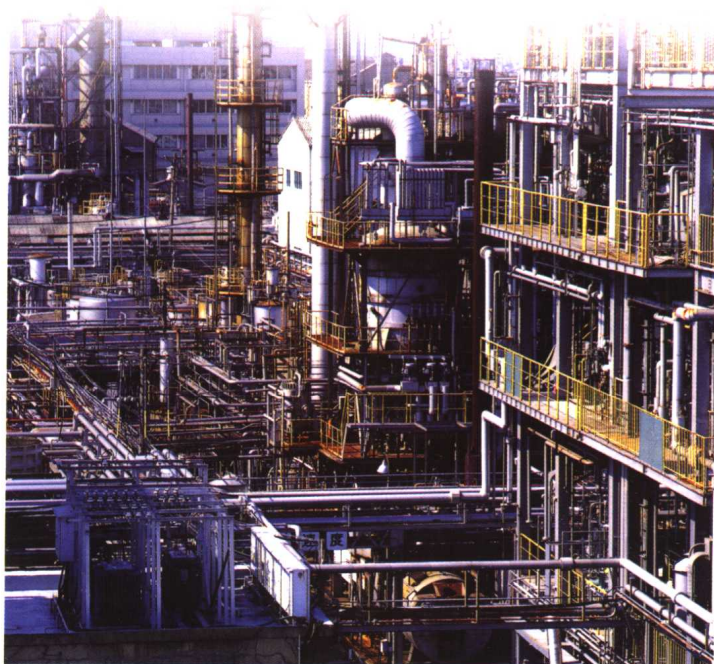


化工过程 优化

何小荣 编著



21.8
2

清华大学出版社

化工过程 优化

何小荣 编著

清华大学出版社

内 容 简 介

本书从化工中经常遇到的几种不同类型的优化问题入手,简明地介绍了优化的基本概念、基本理论,无约束单变量、多变量优化方法(特别是近年来深受广大科技工作者欢迎和喜欢使用的遗传算法(genetic algorithm method))和线性规划、约束非线性规划。在约束问题求解方法中详尽论述了 SQP 法。

优化方法的应用是单独作为一章来论述的,包括 BP 神经网络的原理、方法、步骤以及在炼油厂 FCC 装置优化操作和在线不可测被控参数预测中的应用;反应器、分离序列和换热网络的优化综合,而生产计划优化则以一个炼油厂为实例,从工艺流程分析、建模、求解和结果分析开始,直到形成一个实用软件所需要的功能介绍、使用说明、运行环境、安装调试和结果输出这样一个优化软件开发的全过程。

本书既可以作为高等院校化工类高年级本科生“化工过程优化”课程的教材,也可供研究生和工程技术人员学习和参考。

图书在版编目(CIP)数据

化工过程优化/何小荣编著. —北京:清华大学出版社,2002
ISBN 7-302-06067-3

I. 化… II. 何… III. 化工过程—最佳化 IV. TQ021.8

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2002)第 087180 号

出 版 者: 清华大学出版社(北京清华大学学研大厦,邮编 100084)

[http:// www. tup. com. cn](http://www.tup.com.cn)

责任编辑: 刘明华

印 刷 者: 北京牛山世兴印刷厂

发 行 者: 新华书店总店北京发行所

开 本: 787×960 1/16 印张: 24 字数: 444 千字

版 次: 2003 年 2 月第 1 版 2003 年 2 月第 1 次印刷

书 号: ISBN 7-302-06067-3/O · 272

印 数: 0001~4000

定 价: 31.00 元

前 言

石油、化学工业不仅为工业、农业、交通和国防提供能源、原材料和一系列化工产品,还与人们的日常生活息息相关,其发展直接关系到整个国民经济的繁荣。自改革开放以来,我国的化学工业通过自主开发,引进先进装置和技术,并不断进行消化、吸收、创新,已经经历了明显的变化并取得了显著的成绩。20世纪末是我国石油化工高速发展期。石油加工能力已居世界第三位,乙烯为世界第五位,合成纤维居世界首位,合成橡胶居世界第四位。但仍然还存在许多问题,如能耗费用增加、产品结构单调、环保要求日益提高,等等。为了克服这些问题,许多工业界有识人士认为,不远的将来,化学工业与其他传统工业一样,重点仍然是以信息技术去提升、改造现有装置,而不是新建或扩建;降低能耗费用和满足保护环境的要求,提高现有工厂的效率。增加效益的一个重要的工程工具就是优化:优化工厂的设计、优化企业的管理和优化设备的操作,即实现化工过程的优化。

