

过程工程研究

郭慕孙, 杨纪珂

(中国科学院化工冶金研究所, 北京 100080)

摘要: 本文论述了过程工程的一些基本概念、如何进行过程工程研究及其具体内容。

作者注: 本文是作者49年前写的内部材料。当时回国不久, 中文写作不顺, 且带有时代的政治色彩。本刊编辑作为纪念中国科学院过程工程所建所50周年的历史资料刊出版本文。本文打印成册47年后, 才受到注意。在2007年全所战略讨论会上, 由所领导分发与会研究人员, 并附如下接语。

珍惜历史 推动过程工程战略研究 在2007年度研究所发展战略研讨会召开之际, 我们郑重向全所各位科技和管理骨干推荐郭慕孙、杨纪珂两位老先生1959年11月编印的《过程工程研究》油印小册子, 希望作为本次会议的重要参考资料, 请大家认真学习。自从我所从“化工冶金”更名为“过程工程”以来, 正面的反映是主要的, 但人们对过程工程研究的内涵仍缺乏统一和深刻的认识。实际上我所两位老前辈在上世纪中期就提出了过程工程的定义和内涵, 从中体现了老一辈科学家对科研工作, 特别是科研前瞻性研究的高瞻远瞩, 对我们今天如何深入开展战略研究具有重要的参考、启迪和借鉴作用。老一辈科学家为我们今天从事过程工程科学研究的后来人树立了榜样, 为指导和激励我们搞好研究所发展战略研究提供了难得的宝贵财富。从化工冶金到过程工程, 研究所即将走过50年的光辉历程, 正面临新的发展机遇和严峻挑战。望大家抓住机遇、迎接挑战, 继往开来、开拓创新, 为过程工程所全面协调可持续发展多做贡献。所长: 刘会洲, 党委书记: 杨建国, 2007年7月20日。

关键词: 过程工程; 过程工程研究; 过程开发; 化工过程; 化工过程研究; 化工过程开发

中图分类号: TQ02 **文献标识码:** A **文章编号:** 1009-606X(2008)04-0625-10

1 有关过程工程的一些基本概念

1.1 什么是过程工程研究

过程工程研究是在技术科学研究中的一个重要领域。在这一领域中取得的许多研究成果的累积, 其最终目的是要为某种或数种资源用科学的方法去找出一套最是多快好省的处理流程, 用来以工业规模生产国家所需的产品。

所谓过程就是从原料制备成品或半成品所需一整套的技术处理步骤。如果把它分拆开来, 就可以分成许多涉及化学反应的单元过程和一些仅涉及物理变化的单元操作。例如在炼铁过程中, 光靠一个高炉是不行的, 为了炉内产生高温, 空气必先预热; 为了减少渣量, 矿石须经富选; 为了炉气上升顺利均匀, 富矿还要烧结筛分; 为了强化性能, 煤炭先要焦化; 凡此种种, 缺一不可, 最后才能多快好省地炼出铁水。因此整个炼铁过程必须是一个由一些单元操作如破碎、筛分、磁选、热交换、除尘等、和一些单元过程如磁化焙烧、焦化、燃烧、还原熔炼、选渣等有节奏地配合成的整体, 高炉不过是其中最重要的一个单元罢了。一般用来表示一整套过程的基本方法就是画出它的流程图。图1就是一个典型炼铁过程的流程图。

也有不少过程不需经过化学反应就能完成。换句话说, 在这个过程中只包含一系列的单元操作, 但并不需要单元过程。例如大量制造氧气的过程就是一个纯物理变化的过程, 所包含的单元操作主要有空气的压缩、液化、分馏、热交换、流体的运输等项。它的流程图如图2所示。

再说什么科学研究? 科学研究就是用科学方法, 也就是由系统的和合理的方法, 来探索和量测自然界各种因素间的规律、法则及其真理。在技术科学的领域中, 所有研究得到的规律、法则和真理最终都必须直接或间接地用之于实践, 为人民谋福利。在进行研究各阶段中所产生的理论、论文、设计方法、计算方法等都是些中间产品而不是最终的目的。如果有人问, 代表一个国家技术科学水平的指标是什么? 这个指标无疑地应该是在生产技术上多快好省的程度而不是论文的高超与否。因此理论问题必须从实践中产生, 其研究成果必须用还到实践中去。

有不少人一听到科学研究, 总不免要联想到一些莫测高深的新奇东西上去。以过程工程的研究而论, 总以为在一个新过程中必须会充满了从未见闻过的设备和方法。这些其实都是不十分准确的想法。事实的情况和一般所想象的不同: 如果把任何一个新过程拆开一看,

那些单元操作和单元过程以及所用的设备大都是一般设计工程师能设计得出、有资料可查的现成东西. 当然在研究的过程中, 为了需要, 也不时有人会发明创造出一些新型合用的设备来, 新型设备的研究虽然也是在过程工程研究中一部分重要的工作, 但并不是它全部真正精神所在. 它的真正精神表现在流程的总体成就上, 只

有在确实是比以前更加多快好省的产品滚滚制造出来的时候, 才能显示出这个由许多单元联系成的合宜流程总体所表现出的创造性. 因此任何一个成功的有经济价值的新过程不论其中是否包含着新设备都可以认为是一个创造.

