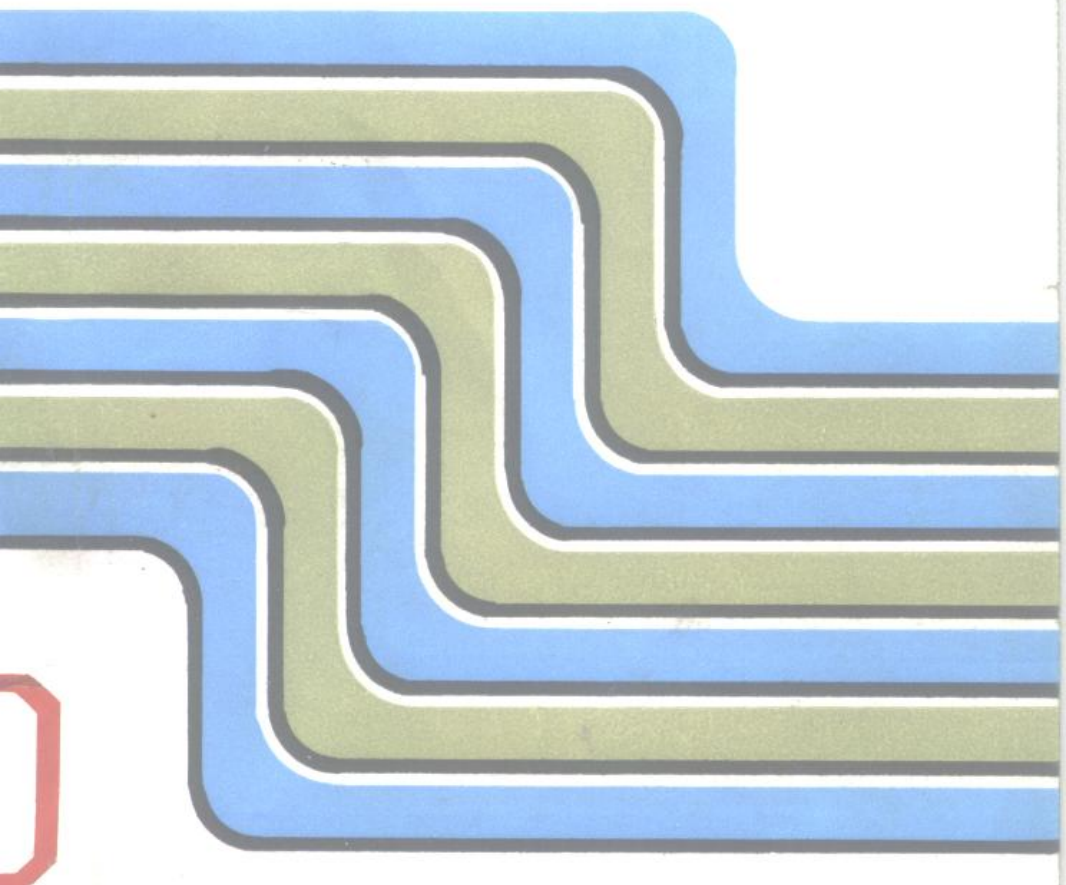


化工过程流程模拟

朱开宏等 编著



中国石化出版社

化工过程流程模拟

朱开宏等 编著

中国石化出版社

(京)新登字048号

D1138/17

内 容 提 要

本书从流程模拟的基本理论入手,详细论述了有关化工过程流程模拟的原理和方法。全书共分八章;第一章介绍流程模拟的概貌和基本方法;第二~四章介绍了一些流程模拟所必需的基本知识;第五~七章论述了流程模拟的三种方法,序贯模块法、联立方程法、联立模块法;第八章介绍了流程模拟系统的构成、开发和应用。

本书可作为石油化工、化工、石油等专业的科技人员、工程技术人员和大专院校师生的参考书。

化工过程流程模拟

朱开宏等 编著

中国石化出版社出版

(北京朝阳区太阳宫路甲1号 邮政编码:100029)