为了能够有效地利用优化技术解决化学工业中的实际问题,必须学习掌握优化理论和优化实践。作者在二十几年教学和该领域科研工作的基础上,在本书中对这两个问题都作了论述。从数学角度来看,本书的理论部分属于应用数学的范畴。数学作为一门重要的基础学科和一种精确的科学语言,是人类文明的一个重要组成部分,在各行各业中发挥着非常重要的作用,化学工业也不例外。“一种科学只有成功地运用数学时,才算真正达到完善的地步”,世人“深信宇宙是用数学语言写成的一本大书,坚信一切研究对象背后都隐藏着一个严密的数学结构”。由于化工领域的复杂性,既有大化工又有微化工(如生物化工),既有物理过程又有化学反应过程,其数学结构的复杂性更是可想而知。但是随着计算机日益发展,能用优化技术来求解的问题的规模和复杂性都相应的扩大了。

如何来编写这本书和讲授这门课程?从一些基本概念或定义出发,以简练的方式、合乎逻辑地推演出所追求的结论,这固然可以使学生会出数学那种天衣无缝的美感。在高技术本质上是一种数学技术的今天,本书没有按照这种数学的模式来组织。书中我们只选择了少数较好的即最可能获得成功和可靠结果的算法,而不是包罗万象覆盖所有优化著作中的所有算法。严格的数学证明被忽略了,代之以介绍算法的基本原理、步骤,直接去面对生动活泼的化学工业中

的优化问题。比如,化学工业中有哪些优化问题?如何把一个优化问题的描述转化成数学描述?什么类型的优化问题应该用什么方法去解决?这些或许是很多学生和工程师在他们做决策过程中最伤脑筋和感到困难的。我们在本书中就针对这些问题,作出由浅入深的介绍和论述。

第1章,给出了化工中经常遇到的几种不同类型的优化问题,以激发学习优化的热情。之后,讨论了什么叫优化问题、优化问题的目标函数、约束条件、状态方程、最优解的充分必要条件、局部最优解、全局最优解、决策(优化)变量、自由度等一些重要的概念。第2章是一维极小化方法,如黄金分割法、抛物线法、进退法和牛顿法。这些方法除了本身能够解决一些优化问题以外,也是多维优化问题求解最优步长的工具。第3章是求解无约束多变量优化问题的方法,包括梯度法、共轭梯度法、变尺度法等。对处理实验数据过程中参数估值的非线性最小二乘问题非常有效的 Marquardt 法也作了详尽的论述和应用说明。另外,还介绍了目前深受广大科技工作者欢迎和喜欢使用的遗传算法(genetic algorithm method)。这一方法对某些问题和对克服局部最优解,确有其独到之处。第4章讲述了线性规划的基本理论和方法。第5章是约束优化问题,包括基本理论——Kuhn-Tucker定理。求解方法有罚函数法、可行方向法。对求解大规模化工过程优化问题非常有效的 SQP 法,不仅对其算法、原理、步骤作了详尽的论述,还以一个实际化工问题为背景进一步展开讨论。最后一章是优化方法的应用,所有应用实例大部分是作者二十多年来科研成果的一部分。以科研成果充实和丰富教材内容,这是本书编写过程中的一个重要指导思想。本章共分3节。6.1节大规模复杂化工过程的操作优化,简要地介绍了一种智能技术——BP神经网络的原理、训练方法、使用步骤,以及在炼油厂 FCC 装置优化操作和在线不可测被控参数预测中的应用。近年来,人工神经网络技术被广泛地应用于复杂化工系统中的建模、优化,取得了显著的成果。6.2节包含反应器、分离序列和换热网络的优化综合。6.3节讨论了企业的优化管理,即生产计划优化问题,以一个炼油厂为实例,从工艺流程分析、建模、求解和结果分析开始,直到形成一个实用软件所需要的功能介绍、使用说明、运行环境、安装调试和结果输出这样一个优化软件开发的全过程,期望能使学生有一个全面的了解和训练。

本书从编写到出版得到清华大学教务处、化工系在经费上给予的支持,编写过程中得到陈丙珍教授、邱彤讲师和许多博士生、硕士生的帮助和支持,在此表示衷心感谢。对清华大学出版社刘明华编审的关心和指导,表示诚挚的谢意。