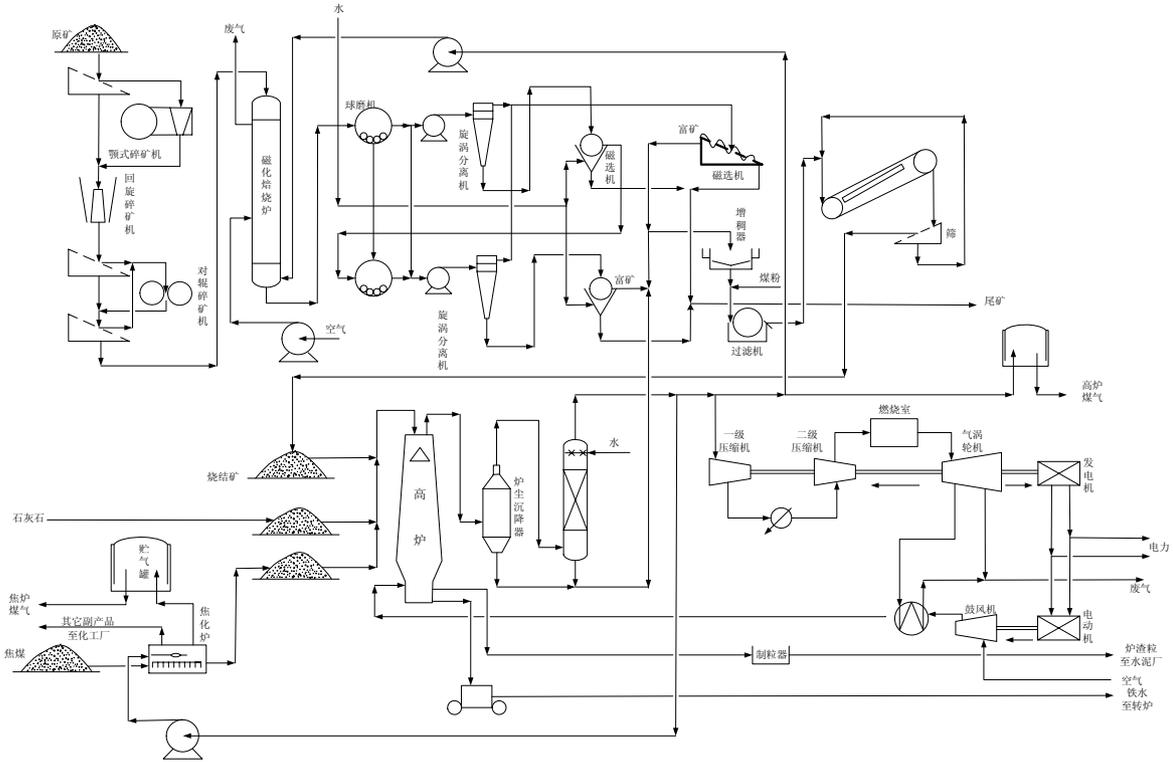


图1 炼铁流程图
Fig.1 Flowsheet for iron-making

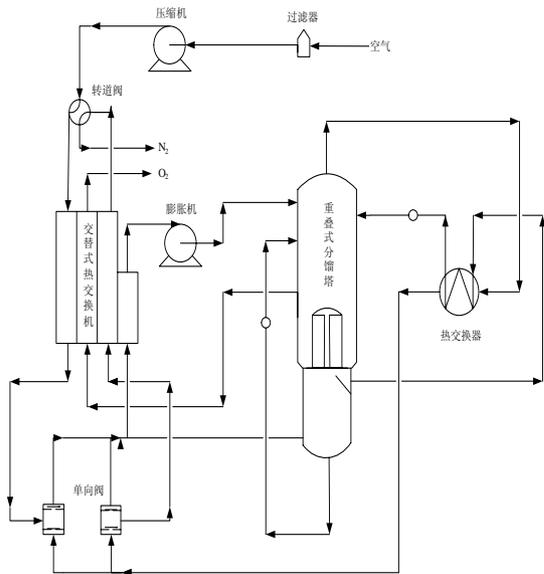


图2 制氧流程图
Fig.2 Flowsheet for producing oxygen via air-separation

1.2 过程工程研究对象

过程工程研究既是为从原料到成品或半成品找到合适的处理流程, 我国的自然资源又是极其丰富, 如何好好地去利用这些资源, 使它们以最高的效率为人民服务, 过程工程研究是一个不可缺少的环节. 因此在化工、选矿、冶金、石油、煤炭等工业的发展中, 都需要进行过程工程的研究, 以上这些工业的对象虽然各不相同, 然而在处理原料和发展流程所涉及的基本研究法则和步骤等方面是相同的, 所遇到的单元过程和单元操作的范畴以及把它们组合发展成为总体过程的方法也是属于同一类型的. 所以过程工程具有贯穿以上这些工程的特点, 它的对象是比较广泛的. 举个例子, 在过程工程中有一种流态化技术, 这种技术的发展得以使粒状固体在运动着的气相中快速地进行各种物理变化和化学反应. 它为许多单元操作和单元过程开辟了途径. 物料可以用流态化技术来流输, 热量可以籍流态化技术来交

换, 泥浆可以用它来干燥, 矿石可用它来浸取, 溶液可以用它来置换沉淀, 催化可以通过它来进行, 煤炭可用它来气化, 各种单元过程如还原、氧化、磁化、氯化、硫酸化等都可视实际情况在流态化床中进行. 以上所列的流输、传热、干燥、浸取等单元操作和置换、催化、还原……等单元过程恰好是在化工、选矿、冶金、石油和煤炭等工业过程中所常见的那些单元. 从研究的角度看来, 其中的共同性是很显然的. 把过程工程作为一个技术学科来进行研究应该说是有意义的.

1.3 过程工程研究不能脱离实践

过程工程的研究是很现实的. 它必须符合技术上可行或更完善和经济上更合宜这两个条件, 缺一则不可的. 如果在作研究的过程中须经化学反应, 首先必须进行热力学的计算和分析, 看看有没有发生这种反应的可能性. 热力学上属不可能的化学反应在实践上是不能发生的, 毋须加以尝试. 但是经热力学计算出认为是可能的化学反应在实践中有时也未必一定能行. 一种情况是热力学计算只能估计促使进行反应的推动力, 它并不能提供反应速度的数据, 因此往往有些反应从热力学看来虽属可能, 但由于反应太慢, 使在加速反应的催化剂没有找到以前没有实用的价值. 还有一种情况热力学计算虽有可能, 但所要求的条件超出实际设备所能负担, 因此也失去了实际的意义. 例如用焦直接还原二氧化钛的过程, 从热力学估算估计在 2100°C 左右 TiO_2 可以被 C 直接还原成为金属钛. 可是能够提供符合这样高的温度和气氛成分条件的冶金炉设备还不是一般能力所及; 即使有之(例如使用电炉作真空熔炼), 在经济核算上目前显示还不能和一般的炼钛法相抗衡. 因此一个新的过程除在技术上必须可行外, 更重要还要求在经济核算上比现有过程更为优越, 例如大家知道在海水所含的金属几乎应有尽有, 而且从溶液中提取无机物一般在技术上总是可行的. 然而到目前为止, 仅有极少数几种金属(如镁)值得从海水中从事提取. 在工业上不进行这些过程的原因很简单, 就是技术上虽属可行, 经济上尚不合算. 再如能把铁矿还原成铁的方法很多, 为什么全世界大多都采用高炉炼铁过程呢? 那也是因为到目前为止, 还没有其他的炼铁过程能在成本核算上可以凌驾高炉过程之上. 当然这并不是说高炉法会永远独占鳌头. 由于科学技术的进行, 新过程在经济和技术指标上压倒旧过程的事例颇为常见, 这也是过程工程研究的结果. 另外一种情况是对某种物质的回收或制备尚无法可施, 然而国家对它的需求却是非常迫切, 甚至为了获得它, 愿意不惜工本. 在这种情况下, 先要解决有无的问题, 技术可行与否就应放在首要, 经济方面的考虑可以留待在第一个

过程做好后继续进行下一个过程研究再说.

