

石油化工生产过程最优化

北京化工学院 魏寿彭 著

炼油设计编辑部

前 言

自1979年起，作者先后为北京化工学院化学工程系、高分子系的本科生以及化学工程系、管理工程系、仪表自动化系、计算机系的研究生讲授《化工系统工程》课。由於该课程广泛涉及了诸如系统工程、应用数学、计算机算法语言与计算方法等新学科在化学工程领域中的应用，所以，作者在授课过程中曾搜集了大量英、俄、日文有关文献和参考资料，並將其中具有较大参考价值的部分编入授课讲义中。

在此期间，作者还应化工部炼化司、石油部炼化司、中国石油化工总公司生产部及其所属企业以及北京市化工局、上海市化工局等单位的邀请，先后在北京、天津、上海、大庆等10余个城市为化工、石油化工界的广大工程技术人员和领导干部举办了20多期培训班，讲授了《化工系统工程》、《化工应用数学》、《计算机在化工中的应用》等课程。与此同时，作者及其助手、研究生们与中石化总公司所属企业中的工程技术人员合作，共同进行了炼厂换热网络的节能改造和石油化工生产装置的离线调优工作，取得了明显的经济效益。为配合上述教学和科研工作，作者曾在《炼油设计》、《石油炼制》、《化工技术》、《化工进展》、《现代化工》和《北京化工学院学报》上发表了一系列普及性文章，供有关工程技术人员阅读和参考。

由於“化工系统工程”这一新兴学科近年来发展很快，

特别是石油化工生产过程最优化的理论与方法已在生产实践中发挥了重要作用,引起了化工、石油化工界广大工程技术人员极大兴趣。因此,应《炼油设计》编辑部的要求,作者决定在原有工作的基础上,经过认真筛选、补充和修改,以“石油化工生产过程最优化”为题编写了这本书。

本书的目的在於帮助具有大专文化水平的化工、石油化工界工程技术人员,在自学或参加短期培训班的基础上,较快地掌握石油化工生产过程最优化的基本原理与方法。为了使初学者能够尽快掌握计算机应用软件,本书的全部程序均用BASIC语言给出,且全部在SHARP PC-1500袖珍计算机上通过。初学者只要初步掌握BASIC语言和PC-1500机的使用方法,就可按照书中介绍的实例,快速掌握一些实用价值较高的计算方法与程序,为独立开展石油化工生产过程最优化的研究工作打下初步基础。

鉴于作者的水平和能力有限,书中的错误和不妥之处在所难免,敬请广大读者批评指正。

魏寿彭1988年2月於北京

目 录

前 言

第一讲 化工系统工程与石油化工生产过程最优化

.....	(1)
1.1 序.....	(1)
1.2 系统.....	(2)
1.3 化工系统及其特性.....	(3)
1.4 系统工程的形成与发展.....	(5)
1.5 化工系统工程.....	(7)
1.6 化工生产过程的优化模型.....	(11)
1.7 化工生产过程的优化设计.....	(12)
1.8 化工过程优化设计实例.....	(13)
第二讲 石油化工生产过程的数学模型.....	(25)
2.1 序.....	(25)
2.2 石油化工过程数学模型的分类.....	(28)
2.3 机理模型实例.....	(36)
2.3.1 温度效率模型.....	(36)
2.3.2 双曲线型反应动力学模型.....	(39)
2.3.3 多级理想混合流动模型.....	(42)
2.4 回归分析与经验模型的建立.....	(45)
2.4.1 序.....	(45)
2.4.2 一元线性回归.....	(46)

2.4.3	一元非线性问题的线性化处理	(51)
2.4.4	一元非线性回归	(67)
2.4.5	多元线性回归	(74)
2.4.6	多元非线性问题的线性化处理	(87)
第三讲	石油化工数据的插值与平滑	(117)
3.1	序	(117)
3.2	拉格朗日插值	(117)
3.3	一元三点插值	(122)
3.4	三次样条函数插值	(125)
3.5	五点三次平滑三次样条函数插值	(128)
3.6	二元三点插值	(131)
第四讲	石油化工生产过程的数学模拟	(138)
4.1	序	(138)
4.2	装置能耗标定方法与程序	(139)
4.3	工艺加热炉标定方法与程序	(143)
4.4	冷换设备的快速模拟计算	(150)
4.5	空分装置的物料衡算	(164)
4.6	平衡汽化率的计算	(174)
4.7	多组分分馏塔的简捷计算	(179)
4.8	简单化学反应过程的数学模拟	(187)
4.9	化工流程模拟系统	(201)
第五讲	石油化工生产过程优化	(206)
5.1	序	(206)
5.2	圆柱形贮槽的优化设计	(208)
5.3	单台冷却器的优化设计	(209)
5.4	单台热交换器的最佳换热面积	(223)