由于编者的水平和经验有限,不足和错误之处恳请读者批评、指教。

目 录

1 化工优化问题及其基本理论	1
1.1 化工过程优化的必要性	1
1.1.1 操作和控制	2
1.1.2 过程综合	3
1.1.3 设计优化	5
1.1.4 化工企业的管理优化问题	6
1.2 化工中优化问题的基本类型	7
1.2.1 流体输送管道最佳管径的确定	7
1.2.2 实验数据的处理	8
1.2.3 环境保护问题	9
1.2.4 反应器的优化设计问题	10
1.3 化工优化问题的数学模型	12
1.3.1 化工优化问题数学模型的一般形式	12
1.3.2 状态方程	13
1.3.3 决策变量、状态变量和优化问题的自由度	13
1.3.4 可行域和可行解、最优值和最优优点	14
1.4 优化理论	14
1.4.1 函数的连续性	14
1.4.2 函数的可微性	15
1.4.3 最优解的概念	15
1.4.4 单峰与多峰函数	16
1.4.5 目标函数的等值线	17
1.4.6 凸集和凹集	17
1.4.7 凸函数和凹函数	18
1.4.8 多元函数的 Taylor 展开式	20
1.4.9 无约束优化问题最优解存在的充分必要条件	20
1.4.10 下降迭代算法及其收敛性	23
习题	27

2 一维极小化方法	29
2.1 0.618 法	30
2.1.1 区间消去法的基本思想	30
2.1.2 0.618 法迭代点的确定	31
2.1.3 计算框图	32
2.1.4 算例	33
2.2 进退法——搜索区间的确定	34
2.2.1 进退法的原理和计算步骤	34
2.2.2 计算框图	35
2.2.3 举例	35
2.3 抛物线(二次插值)法	36
2.3.1 抛物线法的原理	36
2.3.2 计算框图	37
2.3.3 算例	37
2.4 牛顿法	38
2.4.1 牛顿法的基本思想	38
2.4.2 牛顿法的几何意义	38
2.4.3 计算框图	39
2.4.4 算例	39
2.5 高斯-牛顿法	40
2.5.1 高斯-牛顿法的基本思想	40
2.5.2 算例	40
习题	41
3 无约束多变量问题优化	47
3.1 最速下降法	47
3.1.1 目标函数的最速下降方向	47
3.1.2 迭代公式和步长的确定	48
3.1.3 算例	49
3.1.4 梯度的差分逼近	53
3.1.5 反应分离系统的优化	54
3.2 共轭方向法与共轭梯度法	57
3.2.1 共轭方向法的基本思想	57
3.2.2 向量的共轭	58

3.2.3	共轭方向法	59
3.2.4	正定二次函数的 FR 共轭梯度法	60
3.2.5	非二次函数的共轭梯度法	62
3.3	牛顿法及阻尼牛顿法	64
3.3.1	牛顿法的迭代方向	64
3.3.2	阻尼牛顿法	65
3.4	DFP 变尺度法	67
3.4.1	变尺度法的基本思想	68
3.4.2	DFP 变尺度法校正矩阵的确定	68
3.4.3	DFP 变尺度法的迭代方向和迭代公式	70
3.5	马夸特法	72
3.5.1	概述	72
3.5.2	平方和形式的函数	76
3.5.3	高斯-牛顿法	77
3.5.4	马夸特法	80
3.5.5	马夸特法搜索方向的讨论	81
3.5.6	化工实例——Gilliland 曲线的拟合	84
3.5.7	以梯度为基础的优化方法的简单评价	87
3.6	单纯形法	91
3.6.1	初始单纯形的形成	91
3.6.2	单纯形法的迭代过程	93
3.6.3	算例	96
3.6.4	化工实例——换热器网络的最优设计	98
3.7	鲍威尔法	101
3.7.1	鲍威尔法的基本思想	101
3.7.2	鲍威尔法的计算步骤	103
3.7.3	算例	104
3.8	遗传算法	105
3.8.1	算法原理	106
3.8.2	算例	112
习题		115
4	线性规划	118
4.1	线性规划问题及其数学模型	118