因此, 过程工程研究决不能脱离那些在开发资源、利用资源中所遇到的问题. 一旦脱离了实践, 就会失去它的生命力.

1.4 过程工程研究的进展程序

和其他技术科学研究的进展一样, 过程研究也是从实践出发. 在实践中获得了许多事实、经验和数据. 根据这些数据, 通过有系统的整理和分析(一般是用统计的方法), 找出各变数间的规律或相互关系. 从这些规律归纳或推导出一套理论. 根据这些理论再到实践中去应用. 这是一种螺旋式的进展, 如用图解法来表示, 得到如图3所示的形式.

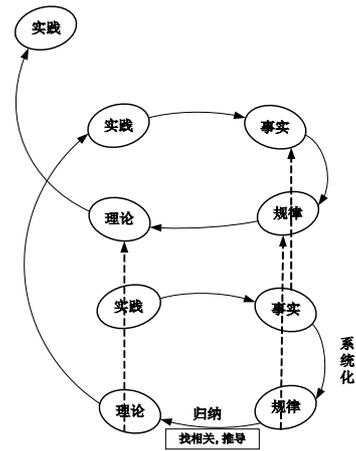


图3 技术科学研究的进展程序图解

Fig.3 Conceptual progress in engineering research/development

1.5 过程的发展可以相互促进, 相得益彰

一个多快好省的新过程的出现, 往往会促进其他进程的进一步发展. 有时甚至可以使本来不可能的过程成为可能, 本来不经济的过程成为经济. 其中最突出的例子就是炼钢过程受到新的制氧过程的促进. 氧气炼钢在技术上要胜过空气炼钢乃是早已知道的事实, 可是碍于氧气成本太高, 用氧气炼钢并不经济, 因此, 此法一直不被采用. 直到二次大战后, 出现了低成本的可以大量生产的低压制氧过程后, 氧气炼钢过程才大露头角, 各国竞相采用. 又如氢气还原铁的过程, 这个过程的关键问题在于如何用低廉的方法使含碳量低而灰份高的劣质煤转化为氢气的问题. 作过程研究的同志如能随时留意各种有关过程的发展情况, 对他们的工作来说, 是大有益的.

1.6 进行过程工程研究要从全面看问题

在过程工程中, 如要提高某单元的生产指标, 往往不是无代价的, 所要付出的代价往往表现在投资的增加或其他有关单元负荷的增重上. 因此在提高产量的同

时，必须估计到转嫁负荷所引起的经济影响方为全面。例如在某一过程中已知在增加反应器内的压力时就可以增加产品的产量。可是当压力增加到某一限度时，会使其他有关单元中的设备在性能上跟不上去，必须换用贵得多的高压设备；随着压力的增高，操作上的和技术上的困难愈来愈多，操作成本也愈来愈高；最后必然达到一点，再增加压力在经济上反而不利，因此而增加的投资和困难还不如另建一套设备，同样可以成倍增加产品的产量，这个合宜点当然会随着科技的发展而有所移动，可是如上例把目光仅仅局限于增加压力可以提高产量，从而盲目地去大增压力不看到全面、不估计到负荷转嫁的后果就可能犯“片面性”的错误。这对过程的发展并不能收到实际的益处。

1.7 过程发展没有止境

随着科学技术的日新月异和各种科学间相互的沟通和利用，过程的发展也是精益求精，没有止境。例如原子能的利用、高压高温高真空高纯度技术的广泛发展、仪表控制和自动化的日趋紧密，热力学、动力学、流体力学、传热学、传质学的数据库日臻完备，运筹学、统计学的方法普遍采用，这一切都对过程工程研究起着关键性的促进作用，只须一天要求着更多、更好、更省的新过程，过程研究就一天没有完！

2 过程工程研究的进行

2.1 过程工程研究的发展步骤

在过程发展的历程中，从一个创造性的新观念到它在工业上实现所经过的各个典型的阶段以及各阶段间

相互错综的关系可以用图解来表示，如图4所示。从图可以看出过程的发展共分成5个阶段。最先是对某过程研究任务有了一个新的观念或想法，并在理论上、计算上、文献上以及经济上对这个观念进行初步的思考和研究，是为第一个阶段。再进一步较深入地去计算和调查，并进行实验室规模的过程实验，作出在作中间工厂规模实验以前对本过程的评价，是为第二个阶段。扩大规模，进行中间工厂规模的实验和研究，以获得更多而可靠的技术和经济的数据，是为第三个阶段。再扩大到半企业规模工厂的实验和研究为第四个阶段。最后完成正式工厂的设计安装，正式投入生产，使最初观念得以实现，为第五个阶段。对过程工程的研究工作而论，前三阶段的工作比重较大于后两阶段。有时三、四两个阶段可以合并为一。还有时在特殊情况下，甚至可以把它们省掉。单纯从技术观点来看，把一个新过程直接从试管型实验所得的结果搬到大规模生产上并非不可能。但这样做，所得到的工业过程数据显得十分贫乏，工程师们就不得不采用很大的安全系数和一些比较主观的猜度和估计去进行设计。这样建成的工厂非但投资成本极大而且在操作中会遇到大量的枝节困难，往往使工程师们感到穷于应付。因此这种一步扩大的方法并不能认为是一种经济的尝试，它只能在极少数不惜成本而且万分紧迫的过程上偶一为之。某国在二次大战中对同位素铀的提取过程，就曾采用这种发展方式，这在正常情况下是不多见的。多数的过程发展是从实验室规模实验发展到中间工厂规模实验，再从中间工厂发展到半企业及正式规模工厂的生产。通过这样的发展方式当然会得到更全面