海丰印刷厂排版印刷

新华书店北京发行所发行

787×1092毫米 32开本 9¹/₄印张 212千字 印1—4000

1993年3月北京第1版 1993年3月北京第1次印刷

ISBN 7-80043-238-6/TQ.125 定价:6.00元

序 言

经过三十年的发展，化工过程流程模拟已成为化工过程分析和设计的常规手段和化工教育的一个重要组成部分。近年来，当今世界最有影响的几种通用化工流程模拟系统已先后被我国引进，有的还被多次引进，还有许多单位正在致力于开发具有自己特色的新系统。这种情况反映了我国化工界对流程模拟这一领域的浓厚兴趣和高度重视。在这种背景下，编写一本介绍化工流程模拟的基本知识和发展现状的书可能是合乎时宜的。

本书的内容仅对流程模拟展开，而不涉及化工过程数学模拟的另外两个重要领域：物性计算和单元设备的模拟计算。全书由三个基本部分组成。第一部分是第一章，介绍化工流程模拟的概貌和基本方法。第二部分是第二~四章，介绍一些对各种流程模拟方法都有用的基本知识。第二章讲述非线性代数方程组的迭代解法和加速迭代收敛的几种常用方法。第三章讲述如何为化工过程分析和设计提供物性支持。第四章介绍流程模拟中自由度分析的方法，以正确地规定需要求解的问题。第三部分是五~八章，这是本书的主要部分。其中，第五、六、七章分别介绍流程模拟的三种基本方法：序贯模块法、联立方程法和联立模块法。第八章则讲述流程模拟技术的发展水平的体现者——流程模拟系统的构成、开发方法和几个有代表性的通用流程模拟系统的特点，最后以一专用流程模拟系统结束全书。

上述框架覆盖了化工过程流程模拟这一领域的所有重要方面。为了适应不同层次的读者，在编写时注意了各章的相对独立性。对那些已了解某些章节所述内容的读者，对这些章节稍作浏览，甚至跳过这些章节直接阅读后续章节也不致感到难以理解。在材料的取舍上，我们希望既能为初次接触流程模拟的读者提供必要的基本知识，又能为对流程模拟已有所了解的读者提供一些新的发展动向。

本书第五章和第六章第四节由陈良恒编写，第六章第六节由程迎生编写，其余章节均由朱开宏编写。从拟订提纲到全书完稿已历三个寒暑，虽几经增删修改，但限于水平和精力，疏漏乃至错误恐仍难避免，望读者不吝赐教。

编 者

目 录

第一章 概论	1
第一节 化工过程流程模拟的内容	1
第二节 化工过程流程模拟的应用	4
第三节 化工过程流程模拟的基本问题	8
第四节 化工过程流程模拟发展简史	10
第五节 化工过程流程模拟的方法	14
第二章 化工流程模拟数学基础	21
第一节 迭代法的基本知识	21
第二节 非线性代数方程组的迭代解法	31
第三章 物性数据库	52
第一节 物性数据的基本知识	52
第二节 物性数据库的功能和结构	59
第四章 化工过程的自由度分析	74
第一节 自由度的基本概念	75
第二节 物流的自由度	82
第三节 单元设备的自由度	88
第四节 流程的自由度	96
第五章 序贯模块法	100
第一节 概述	100
第二节 有向图	103
第三节 信号流图	112
第四节 回路的切断和特征多项式	117

第五节	一次型图和非一次型图的最优切法	122
第六节	系统的分隔和排序	136
第七节	算例：轻烃贮槽冷却系统的计算	140
第六章	联立方程法	151
第一节	概述	151
第二节	流程方程组的发生	153
第三节	流程方程组的求解策略	158
第四节	方程组的分隔和排序	164
第五节	稀疏线性代数方程组的求解	179
第六节	公用工程系统的联立方程法模拟	186
第七章	联立模块法	205
第一节	概述	205
第二节	联立模块法的构成方法	208
第三节	流程方程组的线性化	212
第四节	控制模拟问题的分隔和切断	219
第五节	计算实例和算法性能	224
第六节	联立模块法和序贯模块法的比较	240
第八章	流程模拟系统	245
第一节	流程模拟系统的构成	246
第二节	通用流程模拟系统	251
第三节	专用流程模拟系统	264
结束语		294