4.1.1	线性规划问题	118
4.1.2	二维线性规划问题的图解法	120
4.1.3	线性规划问题中的几种特殊情况	122
4.1.4	线性规划问题的标准型	123
4.1.5	非标准型转化成标准型	125
4.2	单纯形法的基本理论	127
4.2.1	线性规划问题解的概念	127
4.2.2	线性规划的基本概念与基本定理	129
4.3	单纯形法	135
4.3.1	初始基本可行解的确定	135
4.3.2	基本可行解之间的迭代	137
4.3.3	最优解的判别准则及换入向量的确定	140
4.4	单纯形法的计算步骤	145
4.4.1	单纯形表格	145
4.4.2	单纯形法的计算步骤	146
4.5	大 M 法和两阶段法	153
4.5.1	大 M 法	153
4.5.2	两阶段法	155
4.6	线性规划计算过程的矩阵向量法	164
4.7	对偶单纯形法	166
4.7.1	线性规划的对偶问题	166
4.7.2	对偶定理与互补松弛定理	169
4.7.3	对偶单纯形法	173
4.8	整数规划	176
4.8.1	切平面法	177
4.8.2	分枝定界法	183
	习题	189
5	带约束非线性问题的最优化	198
5.1	等式约束优化问题	198
5.1.1	一阶必要条件	198
5.1.2	Lagrange 乘子法	199
5.1.3	二阶充分条件	200
5.1.4	Lagrange 乘子法处理带不等式约束的优化问题	202

5.2	约束问题最优解的充分必要条件	204
5.2.1	基本概念	204
5.2.2	一阶必要条件(库恩-塔克条件)	206
5.2.3	广义拉格朗日函数	208
5.2.4	二阶充分条件	209
5.3	罚函数法	212
5.3.1	外点罚函数法	212
5.3.2	内点罚函数法	217
5.3.3	精确罚函数法的概念	222
5.4	序贯二次规划(SQP)法	223
5.4.1	SQP 法的基本思想和计算步骤	224
5.4.2	二次规划的求解	227
5.4.3	一维搜索	233
5.4.4	矩阵 Q^k 的校正	234
5.4.5	化工中的应用实例	235
5.5	可行方向法	244
5.5.1	约坦狄克(Zoutendijk)可行方向法	245
5.5.2	非线性约束的托-文法	251
5.5.3	若森投影梯度法	255
5.6	复合形法	265
5.6.1	迭代过程	265
5.6.2	算例	267
	习题	269
6	优化方法的应用	275
6.1	大规模复杂化工过程的操作优化	275
6.1.1	概述	275
6.1.2	人工神经网络技术	276
6.1.3	BP 网络	284
6.1.4	人工神经网络在 FCC 分馏塔操作优化中的应用	292
6.1.5	人工神经网络在 FCC 分馏系统汽油、柴油质量动态 监测中的应用	297
6.1.6	结束语	304
6.2	石化企业的生产优化管理	304

6.2.1	石化企业生产优化管理的数学模型	306
6.2.2	炼油厂生产计划优化	309
6.2.3	石化企业的生产优化管理软件系统	320
6.2.4	炼油生产的供应链优化	333
6.3	化工过程的优化综合	335
6.3.1	反应器的优化综合	335
6.3.2	多组分精馏锐分离序列的优化综合	338
6.3.3	换热网络的优化综合与模拟	351
参考文献		361
附录		363
附录 1	0.618 法计算框图	363
附录 2	进退法计算框图	363
附录 3	抛物线法计算框图	364
附录 4	牛顿法计算框图	364
附录 5	最速下降法计算框图	365
附录 6	正定二次函数的 FR 共轭梯度法计算框图	365
附录 7	阻尼牛顿法计算框图	366
附录 8	DFP 变尺度法计算框图	366
附录 9	Marquardt 法计算框图	367
附录 10	单纯形法计算框图	368
附录 11	Powell 法计算框图	369
附录 12	线性规划单纯形法计算框图	370
附录 13	外点罚函数法的 SUMT 计算框图	371
附录 14	内点罚函数法的 SUMT 计算框图	371
附录 15	约坦狄克(Zoutendijk)可行方向法计算框图	372
附录 16	托-文(Topkis-Veinott)可行方向法计算框图	373
附录 17	初始复合形的形成计算框图	373
附录 18	复合型法计算框图	374