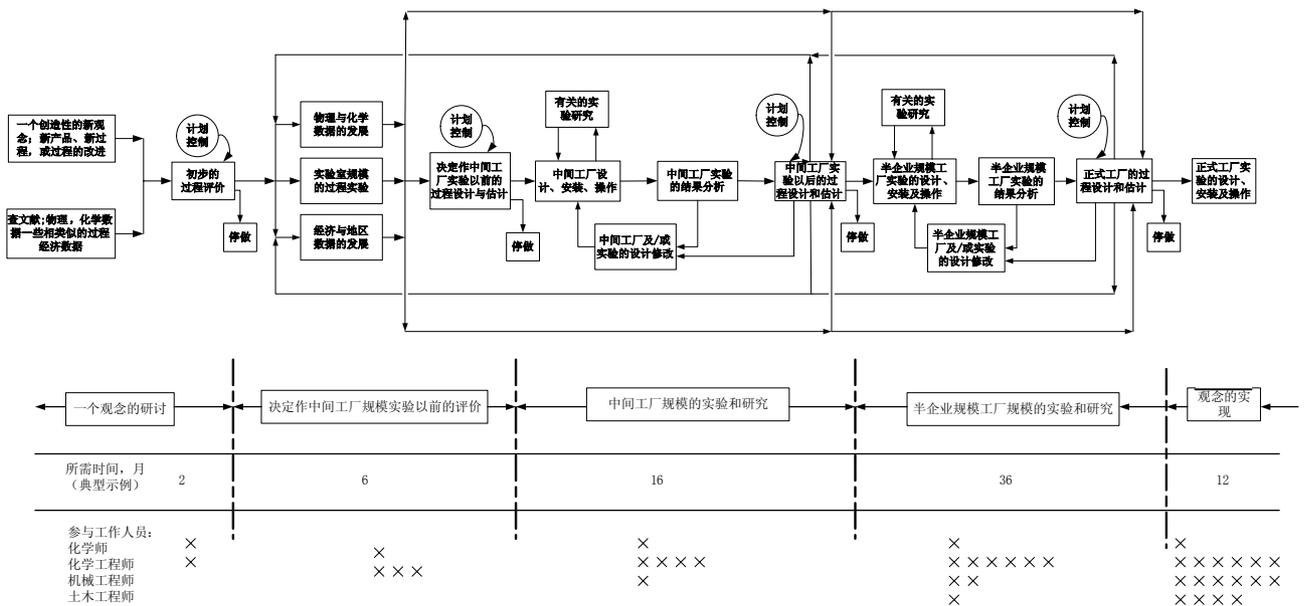


图4 技术科学研究的进展程序图解
Fig.4 Stages in engineering research/development

和更准确的过程数据和资料, 在工厂设计时就可以采用较低的安全系数. 这样非但可以大大地节省投资, 而且还可以预期在正式生产中获得更好的产量和效率, 使在中间实验中所耗费用得到加倍的偿还. 可是缺点也不是没有, 那就是各级间的扩大比例如愈小, 中间实验的级数愈多, 固然比较保险, 但时间的花费也就愈多. 如何使级数减少, 扩大比例增加, 但仍保持较小的冒险程度, 是进行过程工程研究的同志们重要任务之一.

2.2 新观念的形成和研讨

新观念的形成首先要从任务出发. 任务当然不能信手拈来. 一种是对某种资源或矿藏还没有一个适宜的过过程可以用来处理回收其中的有用部分, 在技术上要求我们找到可行的道路的任务. 一种是可用的过程虽有, 而且已在工业上正式采用, 可是技术和经济的指标都还不高, 必须寻求更进步的过程的任务. 再有一种是发展某种新产品的过程并发展该新产品的用途的任务. 例如发展制造尼龙的过程, 提炼稀土金属的过程以及为各种稀土金属寻找新的用途等任务. 又有一种是对某种物质或新产品在发现了某种特殊用途后, 使它在市场上的需要突然增大, 必须发展出能进行大规模生产的过程的任务. 更有一种是由于某种新技术或新设备的发明使本来不可能或无经济价值的过程变为有价值要求对它进行研究的任务.

在担负起一个任务之后, 接着就要“想办法”, 也就是要通过客观的计算、查考、思索、衡量和判断, 逐渐形成一个方案或观念. 如前所述, 这种方案的安排布置往往随过程的不同而不同, 因此是“新”的, 所以所形成的观念可以称为“新观念”. 新观念决不是凭藉灵机一动就可形成. 首先要看在这个新观念中是不是有一个过程存在着. 换句话说, 新观念不能失之片面, 也不能失之空想, 一开始就必须考虑在技术上可能而且有现实意义的那些过程, 并且要考虑得周到, 看看有没有明显的不可行的缺陷. 与此同时要全面开展调查与本任务有关的文献工作. 要在前人已经作过工作的基础上寻取可能是最有利、最合宜的方案. 其次要看在这个新方案中所涉及的化学反应在热力学上是否可能, 这必须搜集有关的物理化学数据, 进行仔细的计算. 再次要对过程的整个安排中所涉及的各项重要变数作一次粗略的定量估计. 遇到缺乏数据的时候, 可以从文献中查出一些与本过程相类似的过程数据作为借鉴. 根据这些数据就可以设计出一个初步的流程图, 对于在将来正式规模的假设过程中所需用的各项设备的种类和大小就有了一个初步轮廓. 最后要依靠这些过程数据和设备估计初步地作出该过程所需投资和生产成本的可能量级范围. 此

外还要考虑在过程中所需的原料是否可以就地取得或者需从何处运来, 以及当地的人力、水电、材料的供应情况, 交通的条件如何, 工人的技术水平等等.

有以上的许多依据, 大家才能坐下来很客观地去判断这个方案是否有进行实验的必要. 鉴于过程研究往往耗资较多, 如没有上述的许多技术和经济数据作为依据, 单单凭少数人在会议桌上依靠个人的一点常识来空谈一番就作决定, 显然会造成巨大的浪费. 这些数据是初步的、粗率的. 可是它们毕竟是有根有据计算出来的, 在量级上指示出一定的经济容限, 比诸光凭一些常识的空谈当然不可同日而语. 因此这第一阶段的过程研究工作显然是不可少的.

2.3 实验规模的过程实验以及在决定作中间工厂规模实验以前的评价

如果上一阶段的初步过程评价认为可行, 就可以进一步进行有系统的实验室规模实验. 在实验室规模实验中, 除出证实该过程是否可行外, 还要从它摸索出一些关键性的主要因数和数据, 如回收率、转化率、各种效率, 以及各种操作条件如温度、压力、浓度、停留时间等在发生变动时对整个过程所产生的效应. 用这些数据来进行过程设计, 修订流程和其中的设备项目, 使它的现实性和可靠度大为增加.

过程数据和依此经过程计算修订过的流程其精确度和可靠性大为增加, 作进一步与实际情况距离更近的经济估计就有了更切实的依据. 于是在这一阶段中对经济数据和地区数据可以作再次的进展. 这些估得的数据, 加上由过程设计所配得比较完善的流程可以作为是否须进行中间工厂规模实验的评价之用.