5.5	换热序列的优化设计·····	(230)
第六讲	石油化工生产装置的离线调优·····	(260)
6.1	序·····	(260)
6.2	对二甲苯、对甲基苯甲酸甲酯合并氧化装置的生产调优·····	(263)
6.3	环己醇、环己酮硝酸氧化装置的生产调优·····	(282)

第一讲 化工系统工程与石油化 工生产过程最优化

1.1 序

近年来随着现代科学技术的发展,特别是电子计算机硬件、软件的飞速发展,电子计算机特别是微机的可靠性明显提高,运算速度不断加快,存储容量有所增加,价格大幅度下降,这就为电子计算机特别是微机在化工、石油化工领域中的广泛应用创造了条件。另一方面,随着化学工业特别是石油化学工业在我国的飞速发展,迫切需要将电子计算机包括微机甚至是袖珍式可编程序计算器用于化工、石油化工生产过程的工程计算、过程设计、生产调优、过程控制、企业管理等各个方面,以适应现代化大生产的需要。正因为如此,以化工、石油化工生产过程为对象,以现代化学工程、化工应用数学和计算机科学为理论依据,以电子计算机为工具,以实现化工、石油化工生产过程的优化设计、优化操作与控制 and 优化管理为目的的化工系统工程有了很大发展,并且在化工、石油化工领域中得到了广泛应用,取得了明显的经济效益。

例如,中国石油化工总公司所属企业应用线性规划方法进行炼油、化工、化纤、化肥生产的优化排产,每年可获得的经济效益约为2亿元,上海石油化工总厂应用电子计算机进行生产计划、调度、财务、物资、设备、动力、产品质量和

能源管理后，每年可获得的经济效益为500万元。

又如，应用化工系统工程中的系统模拟与优化方法进行常减压蒸馏装置的节能改造，每套常减压蒸馏装置每年可平均节油8000吨。将电子计算机用于常减压蒸馏装置的工艺参数巡回检测、开环指导和加热炉闭环控制，每套装置每年可获得的经济效益约在200万元以上。

再如，应用多因子模式识别法进行顺丁橡胶生产过程调优，每年可获得的经济效益为102万元；应用数理统计方法进行环氧乙烷装置生产调优，每年可获得的经济效益为202万元；采用装置模拟与优化法进行对二甲苯、对甲基苯甲酸甲酯合并氧化过程的生产调优，每年可获得的经济效益为318万元。

本书的目的就是通过具体实例向读者介绍如何应用化工系统工程的基本原理与方法，实现石油化工生产过程的最优化。

1.2 系统

系统是由相互联系相互作用的若干组成部分结合成的具有特定功能的总机体。这个定义告诉我们：

第一，系统是很大的，是由许多组成部分结合成的。我们把系统的每个组成部分称作子系统，因此，系统是由子系统组成的。由于系统很大，所以，我们通常采用分解的办法研究它。

第二，系统是很复杂的。就是说构成系统的子系统之间的关系是错综复杂的。由于系统很复杂，所以，我们必须协

子系统之间的相互关系，才能使系统处于最优状态。

第三，系统是有目的性的。就是说人们为了实现某种特定的目标才将子系统组成系统的。通常，我们可根据优化判断来确定系统的目标函数，并根据目标函数必须满足的条件求取其最优解。

