

过程系统工程理论与实践丛书



过程系统稳态模拟技术

韩方煜 郑世清 荣本光 著

中国石化出版社

过程系统工程理论与实践丛书

过程系统稳态模拟技术

韩方煜 郑世清 荣本光 著

中国石化出版社

内 容 提 要

本书是《过程系统工程理论与实践丛书》之一。该丛书是普及型高科技系列读物,主要介绍过程系统工程这门新型学科,其应用领域包括化工、石油化工、冶金、轻工、建材等物流型工业。

本书着重论述了过程系统稳态模拟技术的基本原理和实际应用。其中简要介绍了过程系统模拟化和模拟的基本思想;化工过程常用单元操作的模拟化及各类模拟算法;并从全流程系统模拟的角度介绍了过程系统的模拟技术和方法。在模拟计算中,特别介绍了一般化工过程中所采用的多级压缩制冷系统、蒸汽动力系统及换热网络系统等专有系统的模拟计算。另外,还通过实例详细介绍了序贯模块法和联立模块法模拟复杂化工过程系统的具体方法和步骤。最后介绍了几种国外常用流程模拟系统软件,可供参考。

本丛书各分册都具有普及性、实用性和可操作的特点。适用于过程工业的技术人员、管理人员以及大、中专学校师生阅读。

图书在版编目(CIP)数据

过程系统稳态模拟技术/韩方煜等著 - 北京:
中国石化出版社, 1999
(过程系统工程理论与实践丛书/成思危主编)
ISBN 7-80043-793-0

I. 过… II. 韩… III. 过程系统-稳态-模拟-技
术 IV. N94

中国版本图书馆 CIP 数据核字(1999)第 12930 号

中国石化出版社出版发行

地址:北京市东城区安定门外大街 58 号

邮编:100011 电话:(010)84271850

海丰印刷厂排版印刷

新华书店北京发行所经销

*

787×1092 毫米 32 开本 9.25 印张 221 千字印 1—2000

1999 年 12 月第 1 版 1999 年 12 月第 1 次印刷

定价:15.00 元

序

过程系统工程是在系统工程、化学工程、过程控制、计算数学、信息技术、计算机技术等学科的边缘上产生的一门综合性学科。它以处理物料—能量—信息流的过程系统为研究对象，其核心功能是过程系统的组织、计划、协调、控制和管理。它广泛地用于化学、冶金、建材、食品等过程工业中，目的是在总体上达到技术上及经济上的最优化。

过程系统工程大约是在 60 年代开始形成一门独立学科的，此后得到了迅速的发展，在各种期刊杂志上及三年一度的过程系统工程国际会议上发表了大量的文章，其中一些关键技术，如过程模拟、过程分析、过程综合、过程预测、过程评价、过程可靠性分析等日益成熟，应用领域也不断扩展，已经成为过程工业发展中不可缺少的一门高新技术。

二十多年来，我国学者及工程技术人员在努力学习国外先进技术的基础上，在实践中积累了不少经验，在技术上也有一些进展。但由于彼此之间缺乏联系及交流，在过程系统工程方面尚未能形成一支强大的人才队伍，有不少好的成果得不到应有的推广。有鉴于此，我国著名的系统工程专家钱学森教授在 1988 年 12 月 23 日给我的来信中，倡议成立一个全国性的学术团体。他在信中指出：“我想中国系统工程学会似尚缺少一个专门搞生产流程的委员会，而生产流程的系统工程对化学工业特别重要。您如同意，您可作为发起人向学会的秘书长或副秘书长建议成立这个委员会。”

在钱老的大力推动下，中国系统工程学会过程系统工程专业委员会于 1991 年宣告成立。在成立大会上，不少代表建

议要大力普及过程系统工程的基本知识。因此在第一次理事会上便决定要编辑出版一套《过程系统工程理论与实践丛书》，并为此组成了编辑委员会，确定了丛书的选题及作者。在中国石化出版社的大力支持下，这套丛书得以顺利地出版。在此我仅代表中国系统工程学会过程系统工程专业委员会向各位编委、各位作者、以及中国石化出版社的有关人员表示深切的感谢。