在此阶段中, 对最终正式工厂的设计, 可以同时开始考虑. 虽然在设计中有不少地方还要等待从中间工厂实验取得数据后始可进行, 但仍有许多设计工作可以先做起来, 为最终阶段的过程设计节省许多宝贵的时间.

2.4 中间工厂规模和半企业工业规模的实验和研究

这两个阶段得依实际情况, 即要求完成任务的时间限度和冒风险的程度, 合并为一个阶段. 它们除出规模量级上的差别外, 在设计的目标上也不尽相同. 中间工厂的设计是以获得最多最好的过程数据为首要目标, 并不考虑到用它来生产成品的问题, 然而半企业工厂的设计把生产也考虑进去, 仅就研究部分的方法和内容而论, 它们是相似的.

中间工厂和半企业工厂实验的主要作用是: 正式确定在较大规模中过程在技术上的可行性; 获得更详尽更精确的正式工厂设计用过程数据, 从而可能为正式生产工厂作出更可靠的投资与成本估计; 研究由于操作条件

的变更所引起在产品质量、产品回收率以及在经济指标上的影响,找出最合宜的操作条件;从而定出操作规程和技术指标的控制范围;最后一项作用是培养训练出一批能掌握这个过程的操作人员。

中间工厂不一定是正式工厂色色俱全的雏形.应该着重在那些过程数据尚缺乏的单元或单元操作上.逢到那些数据已经齐全、设计不成问题的单元,仅需就地取材,达到作为其他各单元的联系站的作用就行.在实验中对这一类的单元就可以不去为它操心或替它去精心设计.

由于中间工厂一般耗资很大,必须在作过全面的深思,尤其是对应不应建立它、规模是多大、怎样去建立、以及建成后将作些什么实验、求些什么数据等有了全面的打算和筹划后才能进行.经验告诉我们,在考虑得不全面、扩大的比例不恰当、在工厂建成后甚至还不知需测哪些数据等等的情况下,无论在人力、物力、财力和时间上都会蒙受极大的损失,甚至使过程归于失败.

这两个阶段的实验进行期,要把实验所得的数据随到随分析.要把分析结果随时用来修正改善中间工厂及/或实验的设计,并对中间工厂的设备作相应的改良.如此继续取得实验数据,继续修正,循环不已,直到认为过程已达合宜完善为止.此外有些在中间工厂实验中所产生的问题可以通过在实验室中进行附属的研究来解决.这些研究都是为中间工厂实验服务的,在不少例子中它们会涉及很多的学科和理论,并在理论的指示下得到更有利的发展.不妨说大多数过程工程的理论和学科是这样从实践中带动出来的.一般说来,理论总要比实践出来得迟些.有些单元过程已经得到了广泛的应用,而且成效显著,可是至今还没有得出其中的关键理论的也是常有的事.这说明了在过程工程的研究中,必须循任务带动学科,自实践才能产生理论.

2.5 观念的实现和不断的革新

在中间工厂及/或半企业工厂实验完成后,作了正式工厂的过程设计和经济估计,如果认为结果良好,就可进行正式工厂的建设.此时大功告成,观念得以实现.这一阶段的工作已不属研究工作的范围,兹不赘述.值得一提的是在正式工厂开工生产后,中间工厂依然起着许多作用.这些作用与以前略有不同.主要的有:当原料的成分和/或性质、催化剂或离子交换剂或离子交换树脂的活度或类此的项目发生变化时在产品质量和回收率、过程的操作性能以及经济指标等方面所产生的影响的测量和推断;在操作条件被迫作变更时在以上各方面所产生影响的测量和推断;在已有的基础上改进过程和设备,继续寻求更佳的技术和经济上的合宜点;当在正

式工厂中发生困难或枝节问题时可设法在中间工厂设备中进行实验以求解决.因此多数中间工厂往往在正式工厂建成后不立即拆除,尚需保留一段时间;有的甚至一直有用,与正式工厂共存在下去.

2.6 过程发展中的计划控制

在图4中每阶段结束后都有计划控制“一项”,通过它来决定下一阶段的工作是否需要继续.如需继续,规模究竟需多大?由于过程发展在各方面的耗费很大,而且一次大于一次,因此以上两个问题的抉择是在过程发展中的一件大事.除出要进行该阶段的工作结果和在技术上的可行度和经济上的合宜度的审查以外,影响以上抉择的重要因素还有两项:那就是任务本身所给的时间容限和最后正式工厂的规模大小.对于研究结果的审查由于有技术和经济的数据可藉尚属不难;可是要从时间容限和工厂规模以及其他各种因数来决定中间研究阶段的级数和规模却非易事,只有那些作过长期过程研究、具有丰富经验的研究人员在经过仔细全面的分析和估计后才能做出决定.事实上它本身是一门科学,应用到统计学和运筹学的结合.

3 过程工程研究工作具体内容一斑

3.1 理化数据和过程数据的计算和测定

在过程工程的研究工作中所需要的物理和化学数据往往不是少数,其中以热力学和化学动力学数据最为重要.在这里热力学是一种工具,通过它,把在一个反应中反应物和生成物间的一些很困难甚至不可能直接测量的性质数据可以利用物理化学的公式,从那些较易量得或者已经载诸文献的热力学数据(一般为各元素或化合物的热容、热焓、熵、生成热、转化热等)去推算出来.例如计算自由能和化学势,以及它们在各种不同的温度、压力、各成分的浓度或分压下所发生的变动.从而算出某反应在各种条件下当反应达到平衡时反应物和生成物的浓度或分压.因此在过程工程研究中,热力学的计算有3个主要的作用:第一,指出某一化学反应的可能性以及在平衡状态下各物质间的定量关系,使过程工程研究者不致对那些不可能的反应进行徒劳无功的尝试.其次,可以大致预测使反应顺利进行的合宜的温度、压力和浓度条件,大大缩小了实验摸索的范围.第三,可以预计在达到所希望的反应情况时所需热能和机械能的数量,为初步流程提供基本的数据.

对于那些反应速度很高的化学反应来说,物质间的传递转化的速度主要受着运动扩散的控制,在实用中除应该定性地知道它反应很快外,不一定需要定量地去查究或测定它的反应速度.但对于那些反应慢,基本上

受着化学反应速率控制的反应或过程来说,就有必要知道反应速率究竟有多少.热力学的计算并不能提供这种速率的数据,必须依靠化学动力学的数据或实验来计算或测定.有了这些数据,就可为后一类的过程估计出物料在反应器内停驻时间,从而可以估计反应器的大小.对于那些反应很慢的过程,就必须寻找适当的催化剂以使反应加速、达到工业上的有利条件.