第一章 概 论

化学工业是一种典型的过程工业。任何一个化工生产过程均由一系列按一定方式连接的设备组成，物料在规定的操作条件下在这些设备中进行预期的化学变化和物理变化，最终成为所需要的产品。

化工过程流程模拟就是借助电子计算机求解描述整个化工生产过程的数学模型，得到有关该化工过程性能的信息。经过三十年的发展，化工过程流程模拟已被化学工程师普遍接受和采用，成为化学工程师设计新装置和分析现有装置性能、改进现有装置操作的有力工具。

本章将就本领域的概貌作一介绍，包括：化工流程模拟的内容，化工流程模拟的应用，化工流程的系统特点，化工流程模拟的基本问题，化工流程模拟主要方法的简单介绍和本领域的发展简史。虽然，有些内容在后续章节中还要详加阐述，但先对本领域的概貌有所了解，对大多数读者，特别是初次接触这一领域的读者将不无裨益。

第一节 化工过程流程模拟的内容

随着电子计算机在化工过程设计和操作分析中的应用日益广泛，英语中出现了一个新的名词 Flowsheeting，汉语将它译为流程模拟，其含义为输入有关化工过程的流程水平上的信息，并进行有益于化工过程开发、设计和操作的分析^[1]。

流程水平上的信息包括：①对确定一流程足够详尽的所有单元设备的规定。这些规定可以是设备的结构和操作参数（如精馏塔的理论级数、反应器的体积），也可以是关于设备功能的要求（如分离过程中某些组分的回收率、反应器的转化率）；②有关流程拓扑的规定，即各单元设备之间的连接方式，包括所有物料流，能量流和其它相互作用（例如由控制系统执行的相互作用）；③流程所处理的物质的性质、包括热力学性质、传递性质和化学反应性质。

对化工过程开发、设计和操作有用的分析。目前已得到普遍应用的主要是流程的稳态模拟，内容包括：物料和能量衡算、设备尺寸和费用计算及过程的技术经济评价^{〔2〕}。

物料和能量衡算是利用上述有关流程的信息，确定所有中间物流和产品物流的组成、流率、温度、压力以及各单元设备的性能参数。

设备尺寸计算是根据物料和热量衡算的结果，再补充输入有关设备尺寸计算的数据，确定设备的结构和尺寸。设备尺寸计算的数据如热交换器的污垢系数，塔设备的允许气速等。

设备费用计算则根据设备尺寸计算的结果和有关费用的数据确定设备制造费和投资。费用数据包括费用计算关联式的系数和通货膨胀指数等。

经济评价则要对工程的利润率进行估计。除上述各项计算结果外，还要求输入有关工程数据，例如工程的期限、筹集资金的方式、假设的通货膨胀率、折旧方法和开工率分布（Production Rate Profile）。

上述各步骤的相互联系如图1.1所示。

除稳态模拟外，流程模拟还有其它形式。

1. 动态模拟

包括控制系统性能的研究，开停工控制，发生紧急情况时的操作策略，以及操作人员的培训。

2. 过程优化

包括全流程的优化和子系统水平的优化。

3. 过程合成

目前主要指一些常用子系统的合成，例如能量集成系统、分离序列的确定和控制器的设计。

4. 用能效率分析

以热力学第二定律为基础，并应用各种形式的热力学有效能和(或)损失功的概念，分析过程的能量利用情况。

5. 安全和可靠性分析

上述各项都是目前研究工作十分活跃的领域，并已取得一些具有实用价值的成果。可以预期，它们在流程模拟中的地位将变得日益重要。

本书的内容将限于稳态流程模拟，特别是全流程的物料衡算和能量衡算。关于设备尺寸的计算，对学过化工原理和化学反应工程的读者是不陌生的。关于费用计算和经济评价，有兴趣的读者可阅读其它专著，如雷斯尼克的《化工过程分析与设计》^{〔3〕}。