这套丛书共分 10 册，基本上覆盖了过程系统工程的主要领域。出版这套丛书的目的是宣传并普及过程系统工程的基本知识，以引起读者进一步学习的兴趣。其读者对象是过程工业领域内大专以上文化程度的中青年工程技术人员。我们希望这套丛书能达到以下三点基本要求：

1. **系统性：**框架完整，逻辑清晰，每部书相对独立，深度相近，彼此之间有联系而不重复。

2. **科普性：**深入浅出，定性叙述与定量分析相结合，尽量避免复杂的数学推导。

3. **实用性：**理论与实践相结合，有一定数量的实例及应用软件介绍。

由于这套丛书是我们在过程系统工程领域内编写高级科普读物的第一次尝试，是否真正达到了上述要求，还有待读者的检验。我们热诚地希望读者能将对本书的宝贵意见通过中国石化出版社告诉我们，以便再版时加以改进。

中国系统工程学会过程系统工程
专业委员会主任委员

成思危

前 言

从本世纪 40 年代以来系统工程学获得了巨大的发展，它的出现改变了世界科学的图景和当代科学家的思维方式。60 年代以来，系统工程的思想被引入工程学领域，逐渐产生了过程系统工程这个新的边缘学科，产生了关于过程研究开发和设计的新方法，促进了过程工业的巨大进步。

过程系统工程一般认为由过程系统模拟分析、过程系统综合和最优化等主要内容组成。而过程系统的模型化和模拟是上述三个主要内容的基础，本书就是针对这个问题进行论述。我们力求用浅显易懂的语言来说明，以使具有中专以上文化程度的人，都能看懂全书。本书不仅仅是一本过程系统模拟的入门书，也是从事过程系统工程研究开发和设计的工程技术人员阅读的一本很好的参考书，可以从中获取关于过程模拟的思想、模拟系统软件构成、研制和使用的必要知识，从而为用系统思想处理问题建立良好基础。

一些较专门的同类书籍往往把大量的数学符号呈现给读者，殊不知繁琐的公式背后却是简单的道理。本书是先把简单的道理介绍给读者，然后辅以简明的公式。以此出发，读者自会举一反三去读懂那些令人眼花缭乱的复杂公式甚至计算机程序。过程系统模拟技术已给过程工业带来了巨大的效益和进步，在电子计算机普及的今天，希望本书也能帮助读者的事业飞跃前进。

随着理论研究及软件开发工作的深入，过程系统工程的

研究正向一体化和集成化的方向发展。与过程系统工程研究的各个阶段、各个层面有关的方法和技术等都在进行交叉和集成，进而提出和开发了辅助过程系统整个生命周期的集成系统和智能工程系统。以模型化理论为基础的过程系统模拟技术，必将成为这类集成系统和智能工程系统的核心。过程系统的设计、操作和管理等工作都将依赖于各类模型系统。我们相信，过程系统的定量建模，以及人类对过程系统思维及运作的定性建模技术的发展仍将成为 21 世纪的热门研究领域。

目 录

前言

第一章 导论	1
参考文献	13
第二章 过程单元的模型化与模拟	15
第一节 建立模型的基本方法	16
一、物料衡算	16
二、能量衡算	17
三、相平衡	19
四、化学反应方程	20
第二节 物料的加合与分割	22
一、加合器	23
二、物流分割器	24
第三节 改变压力的过程单元	25
一、液体输送泵	25
二、气体压缩机	26
三、膨胀机	28
第四节 改变温度的过程单元	29
一、物流混合器	29
二、换热器	30
第五节 单级分离	31
一、等温等压闪蒸	32
二、等焓节流过程	34