所谓过程数据就是指在一个过程中各个环节单元中的各种技术数据.任何过程如果没有过程技术数据可藉,在中间规模实验中无论做得怎样成功,也无法把它推广应用.一些未知的过程数据的测定和计算是过程研究工作中首要的事.根据这些数据,设计工程师才能进行设计,不然他们是无能为力的.当然也有不少过程数据可以由设计手册中已有的经验或理论的公式来推算,设计工程师是可以胜任这种计算的.但作为工程研究人员,应该把以上两种过程数据区分开来,积极承担起设计工程师能力不及的工作,这样做可以使在工作上不致造成浪费和延误.

3.2 流程的制定、物料平衡和能量平衡

在一整套过程中,必须对在物料通过每一个有化学反应的单元过程和没有化学反应的单元操作时所发生的物质和能量的传递和变化以及所达到的效果、对各单元间的联系和排列、对在各单元中所用的各种设备的类型规格和性能都必须有细致、现实而可靠的定量安排.如何安排得最是多快好省,有时是非常复杂的,它本身就是一门科学.以上各项的研究成果在过程工程中就集中概括地表现在流程图中.一张完善的流程图往往是许多过程劳动的结晶,得之非易.如前所说的,流程图的制订随着在过程发展中各阶段愈来愈可靠的过程数据的取得而日臻完善.但就完善的程度而论,也只是相对的.由于技术科学的发展迅速,任何流程图所表现的合宜性也只是暂时的.一等到有更新的过程能在技术上和经济上又更胜一筹的时候,它就会被人所弃置.然而从其中所得到的经验和所发现的规律是永不磨灭的,它将被后人承继下去作为发展出更好的新过程的起点.

在过程发展各阶段中制订流程图的时候,须对全部物质和能量的来踪去迹交待明白,这就是物料平衡和能量平衡的计算.除出那些涉及原子能的过程外,其余都可以用循质量守恒和能量守恒两个定律来计算.在能量平衡的计算中主要是计算热能的转化和传递,化学能和机械能等次之.

3.3 估计在扩大规模时所产生的效应

大多数的过程发展都是从小到大.从实验桌上的烧杯试管实验一直发展到每日能处理成千上万吨原料

的大规模工厂,中间要经过多次的扩大.即使在实验的阶段中也如前所述的从实验室规模实验经中间工厂到半企业工厂要扩大一二次.由于扩大而引起的效应是非常复杂的,牵涉到在动量的传递、热能的传递、质量的传递和化学反应中的许多相似法则.从小规模实验所得的结果,并不一定是在大规模中所得结果的一个可靠的引导和估计,这是历来过程工程师最感头痛的事.有时在小规模设备实验中进行颇为顺利的过程,在搬到大规模上去的时候就发生了困难,间或还会得到与预期相反的结果.模型理论就在此时得到了应用,用来预测这些因比例扩大而引起的效应,并且还要决定一些如何从模型的性能来得出扩大型设备的可靠性能条件(如果有的话).

专门研究在过程模型扩大中所关系到的各种规律是一门科学.它以因次分析和上面所提到的模型相似理论为基础.广义地说,凡是在实验室或中间工厂中用较小规模的设备来进行过程研究的实验都是过程模型试验.当一个研究工作者每次把以上这些实验用无因次列成经验公式时,他在无形中已经遵循了模型理论中的比例扩大定律.可以简化的地方是:在把一个已经作了实验的特殊单元操作设备进行比例扩大时,对所用物质的物理性质的确定和无因次的计算都可以省却,只需把从无因次的相互关系中寻出合宜的比例扩大规律来直接加以应用就行.

当然在模型扩大的法则中也还存在着许多缺点.正如其他的科学一样,模型理论也有它的局限性.它固然能解决某些问题,可是并不能解决所有的问题.对某些问题虽然可以得到结果,可是它的精确度还是较差的.然而比起毫无根据地去扩大规模,当然不能同日而语了.近代科学工作者的努力方向,乃是准确度愈来愈高的快速而成本低的设计用数据的细致化与精确化.把模型理论用之于过程工程研究中的比例扩大,加上以下将要谈到的为合宜的实验设计而作的统计方法在过程研究中的应用,乃是走向这个方向的第一步.

3.4 新型设备的发展

任何一种新型设备必须要求它在承担起整个过程中单元操作或单元过程的工作之后能使整个过程在技术和经济指标上要比旧过程更为优越才行.历史上最著名的就是在炼铁过程中热风设备的创造,它为大量廉价炼铁打开了道路,使人类的文化更轻快地进入了钢铁时代.近十年来如流态化设备和技术的出现也为过程工程觅得了多快好省的一把钥匙,为不少过程节约了大量的投资并降低了操作和产品的成本.又如高压釜的发展和应用使某些本来在常压下不可能进行的反应得以进行,

从而有可能经济地去生产所需的产品。从这些例子我们可以看出由于设备的改进或新设备的出现能使一个过程本来是成为可能，本来不经济的化为经济，大大增加了自然资源的利用率。因此发展新设备是过程工程研究中的一个重要部分。

正如以上曾说过的，当在一个过程中的某单元部分采用某种设备时，其准则并不在于该设备的新奇与否，主要是要衡量试验它在该过程的整体中能起的作用在技术上是否符合要求，所消耗的投资和能量是否最小而定。因此新设备的研究必须从总体的过程出发来考虑问题。如果把它从过程中分割出去，单独片面地加以研究，就很容易忽略掉了由该设备的参加所引起的对其他单元的负荷转嫁的效果。这样会使人们估计不出这种设备对整个过程带来的经济效果究竟如何，因此也无法对它的成就做出正确的评价；即使有之，也仅能对它作一些主观定性的估计而已。负荷的转嫁有正的和负的两方面。正的负荷转嫁不利于新设备的设置，负的转嫁是有利的。把全部过程中各有关单元的转嫁量累计成总的转嫁量，不论其是正是负，用它来和该设备本身比旧设备的有利程度相衡较，就可以具体地估计它在某总体过程中所起的经济效果，就可避免因不计及负荷转嫁效果而可能得到的片面不准确的判断和评价。有了以上的概念，我们对新型设备的发展研究工作，就可以完全和实践相结合。