此外，系统是相对于环境而存在，因此，系统必须对环境具有一定的适应性。

1.3 化工系统及

化工系统、石油化工系统是系统中的一个特定的系统，它可以是一个现代化的大型化工、石油化工企业，也可以是一个生产厂、生产车间、生产工段或生产岗位。

例如，我们可以把燕山石油化工公司视为一个系统，那么，这个系统是由东方红炼油厂、前进化工厂、向阳化工厂、胜利化工厂、长征化工厂、曙光化工厂……等子系统组成的。显然，这个系统是很大的，这个系统的子系统之间的相互关系是错综复杂的。例如，东方红炼油厂的轻柴油是前进化工厂的裂解原料，原料组成的变化将直接影响前进化工厂乙烯的收率和烯烃、芳烃的比例，直接影响前进化后续工厂的生产状况和效益。

我们也可以把东方红炼油厂视为一个系统，那么，这个系统是由常减压蒸馏装置、催化裂化装置、铂重整装置、丙烷脱沥青装置、酮苯脱蜡装置、糠醛精制装置……等子系统组成的。显然，这个系统也是很大的，我们只有协调好子系统之间的相互关系才能为国家提供出更多更好的燃料油、润

滑油和化工原料。

我们还可以把常减压蒸馏装置视为一个系统，那么这个系统是由加热炉、分离塔序列、换热网络和机泵等子系统所组成的。同样，我们若把加热炉视为系统，那么，常压炉和减压炉即可视为其子系统；若把分离塔序列视为系统，那么，初馏塔、常压塔和减压塔即可视为其子系统；若把换热网络视为系统，那么，热交换器、空冷器、水冷器即可视为其子系统；若把泵房视为系统，那么，每一台机或泵均可视为子系统。

不难看出，化工、石油化工系统具有层次结构，即系统具有嵌套性。可以将化工、石油化工系统逐级分解，直至将其分解成单元设备，以便更好地研究系统的特性。

做为系统中的一个特定的系统，化工、石油化工系统的特性是什么呢？

首先，它是一个生产系统，是一个由人、财、物、设备组成的生产系统。为了使这一系统处于最佳运行状态，必须有一种科学的管理方法，这一方法就是系统工程。

其次，它是一个物理化学系统，是一个将原料经过化学变化转化成粗产品，再经过分离、提纯，最终得到目的产品的物理化学系统。只有掌握这一物理的变化的规律，才能提高目的产物的产量和质量，降低原材料的消耗和生产过程中的能耗。

再次，它是一个接受、存储、加工、传递信息的管理系统，是一个由控制对象和控制者共同组成的过程控制系统。只有应用现代系统论、信息论和控制论的方法，以电子计算机为工具，才能有效地实现对过程的控制。

最后，作为国民经济宏观系统中的一个基元，它还是一个经济系统。它必须按照国家的有关政策和法令、按照客观经济规律办事，才能在开放、改革、搞活中充分发挥经济系统的功能，实现优化排产、优化经营，以便创造更多的产值和利税，为四化建设多做贡献。

1.4 系统工程的形成与发展

自从产生了系统概念，同时也就产生了系统思想，即系统整体最优化的思想。尽管定性的系统思想早已存在，但是，要使系统思想定量化却并非易事。为此，必须解决系统的定量化方法与定化工具问题。显然，这是系统思想由定性发展成定量，並发展形成成为系统工程所必须解决的问题。

历史上工程系统的形成和发展大体上经历了三个阶段：

第一阶段为萌芽阶段，其代表性事例是1911年泰勒发表的《科学管理原理》一书和成立的“工业管理科学促进会”。泰勒运用自然科学的方法对工人的劳动进行了时间研究、操作研究、作业顺序研究以及定额研究，建立了一套以工时定额为中心的泰勒制，从而使管理逐步成为一种科学。

第二阶段为形成阶段。这一阶段的重要事例有：

〈1〉1940年美国贝尔电话公司首次使用了系统工程这一词汇。其后，他们按时间顺序把系统分为规划、研究、发展、工程应用和通用工程五个阶段进行研究取得了成功，並获得了诺贝尔奖金。

〈2〉第二次世界大战后期，英国为了对付德国的空袭

成立了一个由物理学家、数学家、生物学家、工程师和军官组成的军事行动研究小组，即运筹学小组。该小组研究了一系列有关防空袭、反潜艇、物资调配和新武器研制等问题。提出了一系列量化研究系统整体最优化问题的方法，如规划论、排队论、搜索论、对策论等等。他们的研究作为系统工程的形成奠定了理论基础。