三、等熵液化过程	35
四、等冷凝率闪蒸	35
五、其他单级分离过程	35
第六节 多级分离	39
一、多级分离模型	40
二、模拟方法简要说明	42
三、模型化与模拟方法简评	48
第七节 化学反应器	49
一、原子矩阵、反应矩阵与独立化学反应	50
二、黑箱法模型	52
三、热力学方法模拟反应器	54
四、动力学方法模拟反应器	58
参考文献	61
第三章 过程系统的模拟分析	62
第一节 过程系统结构的模型	62
一、信息流图	62
二、过程系统结构的模型化	64
第二节 过程系统的分隔	69
一、模块相邻矩阵的分隔	70
二、索引矩阵的分隔	72
第三节 环路的断裂	72
一、环路矩阵法	74
二、输入输出流列表法	76
第四节 系统模拟的信号流图法	77
一、线性模型与信号流图	78
二、信号流图的简化	83
三、应用信号流图法作系统模拟	86

第五节 系统模拟的序贯模块法	91
一、基本概念	91
二、物流与能流的处理	92
三、控制模块	96
四、收敛模块	98
五、序贯模块法的模拟过程	101
第六节 系统模拟的联立方程法	101
一、联立方程法方程的获取	102
二、联立方程法的解算策略	102
三、方程组的关联分析	103
四、分块方程组求解的牛顿-拉甫逊法	105
五、分块方程组求解的拟牛顿法	108
第七节 系统模拟的其他方法	109
一、联立模块法	109
二、数据驱动法	110
三、人工智能参与法	111
第八节 过程系统的分析	112
一、热经济分析	112
二、有效能分析	114
三、经济评价分析	119
参考文献	125
第四章 几种公用工程系统的模拟	126
第一节 压缩制冷系统的模拟	126
一、多级制冷的分类和计算	127
二、多级制冷通用算法	138
第二节 蒸汽动力系统的模拟	147
一、卡诺循环与朗肯循环	148

二、实际朗肯循环·····	151
三、化工中的蒸汽动力过程及合成原则·····	155
四、蒸汽动力过程的计算·····	158
五、动力过程程序·····	162
第三节 换热网络·····	166
一、单个换热器的数学模型·····	167
二、单个换热器的计算·····	170
三、网络结构的信息表示·····	174
四、换热网络的模拟计算·····	182
五、换热网络的合成·····	186
参考文献·····	186
第五章 过程装置系统模拟实例·····	188
第一节 水溶液全循环法制尿素装置·····	188
一、流程叙述·····	189
二、物性计算·····	192
三、过程单元的模型化·····	194
四、系统模拟分析·····	204
第二节 氧氯化法生产氯乙烯装置·····	215
一、流程叙述·····	216
二、物性计算·····	219
三、模型化和模拟·····	224
四、过程系统的模拟分析·····	227
参考文献·····	245
第六章 流程模拟系统软件·····	246
第一节 基础物性数据库·····	249
一、数据源·····	250
二、管理系统·····	251

三、数据使用.....	253
第二节 国外几个模拟软件介绍.....	257
一、ASPEN-PLUS	258
二、PRO/II	261
三、HYSIM	263
第三节 ECSS 工程化学模拟系统	264
一、ECSS 的设计思想	265
二、系统结构及功能.....	265
三、ECSS 的性能特点及应用	276
第四节 流程模拟系统技术展望.....	277
一、系统模拟的解算策略.....	277
二、过程系统的优化.....	278
三、集成过程模拟系统的开发.....	280
四、人工智能流程模拟系统.....	282
参考文献.....	283

第一章 导 论

1. 过程工业及其技术进步

过程工业是指原料经过一系列以改变其物理化学性质为目的的加工，获得具有特定物理化学性质产品的工业。例如，乙烯工业。它以轻柴油为原料，经过裂解反应、急冷脱油、压缩去水、裂解气分离、乙烯精制等一系列的加工工序，获得具有特定质量指标的产品乙烯。过程工业是同以获取特定几何形状和机械性能的产品为目的的制造加工工业不同的另一类工业。过程工业涉及的范围相当广泛，如石油炼制、化工、冶金、食品……等等，在国民经济中占居十分重要的地位。