1

化工优化问题及其基本理论

自进入 20 世纪 80 年代以来,随着计算机技术、信息技术、系统工程技术的发展,无论是社会人文科学,还是自然科学的书刊、杂志、论文、报告中,“优化”这一词作为关键词出现的频率越来越高。什么叫优化?顾名思义,就是去追求最好结果或最优的目标。在各个领域中普遍都存在着各种各样的优化问题,不同领域追求最好结果或最优的目标——即优化问题的形式也不同。犹如矛盾的普遍性和矛盾的特殊性一样。人们都有体会,办任何事情、做任何工作都在追求某一目标,因此人们每天都面临着优化问题。另外,某一目标的实现一般总有多种方案可供选择,人们又总是想方设法从多种方案中选择能获得最好结果的那一种方案。因此,人们每时每刻都在自觉不自觉地解决优化问题。例如,从北京到上海有高速公路、铁路、航空 3 种走法。如果我们追求的目标是省钱,那么只要比较一下这 3 种走法的票价,并且从中选择最便宜的那一种走法就可以了;如果我们追求的目标是快速、省时,那自然是选择乘飞机了。再如,某化工厂生产 m 个产品,根据市场预测,其中有 α 个产品在下一周期内可能会涨价,有 β 个产品在下一周期内可能会降价,根据工厂现有原料、公用工程(水、电和汽)、设备和人员等条件,应如何安排各个产品的产量,使其效益是最好的?以上两个例题都是优化问题。不过后一个问题,就不是一看就能解决的了。

所谓优化问题(optimal problem)就是追求优化目标(optimal object)的问题,达到优化目标的方案就是优化方案(optimal solution),搜寻优化方案的方法就是优化方法(optimal method)。本书所介绍的方法,不是上述的直观推断法,而是定量求解方法,它的数学理论就是最优化理论。因此,从这一意义上说,所谓优化方法是人们做决策时的一种主要的定量的工具。

如果实现优化目标的方案与时间无关,那么称这种优化问题为静态优化问题;否则,称为动态优化问题。本书仅讨论静态优化问题。

1.1 化工过程优化的必要性

优化技术是一门新兴的应用性很强的技术,第二次世界大战后,由于经济、军事、科技等领域的迫切需要以及运筹学、控制论、系统工程、计算机技术等的发展,为优化技术的迅速发展提供了理论上和手段上的基础条件。现在,它已逐步

成为工业、农业、交通、能源、军事和管理等部门不可缺少的重要技术。化工领域中同样存在着大量的优化问题需要运用优化技术加以解决。

1.1.1 操作和控制

炼油厂催化裂化(fluid catalytic cracking,FCC)分馏塔工艺流程见图 1-1。

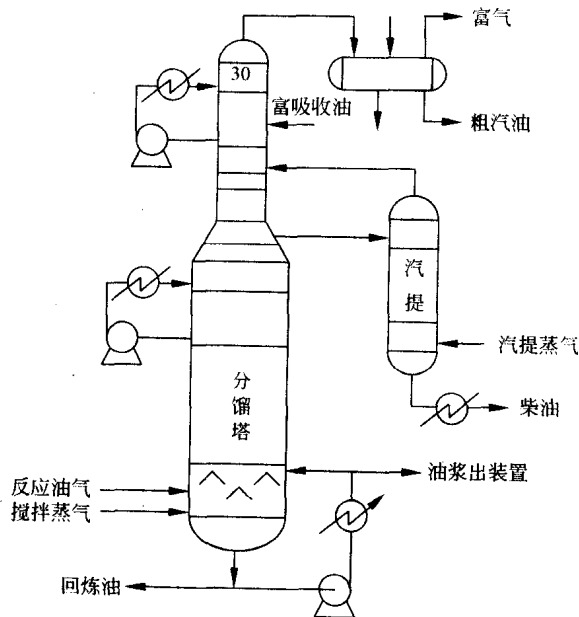


图 1-1 FCC 分馏塔工艺流程

从反应器来的反应油气,其组成包括干气(H_2 、 C_1 烃、 C_2 烃和少量的 N_2 、 CO 、 CO_2 、 H_2S)、液化气(C_3 烃、 C_4 烃)、汽油、柴油、油浆。以温度 $479^{\circ}C \sim 496^{\circ}C$ 、 $0.206 \sim 0.235 MPa$ 的压力,从底部进入分馏塔。经底部脱过热段后在分馏段分成几个中间产品:塔顶为汽油和液化气,侧线抽出轻柴油,塔底产品为油浆。轻柴油经汽提塔后,再经换热冷却后出装置。为了取走分馏塔的过剩热量,设有塔顶回流、一个中段回流以及塔底油浆循环。分馏塔进料油气的温度、压力和组成是由生产方案、反应器的操作条件和催化剂的活性等所决定的。从表 1-1 中可以看出,各循环回流的取热分配比例因所用的催化剂及生产方案的不同,而有较大的变化。当从多产汽油方案改为多产柴油方案时,进料油气的温度降低,回炼比增大,进塔热量增加,全塔回流热自然也增加。但因进塔温度降低,油气过热程度下降,故塔底油浆循环取热比例下降。由于汽油产率减小而柴油产率增加,故塔顶循环回流取热比例降低,而中段回流的取热比例增大。

