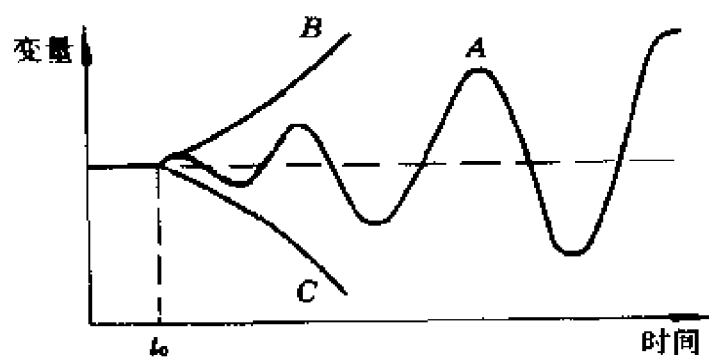


图 7-2^② 不稳定系统的几种响应特性

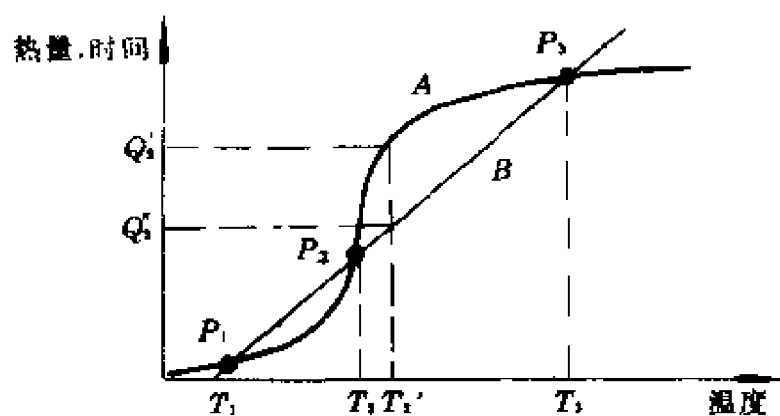


图 7-3^③ 连续搅拌反应器的三个稳态位置

吸收的热量相等,即图中三个交叉点 P_1 、 P_2 和 P_3 。其中 P_1 和 P_3

① 图 7-1、图 7-2、图 7-3 引自参考文献[1]。

两点是稳定的,现以 P_3 为例进行说明。当釜温 T 高于 T_3 时,冷剂吸收的热量大于反应放热量,温度将自动降低移向 T_3 ;若 $T_2 < T < T_3$,反应放热量大于冷剂吸收的热量,温度将逐渐升高到 T_3 ,因此 P_3 是稳定的。而当系统处于 P_2 状况下操作时,在 $T_2 < T < T_3$ 的情况上面已经说明,温度 T 将逐步上升至 T_3 ;若 $T_1 < T < T_2$,由于反应放热量小于冷剂吸热量,釜温将逐步下降到 T_1 ,因此 P_2 是不稳定的。

若在低温 T_1 下操作,反应速率过低;在高温 T_3 下操作,选择性将降低或者不安全。因此需要在 T_2 条件下反应,这时就要用控制机构,使反应器在 T_2 状态下保持稳定。

7.1.2 使过程在优化的工况下操作

设有某气固相催化反应,其催化剂失活迅速,需定期切换,副反应的活化能高于主反应。此反应器全年的利润可用下式表示:

$$\text{利润} = N \left[\int_0^T (\text{产品销售收入} - \text{原料费用} - \text{公用工程费用}) dt - \text{再生费用} \right] - \text{折旧费} - \text{人工费用}$$

式中 N 为每年反应器再生次数, T 为操作周期。

若反应器在整个操作周期内都处于高温操作,则反应的选择性低,原料消耗费用增加;若整个周期内都处于低温下操作,不仅由于反应速度低使反应器产率低,而且在低温下催化剂活性低,在同样的转化率条件下,操作同期缩短而使反应器的产率下降,减少了产品销售收入,同时操作周期短还增加了催化剂再生的费用。因此为了使利润最大,应使反应温度在操作周期内逐步上升,实行变温操作,此类问题就是最优控制问题。

7.2 控制系统的设计要点及步骤

7.2.1 确定为达到设计要求所需测量的参数

现以苯(B)和乙烯(E)气相烃化的反应过程为例说明,其主要

化学反应式如下：



反应生成的乙苯(EB)为主产品,二乙苯(DEB)为联产品,二甲苯(DMB)和甲苯(MB)为副产品。反应采用的催化剂较易失活。当苯过量时能减缓催化剂的失活和提高反应的选择性。其最简单的工艺流程图如图 7-4 所示,要求根据设计目标决定需测量的参数。

