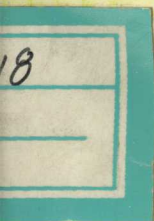


化工过程的 建模、仿真和优化

胡上序 陈 海 著

郑 重 校

浙江大学出版社



化工过程的 建模、仿真和优化

胡上序 陈海 著
郑重 校

浙江大学出版社

内 容 简 介

化工过程的建模、仿真和优化是一本比较全面介绍过程工业对象的建模、仿真、优化技术的基础读物。本书的撰写考虑到读者已经具有高等数学、编程语言、应用统计、化工原理等方面最基本的知识。它适合于化工、石化、能源、冶金等过程工业领域内从事生产、开发、设计、科研等方面技术工作人员的需要,可以作为有关专业大学本科高年级学生或研究生的教材,也可以作为以上诸领域中工程技术或科学研究工作人员的自学读物。

化工过程的建模、仿真和优化

胡上序 陈海 著

郑重 校

责任编辑 邹小宁

*

浙江大学出版社出版发行

(杭州玉古路 20 号 邮政编码 310027)

浙江大学出版社电脑排版中心排版

浙江农业大学印刷厂印刷

*

850×1168 毫米 32 开本 11.25 印张 302.8 千字

1997 年 10 月第 1 版 1997 年 10 月第 1 次印刷

印数 001—600

ISBN 7-308-01950-0/TQ·018 定价:12.00 元

前 言

为了寻找更快、更好地研究过程工业对象的方法,人们致力于对化工过程的建模和优化研究工作已有不短的历史。由于在计算机科学迅速发展的同时,数字仿真技术有了很大进展,它已成为一种高效的手段,终于使建模和优化成为相互密切相关的技术,不但走上了实用的道路,而且还搭上了以计算机为基础的快速技术班车。

在作者接触到的从事过程工业设计、开发、研究等方面工作的技术人员中,很多人提出了希望能有一本比较全面介绍建模、仿真、优化等内容的基础读物。根据多年来在教学、科研、生产等方面积累的资料,作者撰写了这本教材。本书的写作注意到需要适用于不同情况的读者。在总体范围上尽可能包括较宽的面,并相应地作出一般化概括。而对其中部分内容则又尽可能具体化,使之易于结合实际问题使用。为了简练起见,避免使用了具体的数字示例。这对于具有高等数学、应用统计、编程语言、化工原理等方面基本知识的读者来说,相信并不会增加理解上的障碍。

本书的写作得到浙江大学教材建设领导小组的指导和帮助,在出版过程中又得到浙江大学出版社许多同仁的全力支持,谨在此表示深切的谢意。希望本书对从事过程建模、仿真、优化等方面工作的朋友们能提供或多或少的帮助,也希望诸位在阅读和使用本书时提出宝贵意见。

作者

1996 年 9 月

目 录

01	引论	1
01.01	发展化学工业所需的技术支持	1
01.02	化工过程分析	3
01.03	计算技术对过程分析的作用	7
01.04	本书的主要内容	12

第一部分 数学建模

02	数学模型基础知识	13
02.01	数学模型的内涵	13
02.02	数学模型的类别	15
02.03	建模的一般方法与步骤	17
02.04	数学模型的选用原则	20
02.05	综合性能的数学模型	21
02.06	建模方法的内容安排	22
03	工艺建模的基本方法	24
03.01	基本原则	24
03.02	物料平衡方程	25
03.03	动量平衡方程	27
03.04	热量平衡方程	29
03.05	相平衡	31
03.06	化学反应速率方程	33
03.07	基本处理模块	35
03.08	本章所使用的符号	37
04	稳态集中参数模型	38