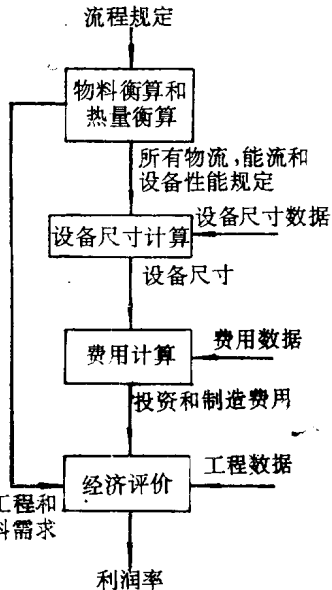


图 1.1 流程模拟的信息流

第二节 化工过程流程模拟的应用

化工过程开发系指将化学实验室的研究成果转化为社会生产力的整个过程，一般要经历小试、模试、中试、概念设计、基础设计、工程设计、基本建设、投产等步骤^[4]，这些步骤的相互关系如图1.2所示。

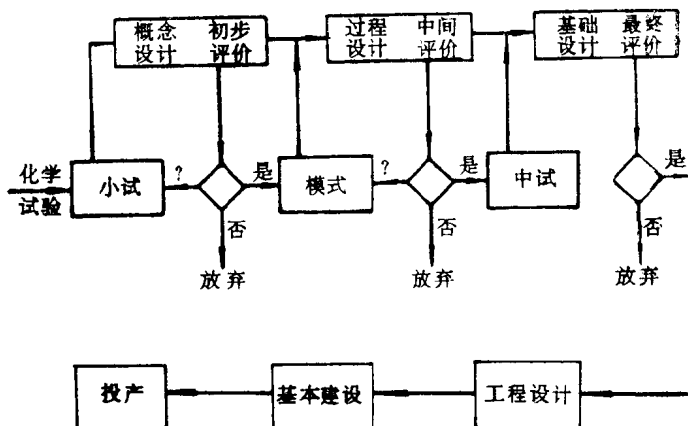


图 1.2 化工过程开发的程序

原则上讲，化工过程流程模拟可用于化工过程开发的各个阶段^[5]。

1. 小试和概念设计阶段

根据小试结果，应用只需要少量数据的简单模拟程序，对要建设的工业装置进行假想设计，即概念设计，并作初步的技术经济评价。

2. 模试、中试和基础设计阶段

根据概念设计的要求完成模试和（或）中试后，利用尽可能完善的模拟程序完成工业装置的基础设计，并对进程进

行最终评价。

3. 工程设计和建厂阶段

基础设计提供了工程设计所需要的一切技术诀窍，加上建厂条件即可进行工程设计。

4. 装置投产阶段

装置投产后往往会发现设计阶段的预想没有完全实现，或者由于原料和产品需求的变化需要对装置的操作条件进行调整，这时对已有装置的模拟将有助于找到提高产量、降低消耗的操作方案。

综上所述，化工过程流程模拟的应用包括新装置的设计和指导已有装置操作两大类。

虽然，在过程开发的不同阶段对设计有不同的深度要求，例如对一个吸收塔，在开发初期可能只需假定各组分的回收率来进行模拟，而在进行过程设计（中试装置设计）时已要求按平衡级模型来对它进行模拟，但是，液相焓和平衡常数都允许按理想情况计算。而到进行基础设计和工程设计时，就要求用严格的热力学模型来计算气、液相焓和平衡常数了。但是，不论化工过程开发的哪一阶段，化工过程设计作为化学工程师利用工程经验和研究成果寻找达到预定目标的最佳方案的一种创造性活动，都是由过程合成、过程分析和过程优化这三个基本步骤组成的⁽¹⁾。这些步骤的任务及相互关系如图1.3所示。

过程合成系根据预定的目标确定生产流程，即选择所用的单元设备及其连接方式，并为分析和优化提供所有决策变量的初值。化学工业中，生产一种产品往往可以采用不同的原料路线、反应途径和分离序列，存在多种可供比较的流程方案。七十年代以来，随着化工系统工程的发展，在化工流程