〈3〉制造原子弹的曼哈顿计划。在美国加利福尼亚理工学院理论物理学教授奥本海默的领导下，调动了2.5万名科技人员、12万生产人员，耗资100万美元，用了3.5年的时间生产出了原子弹。显然，这是一项用系统工程方法进行论证、协调，实现计划多方案优选并最终取得成功的事例。

〈4〉1945年美国成立了兰德公司，即研究与开发公司。这是一个由科学家组成的智囊团，他们将数学方法与工程技术方法相结合，创造了“系统分析法”，即系统工程。

〈5〉战后，由于电子计算机的出现，为量化地研究系统整体最优提供了计算工具，解决了量化的工具问题，所以，系统工程形成了一门独立学科，并得到了迅猛的发展。

第三阶段为发展阶段。

首先，美国密执安大学的哥德和麦克霍尔合著的《系统工程》一书出版。这是第一本从理论上对系统工程进行阐述的著作，出版于1957年。

其次，美国于1965年出版了《系统工程手册》，书中对系统工程的基本原理与方法做了较为详尽的论述，这标志着系统工程的理论已日臻成熟。

最后，1969年7月20日美国阿波罗-11号飞行器登上了月

球。阿波罗计划动员了美国42万人，120所大学和研究院以及2万多个企业参加，历时12年，耗资300亿美元，使用了600台电子计算机。这是系统工程的一个辉煌成功事例。

综上所述可以看出：系统工程是一种组织管理的技术，是组织管理系统的规划、研究、设计、制造、试验和使用的科学方法，是一种对所有系统都具有普遍意义的科学方法。

系统工程所要解决的问题是：如何使系统在规划、研究、设计、制造、试验和使用阶段都能够实现最优。

科学技术发展到了今天，作为“工程的工程、技术的技术”的系统工程已经被各行各业的广大工程技术人员所采用，取得了越来越多的应用成果。系统工程已经成为改造大自然、促进社会进步、提高社会劳动生产率的一种强有力的工具和方法。

1.5 化工系统工程

化工系统工程是以复杂化工系统最优化为核心的一门新兴的正在发展中的化工应用学科。它应用化学工程与系统工程的基本原理，采用模型化与模拟、分析与综合以及最优化方法，以电子计算机为工具，在对化工过程进行工艺与经济计算的基础上，进行化工过程的技术经济评价，最终实现化工过程优化设计、优化操作与控制 and 优化管理之目的。

化工系统工程的理论基础是化学工程与系统工程。

作为化工系统工程理论基础之一的化学工程至少应包含下列内容：

〈1〉化学反应工程学。它应该为化工过程的计算提供

反应宏观动力学模型，为反应器的设计提供理论依据。

〈2〉化工传递过程学。它应该为化工过程的计算提供动量传递、质量传递、能量传递过程的计算模型，为物理过程的工艺设计提供理论依据。

〈3〉化学工程热力学。它应该为化工过程的计算提供基础的物性数据、热力学数据和相平衡数据计算模型。

此外，化学工程热力学还为我们提供了对化工过程进行有效能分析的方法，为节约用能、合理用能指明了方向。

〈4〉化工应用数学。包括线性代数、概率论与数理统计、微分方程、集合论、图论等内容。为化工、石油化工过程的模拟与优化提供数学原理。

作为化工系统工程另一理论基础的系统工程的主要内容运筹学和现代控制理论。

运筹学是求解用代数方程描述的系统的优化方法，尤以规划论最为实用。其中，线性规划主要用于企业管理，非线性规划主要用于求解化学工程领域中的优化问题。

现代控制理论是求解用微分方程描述的系统优化方法。在化工、石油化工生产过程中，物料的组成、流量、温度、压力、液位等随时间的变化规律都需要用微分方程描述。现代控制理论的主要内容有变分法、动态规划和极大值原理。后两种方法在求解化工、石油化工领域的优化问题时，已有不少成功的实例。

化工系统工程的主要方法是：模型化与模拟，分析与综合，最优化方法。

模型化与模拟是化工系统工程的基础。

我们把建立化工、石油化工系统数学模型的过程叫做模

型化。

模拟是人类研究自然界中的现象或过程的一种科学方法。采用这种方法研究自然界中的现象或过程时，不是直接地研究过程或现象的本身，而是建立一组能够反映过程或现象规律或特性的模型，然后通过对模型的研究来预测现象或过程的规律和特性。