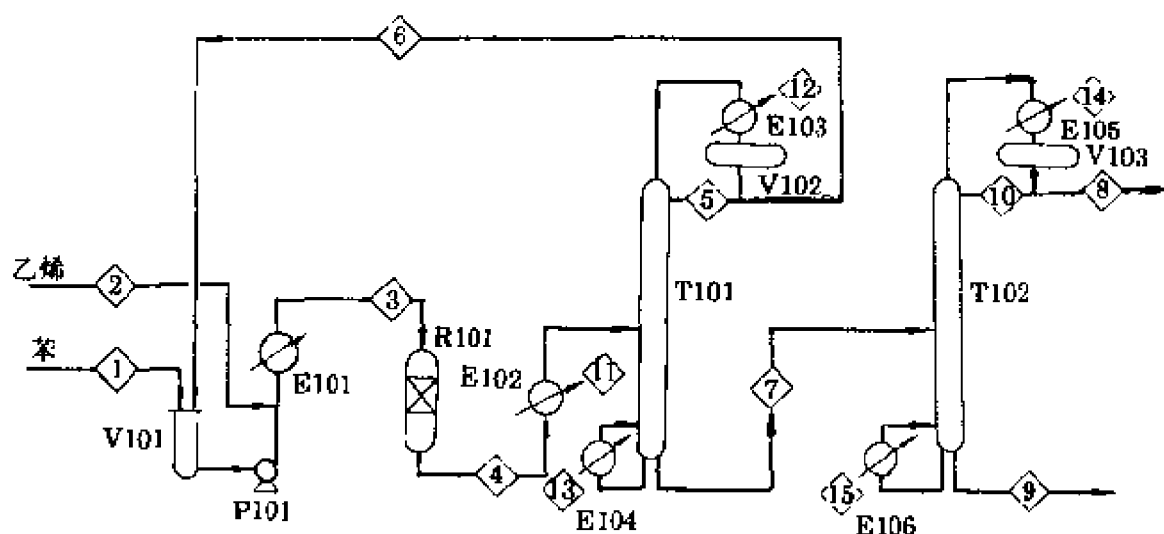


图 7-4 苯和乙烯气相烷基化流程图

V101 苯贮槽	P101 苯进料泵
E101 进料预热器	R101 反应器
E102 冷却器	T101 苯回收塔
E103 苯回收塔冷凝器	V102 苯回收塔回流罐
E104 苯回收塔再沸器	T102 乙苯塔
E105 乙苯塔冷凝器	V103 乙苯塔回流罐
E106 乙苯再沸器	

7.2.1.1 产品数量

该生产过程的产品是 EB,但决定 EB 数量的控制因素是原料 E 的流量。为了计量目的,应测量流股④的流量;为了控制目的,应测量流股⑦的流量。

7.2.1.2 产品质量

产品质量由流股⑧的组成决定,但测量参数有下述三种可选择的方案。

(1)反馈控制。直接测量流股⑧的组成(图 7-5)。

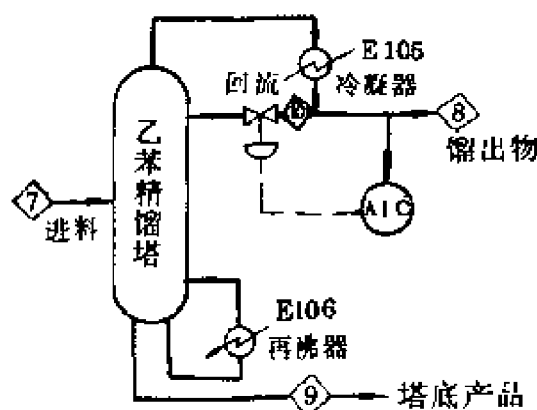


图 7-5 精馏塔产品质量反馈控制

当流股⑧的组成与预期值比较有偏差时,调节回流量⑩,这种利用被控变量的直接测量值调节控制变量的方法称为反馈控制。

(2)前馈控制。测量引起流股⑧组成变化的主要扰动,例如进料⑦的流量,这种利用直接测量的扰动量来调节控制变量,使被控参数保持在预期值的方法称为前馈控制(图 7-6)。

(3)推断控制。当被控变量和扰动量不能测量,利用辅助测量参数调节控制变量的方法称为推断控制。例如,当没有测量流股⑦和⑧组成的工业色谱或者价格过于昂贵时可采用这种控制方案。塔顶产品⑧的组成是塔板温度的函数,可用物料平衡,热量平