虽然古代人类就做着用物理化学方法加工物料获取产品的事情，如制酒，但是真正成为工业规模生产只是一百多年前的事。那时人们还是粗浅地掌握制造不同产品工艺的专门知识。直至本世纪 20 年代人们才认识到不同的过程工艺有着共同的基本单元，抽象出“单元操作”的概念，从而产生了化学工程学。化学工程学研究一系列十分重要的单元操作，如流体输送、换热、精馏、吸收、液液萃取、浸取、吸附……等等，这时的过程研究开发以因次分析和相似论为特色，促进了过程工业的较大发展。50 年代，人们从单元操作中归纳出共同的规律，提出了“传递”即动量传递、传热、传质的概念，这是人类认识的又一次飞跃。于是过程研究开发方法开始以数学模拟为主，促进了过程工业量和质的

巨大进步。

40年代产生的系统工程思想，不断地被过程工程专家所接受，他们不满足于以单元过程为对象进行研究，开始研究由大量单元过程组成的过程系统的性质（或性能）。电子计算机和计算数学的迅速发展，使过程工程专家的愿望得以实现。60年代初便产生了过程系统工程学，这是人类认识的又一次飞跃。过程系统模拟分析、综合、优化等技术成为过程工程专家的主要方法。工程技术人员从事过程研究开发的能力也是以前无法比拟的，其工作效率发生了几百倍的增加。

2. 现代过程工业

进入60年代以来，过程工业发展迅速。生产技术不断更新，新品种、新工艺不断出现。材料工业部门不断提供新性能的结构材料和功能材料，装备工业部门不断提供新的技术装置（包括新的设备、仪器、仪表、控制机和计算机）。现代过程工业采用新的过程研究开发和设计思想、方法及手段，使之从原料、加工到产品都产生了巨大的变化。特点如下：

（1）原料和能量消耗大幅度下降。例如，由轻烃裂解制乙烯装置，由于采用新的合金材料制造裂解炉管提高了裂解温度，从而提高了乙烯收率，降低了原料消耗；由于采用低压脱甲烷和膨胀机技术使能耗大幅度下降。又如由丙烯和合成气制取丁辛醇装置，由于低压法的开发成功使原料丙烯耗量下降22%、合成气耗量下降45%，从而使成本下降22%。由原油分馏制取汽油和柴油装置，由于采用先进的换热网络技术使能耗下降1倍多。

（2）新的生产方法不断开发成功。低压法生产高密度聚

乙烯装置，比传统法省电 2/3，占地只有原来的 1/10。离子膜电解制烧碱装置，其产品质量接近水银法而消除了污染，在医药和农药产品的生产中更是新方法层出不穷。

(3) 装置向经济规模发展，基本化工原料的生产向大型化发展。由于科学技术的发展使大型化生产成为可能，大型化投资相对节省而能量利用更合理，三废便于处理，具有更强的竞争力。例如乙烯装置的生产能力，已由 1958 年的 $1.8 \times 10^4 \text{ t/a}$ 发展到目前的 $70 \times 10^4 \text{ t/a}$ 。高压聚乙烯装置的生产能力已由 60 年代初的不足 $1 \times 10^4 \text{ t/a}$ 发展到目前的 $20 \times 10^4 \text{ t/a}$ 。合成氨的生产能力已由 50 年代的每系列不足 $1 \times 10^4 \text{ t/a}$ 发展到目前的 $30 \times 10^4 \text{ t/a}$ 。

(4) 产品质量不断提高。由于工业的新要求、法规的新标准和激烈的市场竞争，使过程工业的产品质量不断提高。合成酒精的含醛及杂醇量降到饮用级的水平。聚氯乙烯制品中氯乙烯含量降到 1×10^{-6} ，以防致癌。

(5) 过程的控制水平越来越高，计算机控制被普遍采用。由 50 年代初的手工控制发展到 60 年代初的简单回路气动仪表控制，70 年代的复杂回路的电动仪表控制，80 年代中的集散控制系统，90 年代初的集成控制系统。使计划调度、模拟优化、统计管理和过程控制联成一体，产生了以前不可想象的市场效益。