表 1-1 某催化裂化分馏塔不同生产方案时的回流取热的变化

生产 方案	生 产 条 件				回 流 取 热 分 配		
	反应器出 口温度/℃	回炼比	全塔回流热 /10 ⁶ kJ/h	进塔总热量 /10 ⁶ kJ/h	塔顶回流 取热	中段回流 取热	循环油浆 取热
汽油	492	0.45	20.76	43.75	23%	27.8%	49.2%
柴油	465	1.24	26.46	65.73	19.6%	47.6%	32.8%

综上所述,生产方案的不同,操作条件也不同。为了保证产品质量,分馏塔的主要操作条件如回流取热分配,应随不同的进料油气温度、压力和组成的变化而改变,才能达到所期望的分离目的。这就是分馏塔的操作优化问题,也就是化工过程的优化操作问题。这一问题的解决,需要建立优化问题的数学模型:

$$\begin{aligned} & \max P_{\text{汽油}} \quad \text{或} \quad P_{\text{柴油}} \\ & \text{满足: 分馏塔的物料平衡} \\ & \quad \text{分馏塔的能量平衡} \\ & \quad \text{分馏塔的相平衡} \end{aligned} \quad (1-1)$$

即以追求汽油 $P_{\text{汽油}}$ 或柴油 $P_{\text{柴油}}$ 收率最大为目标,满足分馏塔热平衡、物料平衡、组分之间相平衡等等的数学模型。 P 为油品的产量。针对不同的生产方案,以几个回流取热量为优化操作变量,求解该数学模型,得各回流取热量的优化值,提供给控制系统,作为优化控制的设定值,以达到分馏塔的优化控制;或提供给操作人员,用于指导操作,以达到分馏塔的优化操作。

1.1.2 过程综合

在给定的输入、输出的条件下,化工生产过程可以采用不同的方法和设备来实现。化工过程系统的综合是指在给定的输入、输出的条件下,组合出一套最优的生产过程。综合时涉及反应路线和反应器类型的选择、分离方法和分离序列的确定、能量的综合利用、公用工程选用等诸多方面的问题,因此可行方案数是相当惊人的。

炼油厂常减压装置如图 1-2 所示,四十几度(℃)的原油流经一系列换热器(图中换热器 I、换热器 II 和换热器 III)与温度较高的常减压侧线换热(如初馏汽油、常一线、常二线等),加热到 120℃ 左右,进脱盐罐脱盐(含盐 < 0.1 mg/L)。脱后的原油再与常减压侧线(如减压各侧线等)换热,加热到 220℃ 左右进初馏塔,拔掉一部分轻组分。从初馏塔底出来的原油与温度更高的常减压侧线(如减二线、减三线、减压渣油等)换热到 290℃ ~ 300℃ 左右,进常压加热炉再加热到 360℃ ~ 370℃,进常压塔进行分离。常压塔底出来的重油进减压加热炉加热后进减压塔进行分离。脱盐罐前后和常压加热炉前的一系列换热器构成了常减压