04.01	单级设备	38
04.02	单级和多级蒸发器与冷凝器	42
04.03	多级吸收塔和解吸塔	46
04.04	精馏塔	49
04.05	单级和多级提取器	52
04.06	多级全混反应器	56
04.07	广义的多级过程	57
05	稳态分布参数模型	60
05.01	流体流动	60
05.02	套管换热器	61
05.03	管束式膜分离器	63
05.04	垂直壁上的逐步冷凝	66
05.05	管式反应器	67
05.06	稳态热传导	70
05.07	广义的分布参数模型	71
06	动态工艺模型	74
06.01	单级集中参数动态模型	74
06.02	多级集中参数动态模型	77
06.03	分布参数动态模型	80
07	经验模型和统计分析	83
07.01	通用经验模型	83
07.02	变量的粗选	87
07.03	变量的精选	92
07.04	非线性模型	97
07.05	模型的优选	100
07.06	数据的筛选	105
07.07	半工艺模型	106
07.08	动态经验模型	107

第二部分 数值仿真

08	数值仿真的基础方法	110
08.01	任意函数的逼近	110
08.02	二次多项式样条插值	116
08.03	三次多项式样条插值	120
08.04	二维二次多项式样条	129
08.05	有理函数插值	133
08.06	数值求积	134
08.07	数值求导	144
09	代数系统的数值解	154
09.01	一元非线性方程求根	154
09.02	线性代数方程组的经典数值解法	162
09.03	线性方程组的其它解法	170
09.04	非线性方程组的经典数值解法	177
09.05	非线性方程组的近代解法	181
10	常微分系统的数值仿真	185
10.01	示例问题	185
10.02	矩形近似解法	187
10.03	各种单步求解方法	192
10.04	多步求解法	196
10.05	联立常微分方程	200
10.06	高阶常微分方程	204
10.07	常微分方程的边值问题	205
11	偏微分系统的数值仿真	209
11.01	偏微分方程的一般情况	209
11.02	求解椭圆型方程的差分方法	212
11.03	差分展开式的不同求解方法	217
11.04	求解抛物型方程的差分方法	223

11.05	线上求解法	228
11.06	双曲型方程和特征线方法	231

第三部分 优化技术

12	无约束的优化方法	240
12.01	化工中的优化问题	240
12.02	单变量函数的寻优法	243
12.03	区间渐缩法	244
12.04	多项式逼近法	251
12.05	方程求根寻优法	256
12.06	多变量函数的寻优法	257
12.07	直接搜索寻优法	258
12.08	逐向寻优法	262
12.09	二次型逼近法	266
13	线性规划	268
13.01	基本概念	268
13.02	退化的线性规划问题	271
13.03	约束条件的由来	272
13.04	单纯型求解法	273
13.05	标准型求解法	278
13.06	初始可行解	279
14	非线性规划	281
14.01	乘子方法	282
14.02	局部极值的条件	288
14.03	二次规划	294
14.04	通用简化梯度法	295
14.05	罚函数方法	303
14.06	序贯二次规划	306
14.07	随机搜索法	312

14.08	相继线性规划	314
15	多级和离散对象的优化	316
15.01	动态规划	317
15.02	整数和混合整数规划	326
15.03	分枝和定界法	333
附表		343
参考文献		349

01 引 论

作为全书的开始,在本章中将扼要介绍全书的内容概貌,以及这些内容对化学工业发展的意义。文中所论述的是广义的化学工业,即包括化工、炼油、石化、冶炼、造纸、水泥等对物料进行各种物理、化学加工处理的所谓过程工业。

考虑到本书所叙述的内容都要用计算机作为基本工具,在本章中还将特意分析计算机技术对过程分析的作用。

01.01 发展化学工业所需的技术支持

化学工业的发展,依赖于许多学科的直接或间接的支持。图 01-01 给出了一种简要的形象表达,其中实线箭头表示直接支持,虚线箭头表示间接支持。在图的下部列出一个“技术分析”框,它表示将各种不同学科知识综合集成后对化学工业发展的支持。与本书内容紧密相关的则是其中的“化工过程分析”部分,对于该部分所包括的内容,将在后面的章节中进一步展开叙述。