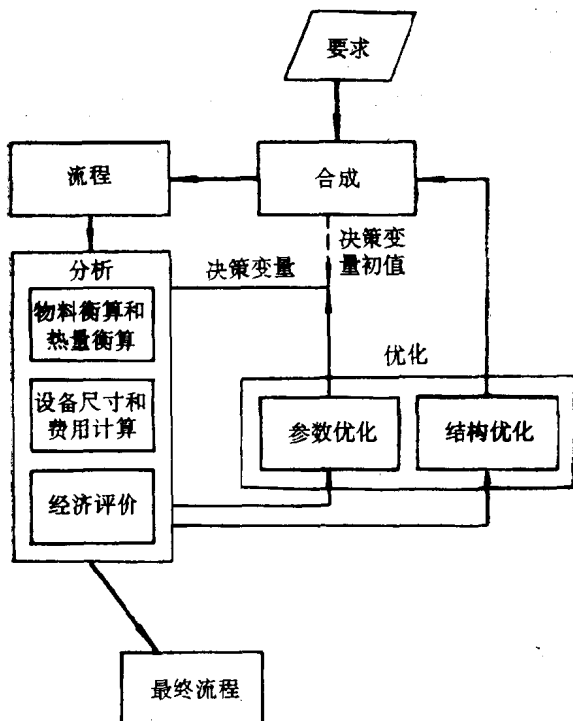


图 1.3 化工过程设计的基本步骤

合成方面已做了不少工作,提出了分解法、试探法、调优法、直接优化法等化工流程合成方法^[6~8]。但迄今这些方法的实际应用尚限于由单一设备(如换热器,精馏塔)组成的简单流程。就一般情况而言,流程的确定主要还是凭借设计者的经验。

过程分析则是在流程结构已确定的前提下,考察在不同操作条件下流程的技术经济性能。其主要内容在上节关于流程的稳态模拟中已作了说明,即物料衡算和热量衡算,计算设备尺寸和费用及流程的经济评价。

优化包括参数优化和结构优化。在对给定流程进行分析时，常会发现某一特定的压力或温度的取值会对设备的大小和流程的经济性产生显著的影响。在流程结构不变的前提下，通过改变压力、温度、原料配比等操作条件寻求改善流程性能的途径、称为参数优化。在对给定流程进行分析时，设计者有时还会发现目前的流程明显不合理，更换某些设备或它们的联接方式，可使流程的性能获得明显的改善。通过设备型式和联接方式的改变来改善流程的性能称为结构优化。

通过上述步骤最终得到包括设备型式、联接方式和所有决策变量值的流程图。

当将流程模拟作为一种设计工具时，理想的工作方式是能以预定的目标推算出流程的结构、操作条件和所有输入变量。但迄今大部分流程模拟程序都是以核算模式工作的，即根据流程系统的输入和各单元设备的设计参数计算出流程系统的输出。模拟程序中的信息流方向与流程图上的物流和能流方向相同。

工程师们通过核算型模拟程序的重复模拟来进行设计计算。重复模拟可以根据设定的条件对整个流程进行，也可应用一些控制块在流程内部的某些设备间进行，使这些设备的操作要求能达到预先规定的设计要求。如反应器的出口温度不高于某值，精馏塔的产品回收率不低于某值等。后一种重复模拟的方式实际上已介于核算型计算和设计型计算之间。

上述按核算模式来进行设计计算主要是就流程水平而言的，即是在流程结构已定的前提下进行模拟计算。就每一单元设备而言，既可规定其结构参数和操作条件（核算型），也可规定其应具备的功能（设计型）。在进行设计计算时，

采用后一种规定更普遍些。例如对流程中的某一换热器，不是规定换热面积，而是规定热负荷或换热器两端冷热流体的最小温差。在通过物料衡算和热量衡算求得了所有物流和能流的状态及各单元设备的性能后，再通过设备尺寸计算，确定各设备的结构参数。

在对已有生产装置进行流程模拟时，则是严格按核算模式工作，即不但流程结构是完全确定的，而且各单元设备的结构和操作条件也是完全确定的，然后根据流程系统的输入计算其输出。这时，当然就不需要由流程模拟程序进行设备尺寸计算了。

第三节 化工过程流程模拟的基本问题

为了说明化工过程流程模拟的基本问题，先对化工流程的系统特点作些分析。

化工流程作为一种系统，和所有系统一样具有嵌套性的特点，即一方面可把一个化工生产流程看成另一个更大的系统，如工厂的一部分，为该大系统的子系统；另一方面它又由若干更小的子系统所构成。例如，催化裂化装置是整个炼油厂的一个子系统，而催化裂化装置又由反应-再生、精馏、吸收稳定等子系统构成。