同样的理由，在过程设备中选用各单元的设备时，研究人员除了要决定它们的规格和大小外，更要紧的还要决定设备的取舍问题。这是一个很重要的问题，有时甚至可以成为在新过程发展中成败的关键问题。作为过程研究者必须从过程的观点来看问题，不能片面地从设备的观点来看问题。例如在一个还原过程中一般总不免认为把气体中非还原性气体的部分，如 CO_2 全部清除后再去还原要好些，现在如果所能利用的气体中含有 5% 的 CO_2 ，问题于是来了，到底应该去发展一套能把这 5% 的 CO_2 完全除掉的设备好呢，还是另想办法尽可能的去利用这 5% 的 CO_2 的设备好呢？如果从设备的观点来看，不免要想到去钻研这种除去 CO_2 的新设备。但从过程的观点看，也许有许多其他不费力的法子可想和经济的道路可循，使 5% 的 CO_2 的气体在过程中可用不成为问题，根本就不存在如何除 CO_2 和发展这种新设备的需要。片面地去进行这样的新设备的研究可能是白费的。因此，在进行新设备研究和发展之前，先要从过程的观点来决定它的取舍。

3.5 过程实验的设计和数据的分析—统计方法的应用

凡是做过过程实验的人都曾为实验结果所得的数据缺乏重演性大伤脑筋。即使在完全相同的操作条件

下，也不会得着完全一致的过程数据，它们总是上下参差的。换句话说，是具有变异性的。这是因为在过程实验中，从原料的取样开始，每经一种物理或化学的变化，每个条件因数的控制、以及每种仪表的测量都毫无例外或多或少地引入了误差。这些误差的累积导致历次结果所得的过程数据的差异。只要我们掌握了这种差异的客观规律，转而用来定量地找出差异的程度，在一定的置信范围中仍可以作为估计以后在同样情况下可能得到的过程数据之用。这些规律就是以数学概率论为基础的统计学的规律，所用以分析数据的方法就是统计方法。

从实验测得的过程数据固然要求能足以准确地代表本实验的规律，但更主要的是要用它来估计或预测以后在同样或相似的过程中的相当数据，这也就是主要的过程研究的目的。如果达不到这个目的，这些数据就将失去它们在实用上的意义。然而实验的数目毕竟是有限的，如何从少量的实验数据来估计全部的实践数据，这等于说如何从样品来估计总体呢？光靠一个单独的数据或单独的平均数是不能估计的。一般是在平均数之外再加上一个置信范围在 95% 以内的从量测数据分布的展开度的标准误差算得的上下起伏度。这样的过程数据才可用作为正式工厂中技术控制的根据。

除了计算数据的分布和估计用的置信范围外，应用统计方法中的 t-检定法还可比较在不同条件下所作出的数据是否有显著性差别。有时两数据事实上属于同一总体，但由于表面数字上的不同，使人把这种同一总体内部分布的变异误差认为两者之间显著的差别，从而误断一过程优于另一过程。t-检定法可以帮助我们辨别同一总体内部的变异和不同总体间根本的差别，同时在概率的基础上对这种差别也可以得出定量的估计。

不但如此，当我们从实验数据在分析一些变数(如温度、压力、湿度、停驻时间等)对某些过程数据(如回收率、转化率等)的主效果和交互影响，并要求获得一些定量的规律或经验法则时，就可以应用统计学中的方差分析法和回归计算法去分析和归纳。熟悉了方差分析法，回过头来就能够在实验尚未进行前对实验作出较好的打算，得以从最少数目的实验来取得大量的情报资料，这就是实验设计。鉴于过程实验都很费钱，实验的设计是完全必要的，这样可以使测得的数据大都有用，浪费的实验大大减少，阙如的数据得以补足。一般实用的实验设计方法为析因组合法和拉丁方组合法。后者适用于大面积粗略的探索，所得的数据用方差分析只能找出主效果的有无和程度，但实验数目要比其他法子省得多。前者适用于进一步深入的研究，实验数目较多，用方差分析不但可以找出主效果，而且可以找出各变数间

的交互影响。

把统计方法作为工具,使过程实验设计和数据分析更为科学化和系统化,是完全符合多快好省进行研究工作这一原则的。

3.6 从间歇过程到连续过程的转化

从大量生产和自动化的角度来看,连续操作的过程无疑是较为优越的。可是有不少实验规模的操作是间歇性的。如何在间歇操作中将所获得的实验数据和成果转化在工业上正式生产的连续操作工厂,是一个很重要的研究课题。另一个课题是如何把目前尚是间歇性的生产规模过程改良成为连续性的过程。例如有不少金属如钛、铝等的生产在目前还是用间歇性的还原过程来制取,这样做产量小,操作工序复杂,成本不易降低。又如炼钢过程也属于间歇性的类型。不论用平炉或转炉炼钢,都必须一炉一炉地搞。在转炉车间中的一天炼上几十炉,把工人同志们和吊车都忙得不可开交,使产量大受限制。把上述的间歇过程进化为连续过程当然并非易事,多数需要进行中间工厂规模的实验。但从发展观点来看,任何间歇过程最后都应进化为连续过程,才能使过程的自动化得以实现。因此这一课题是过程发展研究中的一大任务。

3.7 经济数据的核算和最佳设计

以上屡屡提到了经济两字,正因为一切过程的发展和研究都必须从多快好省着眼。失去了经济核算就失去了用来衡量一个过程是否有生命力的重要尺度。只有通过时刻追随在过程发展后面的经济成本核算,才能对过程发展的方向道路有所抉择,才能确定整个过程的经济价值。因此正如以上一再提到过的,除了极少数的例外,任何一个过程的出现不但要在技术上可行,还要在经济指标上经得起考验。有不少新过程虽然看来很“摩登”,可是如果不经济的话,还是用不上;只能把它束之高阁,留待他日之用。

上面已经说过,多数新过程的创造并不一定要求在流程中安进许多“新”设备。只要是许多设备单元在集体进行操作时所联结成的过程是以“新”的观念经过逐步扩大的实验发展而成且在经济上有实际意义的话,就可称为新过程。因此在一个新过程中各项设备的设计和选择,必须要求它是一个“最佳经济设计”。这些设备的操作条件的选择,必须是一个“最佳操作设计”。最佳点的选择可以用图 5 和 6 的例子来说明。图 5 为选择某种高压反应器之用。已知在该过程中反应器压力愈高则生产率和回收率都愈高,从而使每吨成品的成本降低。但同时压力愈高,反应器的投资额、折归、以及动力消耗都随着上升。把这些帐都折算在每吨成品上,得到一