现代化工技术的发展有许多特征,其中有几个很值得重视的方面,列述于后。

(1) 为了追求规模效益,单个装置的产量日益扩大。

(2) 为了适应市场多样化需求,在同一工厂内,利用少数几种标准设备,经过不同的组合,并掌握不同的工艺条件,生产多种产品。

(3) 由于理论的提高和经验的积累,生产条件日益趋于优化操作。

(4) 自动化程度不断提高。

因此,对化工技术的各主要方面,例如:新工艺的研究,工艺过程的放大开发,过程设计,生产过程的技术改造,生产操作条件的改进,产品的品质管理与生产控制,操作人员的训练,等等,都提出了新的

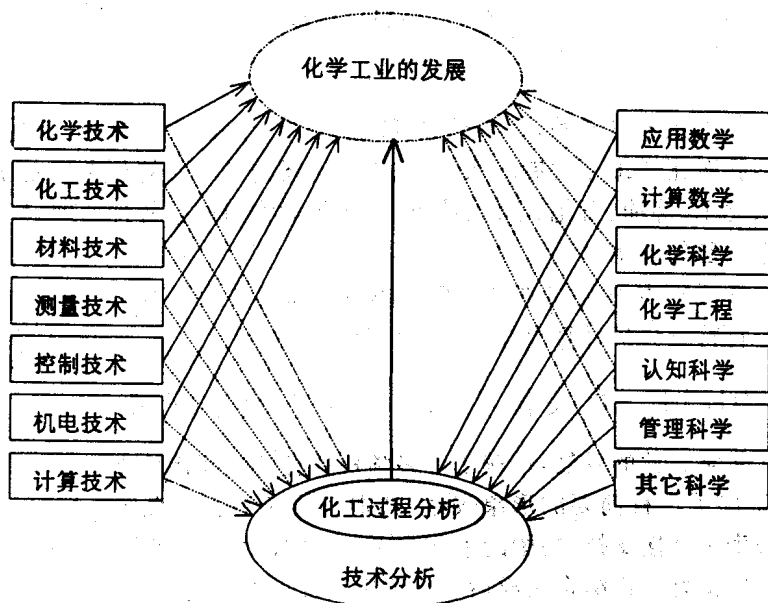


图 01-01 发展化学工业所需要的技术支持

更高要求。特别是对化工过程技术问题的分析研究,也就是所谓的“过程分析”明显地出现了下列趋向:

- (1) 更重视定量地弄清各个自变量与因变量间的关系;
- (2) 要求更加精确地描述变量间关系的性质;
- (3) 需要包括尽可能多的变量以便对过程作更加全面的分析;
- (4) 希望对不同的原料和不同的操作条件作更为细致的研究。

因此,“过程分析”的技术,必须要更多地依赖于现代计算机技术,包括建模、仿真、优化,它们已日益成为化工技术人员必须掌握的重要工具。

对化工技术教学而言,同样必须适应这种发展,增加这方面的内容。本书正拟在这方面作出努力。

01.02 化工过程分析

化工过程分析的重要手段是：采用某种方式，模仿一个已有的、或者还未曾有过的化工过程，对它的行为或可能的行为，进行模仿性的分析研究。它的主要内容可以分为建模、仿真、优化三大部分，即针对一个化工对象，建立模型，然后用模型研究对象的行为，进一步再通过系统化地考察在不同条件下对象的不同行为，寻找能最好地适合研究者要求的对象结构与运行条件。它的实质是建立一个模仿世界，作为真实世界的映射，也有人称之为映照。如果模型是由软件构成，则建立的是一个虚拟世界，采用的方法可称之为虚拟映射方法，请参考图 01-02 所示。