化工系统工程中所采用的模拟方法是数学模拟方法，即首先建立一组能够反映化工过程机理或特性的方程组，然后将数学方程组编成计算机程序，在计算机上解算，即在计算机上进行实验，以寻求最佳方案。

不言而喻，欲寻求最佳方案必须进行多方案比较，欲进行多方案比较必须快速、准确地完成一个方案的计算，为了快速、准确地完成一个方案的计算，必须建立化工过程的数学模型，即数学方程组，并把数学方程组和方程组的解算方法编成计算机程序。只有这样才能对化工过程进行模拟，并在模拟的基础上求取其最优解。显然，建立化工过程的数学模型是化工系统工程最基础的工作。

系统分析方法是研究一个结构已经确定了系统如何使其优化的方法。例如，一个生产装置已经建成，如何使其处于最佳运行状态，才能使装置生产能力最大，产品质量最高，原材料消耗和能耗最低？通常，系统分析包含三个内容：

- 〈1〉将系统分解成子系统；
- 〈2〉建立子系统的数学模型和描述子系统之间相互关系的逻辑关系模型；
- 〈3〉研究子系统的数学模型和描述子系统之间相互关系的逻辑关系模型，预测系统的特性。

系统综合方法是研究一个结构尚未确定的系统如何组建它才能使其最优的方法。这是规划与设计时所遇到的问题。通常，系统综合也包含有三个内容：

- 〈1〉选择子系统组成系统；
- 〈2〉用系统分析的方法研究所组建的系统的特性；
- 〈3〉重复前述两项工作，优选最佳系统。

最优化方法则是求解化工、石油化工过程优化问题的数学基础。在求解化工、石油化工过程优化问题时经常使用的优化算法有：求解无约束单变量函数极值的黄金分割法和菲波纳奇法；求解无约束多变量函数极值的梯度法、牛顿法、共轭梯度法、变尺度法、单纯形法；求解条件极值问题中线性规划问题的单纯形法；求解条件极值中非线性规划的复合形法、序列二次规划法、可变容差法；求解多级决策过程优化问题的动态规划法；求解泛函极值的极大值原理法等等。

显而易见，没有电子计算机这一工具，就没有化工系统工程可言。为了使用电子计算机求解化工、石油化工领域中的优化问题，除了需要掌握常用的算法语言如 BASIC，FORTRAN 外，还必须掌握一些常用的计算方法。如：数据插值方法，建立经验模型并对其参数进行估值的回归分析方法；求解线性代数方程组的消元方法、迭代方法、矩阵求逆算法；求解非线性代数方程的根的牛顿法、中点法、弦截法；求解非线性代数方程组的牛顿-拉夫森法、下降法；求解常微分方程组的龙格-库塔法；求解定积分值的辛普森方法等等。

进行化工过程工艺与经济计算是进行化工过程技术经济评价的依据。只有对化工过程进行技术经济评价才能优选出

技术上先进、经济上合理、生产上可行的最佳方案。

归根结底，化工系统工程的中心任务是研究使复杂的化工系统如何处于最佳状态。优化的主要目标有三个，即设计最优、生产操作和控制最优、生产管理最优。

1.6 化工生产过程的优化模型

通常，化工生产过程的优化模型如式（1—1）所示：

$$J = \sum_i p_i P_i - \sum_j r_j R_j - \sum_{mn} \sum u_m U_{mn} - \sum_n \alpha_n I_n - \sum_k m_k M_k \quad (1-1)$$

式中

J ——化工生产过程的经济效益；

p_i ——第 i 种化工产品的单价；

P_i ——第 i 种化工产品的产量；

r_j ——第 j 种原料的单价；

R_j ——第 j 种原料的消耗量；

u_m ——第 m 种公用工程的单价；

U_{mn} ——第 n 种设备对第 m 种公用工程的消耗量；

α_n ——第 n 种设备的折旧率；

I_n ——第 n 种设备的单价；

m_k ——第 k 类生产人员的工资；

M_k ——生产过程中雇用的第 k 类生产人员的数量。

式中的第一项 $\sum p_i P_i$ 表示某化工生产过程共生产出 i 种产品和销售出这 i 种产品的总收入。显然，产品的产量越大，