根上升的曲线。在两曲线相加所得的总成本曲线上就出现一个最佳经济头,该点所表示的压力为最佳经济反应的压力。

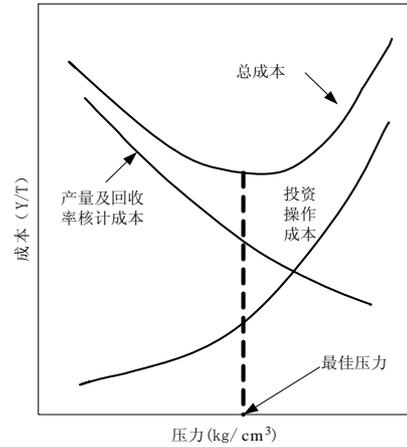


图 5 最佳经济高压反应器的选择
Fig.5 Optimizing pressure for a pressurized chemical reactor

图 6 用来选择从 SO_2 转化成 SO_3 的最佳操作温度。假如其他因数如输入气体的温度、气体流量、反应器的大小、催化剂的活度等都相同,如温度太高由于在 SO_3 和 SO_2, O_2 间的平衡促使反应向 SO_2 和 O_2 方向进行,从而使 SO_3 的转化率降低;但如温度太低,转化率也会降低,这是由于 SO_2 和 O_2 间的反应速度放慢的缘故。其中有一个 SO_2 转化率最高的操作温度如 O 点所示,也就是我们应该选择之点。

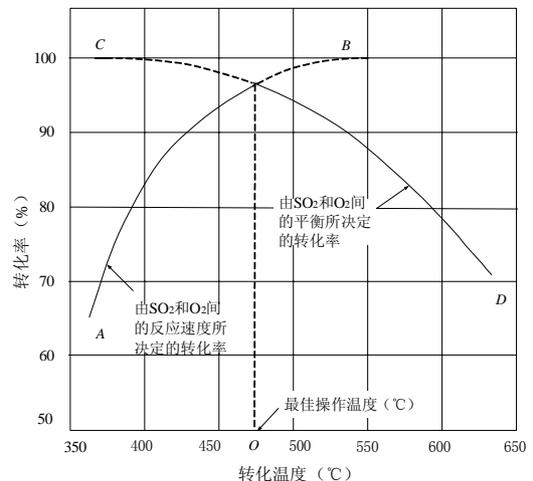


图 6 最佳操作温度的选择(SO_2 转化成 SO_3)
Fig.6 Optimizing reaction temperature for oxidizing SO_2 to SO_3

以上的例子是把实际会遇到的情况大大简化了的,在实际上必须全面地考虑所有因数的影响,最后可能得出几个最佳点来再加细致的比较,当然与此同时,必须考虑到地区条件、水电供应、技术水准、能得到供应的

物资设备的种类等实现条件,最佳点的选择才不致落空.

3.8 操作规程和控制界限的制订

根据实验后阶段即中间工厂或半企业规模工厂所取得的数据和经验,就可以制订出技术操作规程,作为以后正式工厂操作之用.除出对操作工序应予规定外,对各种技术数据和产品质量的控制范围也应有所规定.要找出不同操作条件对于产品的产量和质量以及对于经济指标所产生的影响;要指出在原料的品位性质发生变化时对上涉指标可能引起的影响.在定量方面,一般要用统计方法定出平均数的 95%置信界限作为在工厂中进行操作时的控制范围标尺.图 7 为一般常用的 \bar{X} -

控制图和 R -控制图的应用示例. \bar{X} 为条件因数的平均数,此处以 \bar{X} 代表在某过程中一种泥浆内所含固体百分率每 5 次连续取样的平均数.每点代表一个平均数.在 R 图中每点代表每 5 个取样中最大值与最小值的差数.在用统计方法制订好 95%置信度的上下控制界限后,如发现 \bar{X} 或 R 的实际操作数据越出所订界限超过 5%时,就要在过程中进行适当的调节来加以校正.这种控制方法不仅在工业上很有用,并须在建立正式工厂前制订出控制范围外,即使在各个过程实验阶段中也很用得着.这种控制图的好处是一眼就可看出该因数的变化趋向.

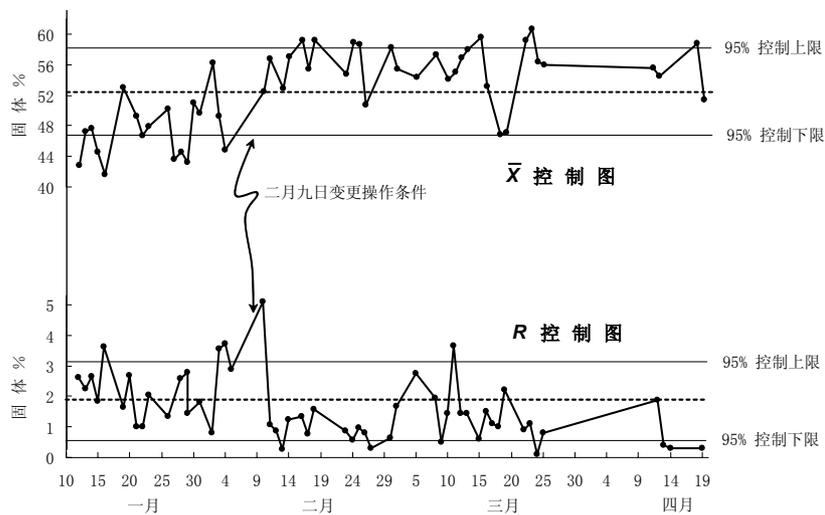


图 7 泥浆中固体含量界限控制图
Fig.7 Controlling the solids content of a slurry

4 结语

过程工程的研究和发展牵涉到一个相当广泛的领域,这里所能够介绍的也仅仅是作者在过去工作中所能体会到的一些很浅薄的经验,一鳞半爪地介绍出来,以供正在进行或有志于过程工程研究的青年科学工作者

和专家们参考,并不要求大家必须以此为绳.由于作者学识的不足和见闻的不广,其中谬误之处在所难免.希望专家们不吝赐教,提出宝贵的意见,指出其中的错误和缺点,以便改正.相信在党的领导和建设社会主义总路线的指导下,我国过程工程的研究一定有着一个灿烂光明的前途.

参考文献: (略).

编者注:此文完成于 1959 年 11 月,作者单位中国科学院化工冶金研究所 2001 年改名为中国科学院过程工程研究所.

Process Engineering

Mooson KWAIK, YANG Ji-ke

(Institute of Chemical Metallurgy, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, China)

Abstract: This paper, written 49 years ago as an in-house document, relates the basic concepts of process engineering and how to organize process development including details at various stages. It is being published as a historical document in commemoration of the 50th anniversary of the Institute of Process Engineering, Chinese Academy of Sciences.

Key words: process engineering; process engineering research; process development; chemical process engineering; chemical process research; chemical process development