建立虚拟世界进行过程分析至少可以达到以下几方面目的：

(1) 比在真实对象上进行分析试验经济得多，可以节省大量的原料、材料、能量、人力。

(2) 提高过程分析的效率，可以大大加快分析试验工作进度。

(3) 避免在真实对象上进行试验时，可能出现意外事故的危险。

(4) 可以在更大范围内考虑真实对象上难以达到的条件。

但是，在虚拟对象上作过程分析也存在很多缺点，至少应提到的有下列各个方面：

(1) 虚拟对象忽略了真实对象中包含的许多因素，真实对象的行为中应出现的某些现象，在虚拟对象上不一定能出现。因而会失去许多发现新情况、新规律的机会。

(2) 虚拟对象中各个变量间的关系，与真实对象相比，会有不同程度的差异。因而产生了分析结果有多大可信程度的疑问。

(3) 虚拟对象运行时所使用的数据和条件，会在各种程度上与真实对象有所偏离。因此，必然会降低分析结果的准确程度。

用虚拟映射方法进行过程分析的主要步骤，以信息流程示意地表述于图 01-03，并请参考以下各点说明。

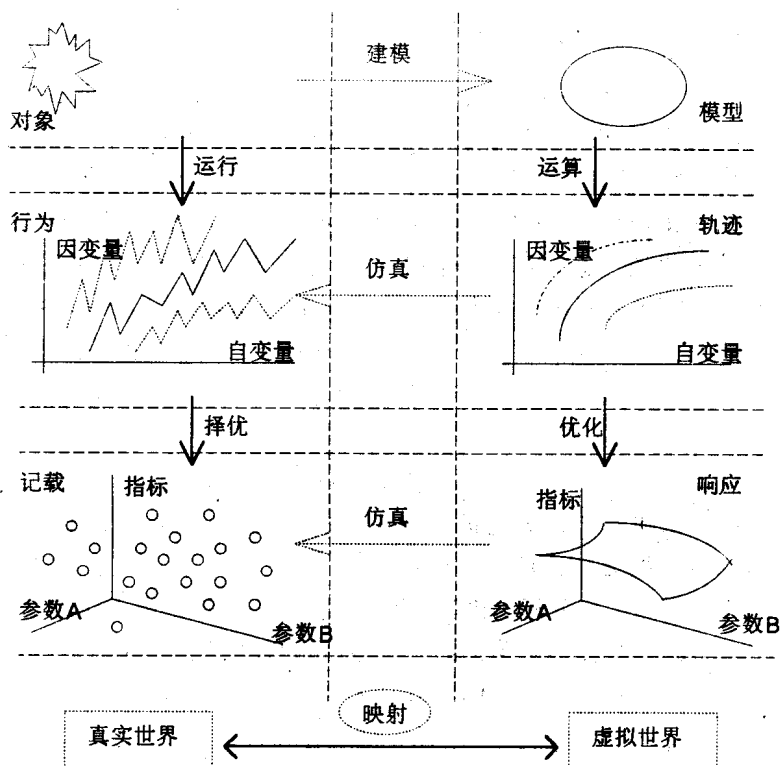


图 01-02 化工过程分析的虚拟映射方法

1. 问题的定义

这是整个分析工作的出发点,虽然并没有具体的规律可供应用,但是仍有通用的规律必须遵循。一般应该至少包括以下主要内容:

- (1) 工艺的目标,包括原料和产品的数量、品种和性质。
- (2) 对象的性质,包括工艺设备的规格、结构和组合。
- (3) 分析工作需要达到的要求。

2. 基本理论和经验运用

弄清分析对象所包含的各种物理、化学现象,确定描述这些现象

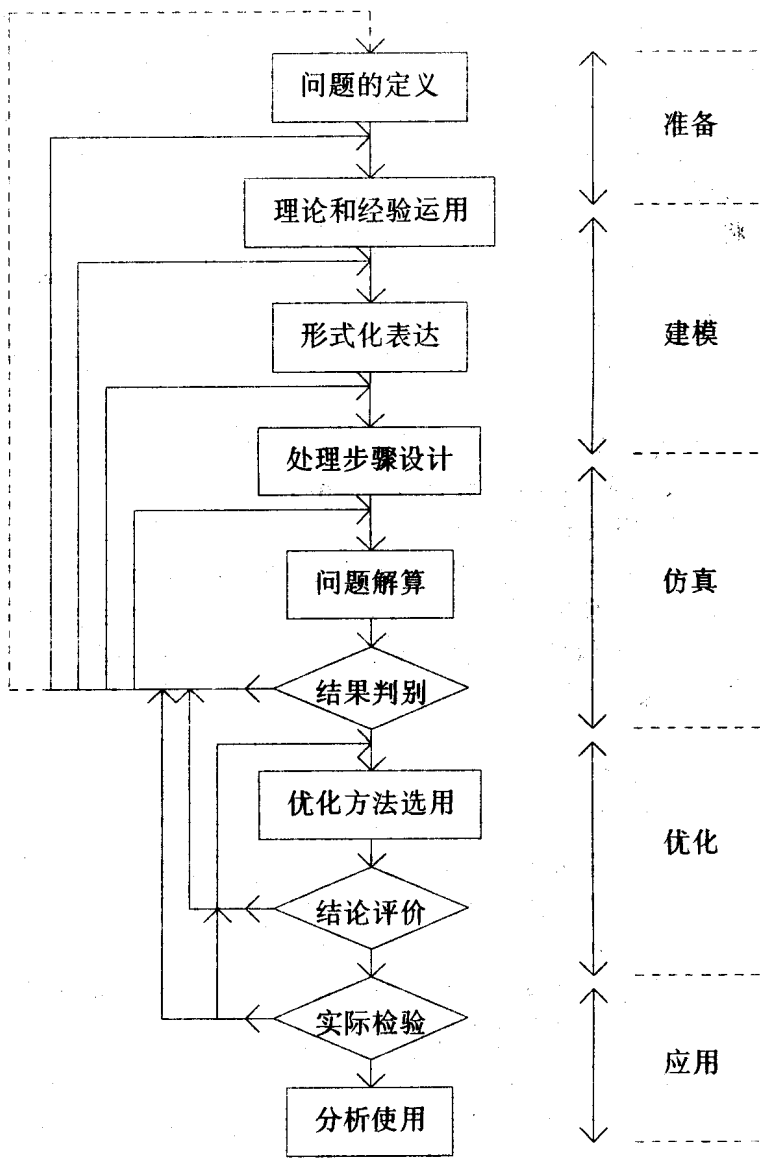


图 01-03 用虚拟映射法进行化工过程分析的主要步骤

所需要的基本理论和经验知识。根据问题的要求,选用有关理论描述应达到的深度和广度,相应地尚需收集必要的基本数据、经验知识和特定规律。在必要时,还需要对现有的成熟理论作适当的修改、扩展、延伸,对经验知识作出新的归纳、演绎、总结。

3. 形式化表达

将理论和经验知识运用于具体的问题后,必须以计算机能够接受的方式表示,它们将是数学方程式、数据、逻辑推理规则、符号化的知识等各种形式化的表达。这些表达的内容必须具有准确性、一致性、单一性,并且应该尽可能地既完整而又简单。这就是对象的数学模型。

4. 处理步骤设计

构成数学模型后,需要设计求解模型中所包含诸方程的步骤,以及运用专业知识进行推理的机制。例如可以用信息流程图表示:各个方程式的使用顺序,每组方程的输入数据和输出值,各方程间的连接形式和内容。这种安排基本上与实际对象运行机理相对应。同时还需要考虑的是:对解算结果的精度要求,需要处理的数据的总计划,需要仿真的案例个数、性质、内容,以及需要获得的其它各种辅助信息。

5. 问题解算

这是仿真阶段的主要内容。在很多情况下,同一个数学模型可以有不止一种解算方法,也可以有不止一种解算步骤。因此,有必要时尚可作各种方案的综合比较。

6. 结果判别

通常有不同层次的分析方法。最基础的浅层判别可以根据常识。较深层的判别可以将模型中的方程作一系列的简化假设,直到能用解析方法求解时,就可用解析结果作分析比较。非常深层的判别大多依靠计算机进行复杂的数值计算和逻辑推理。根据判别的结论,找出可能存在的问题。然后依次决定对问题解算、处理步骤、形式化表达、理论与经验的运用等有关步骤进行修改。修改后重新执行各个步骤,