化工流程系统的结构从物料流的角度来看，可分成两类^[9]：（1）没有物料流循环的“树”结构系统（图1.4），这类流程的结构比较简单，在进行物料衡算和热量衡算时，可循各单元设备在流程中的排列次序进行计算；（2）带有物料流循环的循环结构系统（图1.5），这类流程的结构比较复杂，但对物料和能源的充分利用较为有利。这类流程在进行物料衡算和能量衡算时，必须先对某些物流的状态进行

假设，然后在计算过程中校核这些假设是否正确。例如，对图1.5所示的流程，在计算单元设备1时需知道由单元设备3循环的物料 s_{04} 的流率、组成、温度、压力等参数；而要计算单元设备3的输出流 s_{04} 又必须先计算单元设备1的输出流 s_{02} 作为单元设备2的输入流，再计算单元设备2的输出

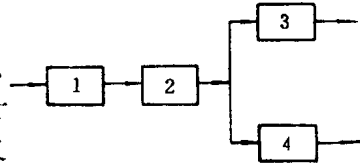


图 1.4 树结构流程
1~4为设备号

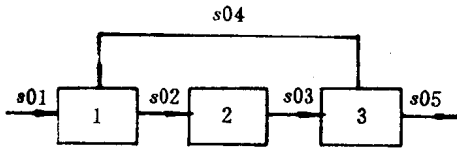


图 1.5 再循环结构流程

流 s_{03} 作为单元设备3的输入流。因此，为使计算得以进行，必须先设定某一物流，例如设备3返回设备1的循环物流 s_{04} 的各参数，然后再循序计算求得设备3输出物流的参数值，看设定值和计算值是否相等，若不相符则对循环流的各参数重新设定，这就是所谓的迭代过程。

更一般地说，化工流程系统可能兼具树结构和再循环结构的特点，即一个化工流程系统可分隔成若干个相互之间不存在循环物流的子系统，但在每一子系统内部则存在循环物流。图1.6所示的系统即为一个这样的例子。

该系统包括由单元1、2、3组成的子系统B和单元4、5、6组成的子系统A。在子系统A、B之间不存在循环物流，但在每个子系统内部则都有循环物流。要确定这类流程系统的计算顺序，一般要涉及以下四个步骤：

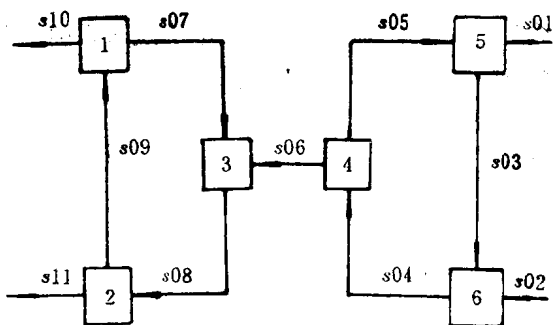


图 1.6 具有二个循环子系统的流程

- (1) 将整个流程系统分隔成若干个相互之间不存在循环物流的子系统；
- (2) 排定各子系统的计算顺序；
- (3) 对包含循环物流的子系统，确定哪些物流的参数是需要事先设定的（这些物流称为切流）；
- (4) 排定包含循环物流的各子系统内各单元的计算顺序。

概括地说，要进行化工过程的流程模拟，从计算策略的角度需要解决两个基本问题：一个是流程的分隔；另一个是包含循环物流的子系统的迭代。这也就是本书要讨论的主要问题。可以想见，二者相比，迭代将是一个更困难的任务。我们将先在本章的最后一节对化工流程模拟中的三种主要迭代方法：序贯模块法、联立方程法和联立模块法的基本思想作一概要的介绍。在第五、六、七章中还要对这些方法详加讨论。关于流程分隔的方法，则在第五章中讨论序贯模块法时进行介绍。

第四节 化工过程流程模拟发展简史

电子计算机进入化工领域是在五十年代初。最初使用的