3. 过程系统

“系统”已是人们经常使用的词，按照系统工程的定义：系统是具有相互作用、制约、依存关系的组元构成的统一体。这是一个很具普遍性的定义，那么具体到过程系统又如何定义呢？它又有些什么特性呢？

我们先看一个例子。图 1-1 是以硝基苯和氢气为原料

制取苯胺的流程。硝基苯汽化后与氢气混合，经过加热进入反应器进行加氢反应。反应产物经冷却进入分层器分层；轻相进回收塔，塔底排出废水，塔顶得回收液并排出少量废气；重相经脱水后，进入精馏塔；精馏塔顶获目的产物苯胺。这是一个典型的过程系统。这个系统由若干个加工步骤组成，这些加工步骤或者进行物质和能量的传输，或者进行物质和能量的转换，我们称之为过程单元。过程单元也简称为单元，它的功能是把进入的物质流和能量流加工成为出去的物质流和能量流，也可抽象为把进入的信息流变换成出去的信息流，如图 1-2 所示。为达到生产目的，单元之间必须按照一定的逻辑关系联结其进出物质流和能量流（或说信息流），这些关系的整体称为过程系统的结构。这样我们可以给过程系统下个定义：为实现某种对物质和能量转换目的，而由过程单元按一定结构关系构成的统一体称作过程系统。过程系统有如下一些性质：

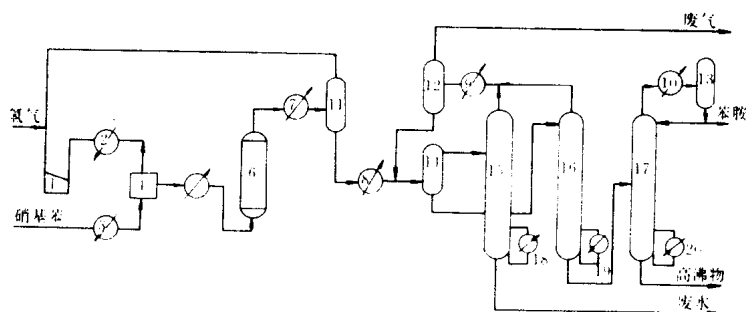


图 1-1 硝基苯加氢制苯胺流程系统

- 1—压缩机；2、3—加热器；4—混合器；6—反应器；
7、8、9、10—冷却冷凝器；11、12、13—分离罐；14—分层器；
15—回收塔；16—脱水塔；17—精馏塔；18、19、20—再沸器

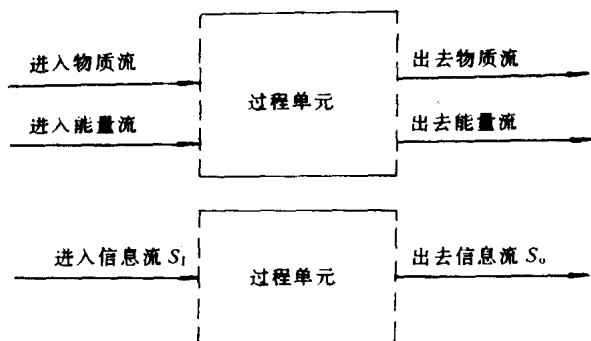


图 1-2 过程单元

①过程系统的功能在于实现特定目的物质和能量的转换；

②过程单元是用于进行物质和能量传输和转换的基本加工步骤；

③各过程单元按一定逻辑关系联结其进出物质流和能量流；

④为研究分析方便可把过程系统分解成子系统，子系统可完成某种特定加工目的；

⑤子系统还可分解成小的子系统，即系统具有嵌套性。

过程系统工程的目的就是研究要达到某种物质和能量加工目的应采用的过程单元及由什么样的系统结构建立过程系统，这称为系统综合；或是研究特定过程单元和系统结构的过程系统所具有的加工性质，这称为系统分析；或是研究过程系统的最优化以及其他有关课题。而模型化就和模拟是进行上述研究的基础。

4. 模型化

为了达到某种加工目的，人们必须测量、建立和控制各