反复进行到满意为止。有必要时,甚至有可能需要修改原问题的定义。

7. 优化方法选用

同一个数学问题,常常有多种优化方法可供选用,通常应该选用最可靠的一种。所谓可靠,一般指它的:①收敛性,即在较大范围取初始值都能在不太多的迭代次数内得到符合精度要求的解;②稳定性,即取不同的初始值都能得到相同的解;③健壮性,即能适应较大的条件变化范围。

8. 结论评价

可以从不同的角度评价优化结论。经验评价无疑是其中最直接的一种,但是却不一定能得到准确、肯定、全面的结论。另一类方法是设计专用的计算程序用于评价优化结论。

9. 实际检验

经过以上步骤,已经可将所得到的软件系统运用于示例的实际问题分析。这是一类很有效的经验,可根据使用于示例中发现的问题,继续不断改进前述各个步骤的内容。

10. 分析使用

经过多次反复改进,将得到一个比较理想的实用软件,供分析一类实际工业对象问题的使用。

01.03 计算技术对过程分析的作用

人们曾经尝试使用过多种途径建立过程模型,例如:缩小尺寸的实物模型,用电位、电阻、电流、电容等构成的电流模型,用管线和压缩气构成的气流模型等。事实证明,功能最强的是数学模型,时至今日,它已经成为最普遍使用的一种过程模型。由于计算机科学与技术突飞猛进的发展,对数学模型方程解算的数值仿真和优化技术中的许多难题,不断地逐渐得到解决,使数学建模、数值仿真、优化运算等三方面相互配套的过程分析技术逐渐成熟。其中:

(1) 建模的主要任务是:确定对象的问题定义,选用基本理论和

基础数据,选定模型数学方程类型和结构,识别主要待定参数。

(2) 仿真的主要任务是:确定模型方程的具体形式和全部参数,选用适宜的数值解算方法,在计算机上运算模型,恰当地解释运算结果。

(3) 优化的主要任务是:根据研究要求确定优化的目标,选用合适的优化方法,安排优化研究规划,分析优化运算结果。

现在已经很清楚,数值仿真基本上依赖于数字计算机的执行,而现行优化方法中大多数也用数字计算机来完成。然而,数学模型的建立,则仍有相当大部分的工作需要依靠人类专家的智能活动。这是因为建模所需要的智能活动性质层次比较复杂,图 01-04 对人类专家

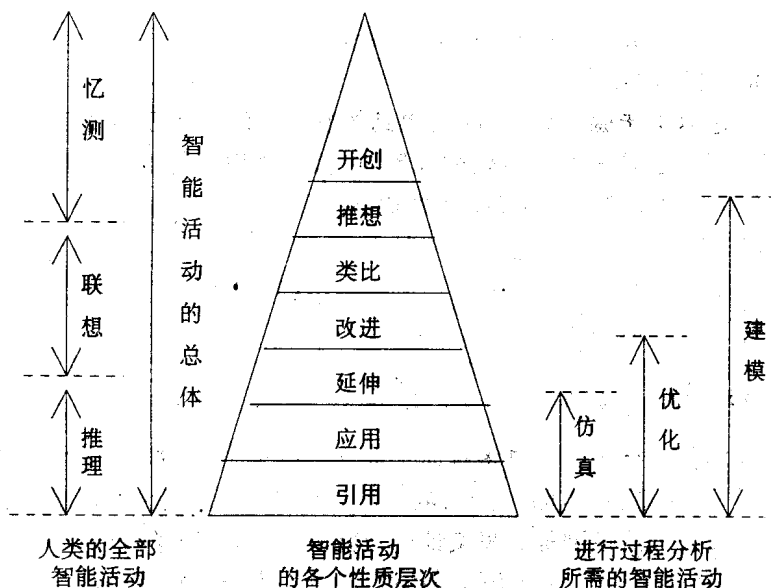


图 01-04 进行过程分析所需的智能活动性质层次

所从事的各层次智能活动作了总体描述。图中各层次智能活动的内容分别是：

(1) 引用。将已有规则直接使用于求解所研究的问题。