换热网络。这一网络的好坏,影响原油的换热终温,换热终温越高,常压加热炉负荷越小,常减压各侧线热量回收就越充分,冷公用工程越省,加工每吨原油的能耗就越低。

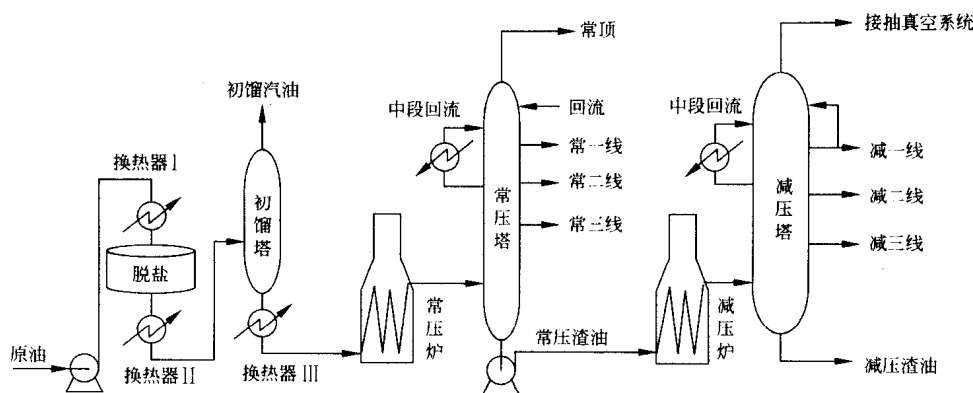


图 1-2 炼油厂常减压装置

有一处理量为 280 万 t/a 常减压装置,原油进入常压加热炉前的换热终温只有 280℃,能耗指标达不到国家要求。各物流的基础数据见表 1-2。

表 1-2 各物流基础数据及换后温度

序号	物流名	流量 F_i /t/h	始温 T_{ii} /℃	目标温度 T_{ie} /℃	出装置温度 T_{ie} /℃
1	原油	344	42~46	>300	
2	初顶汽油+回流	20.25+9	135		40
3	常顶循环	95	161	108	
4	常一线	20	198		45
5	常一中	80	229	133	
6	常二线+封油	18+7	264		60
7	常三线	28.3	305		60
8	常三中	36	323	200	
9	常四线	30.64	340		70
10	减一线+减顶回流	12.47+30	165	45	
11	减一中+减二线	106+37	245	200	
12	减二线	37	200		80
13	减二中+减三线	107+33	316	220	
14	减三线	33	220		80
15	渣油+燃料油	123.34+3.1	378		90
16	常顶汽油+回流	16.02+16	130		40

原换热网络中有 20 种型号 50 台换热器、2 台原油泵和 20 台侧线热物流泵。这一问题的综合目标如下：

$$\max \quad Z = T_{1e} \quad (1-2a)$$

$$\text{s. t.} \quad 120 \leq T_{\text{脱盐}} \leq 125 \quad (1-2b)$$

$$225 \leq T_{\text{初馏}} \leq 230 \quad (1-2c)$$

$$4 \leq V_1 \leq 4.5 \quad (1-2d)$$

$$5 \leq V_2 \leq 7 \quad (1-2e)$$

$$C_e \leq 400 \quad (1-2f)$$

$$\Delta N_{\text{old}} = 0 \quad (1-2g)$$

$$\Delta P_i \leq \Delta Y_i \quad (1-2h)$$

$$\Delta P_i \text{ 和 } \Delta Q_i \text{ 均匀} \quad (1-2i)$$

$$Q_{\text{原油}} = \sum_{i=2}^{15} Q_i \quad (1-2j)$$

$$T_{ie} (i = 2, 3, \dots, 16) \text{ 达到目标温度或出装置温度} \quad (1-2k)$$

式中： T_{ii} 和 F_i 已知；

F_i ——各物流的流量，kg/h；

T_{ii} ——各物流的始温，℃；

T_{ie} ——各物流的终温，℃；

$T_{\text{脱盐}}, T_{\text{初馏}}$ ——分别为原油进入脱盐罐和初馏塔的温度，℃；

V_1, V_2 ——分别为 3kg 和 10kg 的蒸气发生量，t/h；

C_e ——改造的投资，万元；

ΔN_{old} ——原有网络中可利用的旧换热器的数量与改造方案中已利用的数量之差；

$\Delta P_i, \Delta Y_i$ ——分别为各物流的压降和相应的机泵扬程，mH₂O (1mH₂O ≈ 9.8kPa)；

ΔQ_i ——原油各支路的换热量，MJ/h；

$Q_{\text{原油}}$ ——原油所获得的总热量，MJ/h；

Q_i ——从常减压各侧线回收的热量，MJ/h。

在这样的输入、输出的条件下，如何设计综合出使原油换热终温最高，又满足各种条件的换热网络呢？这就是一个能量充分利用的综合问题。

1.1.3 设计优化

优化设计是在给定系统结构的条件下，确定各单元设备的最优尺寸、最优结构参数。例如多段触煤层间冷却的合成氨固定床反应器，其结构如图 1-3 所示。

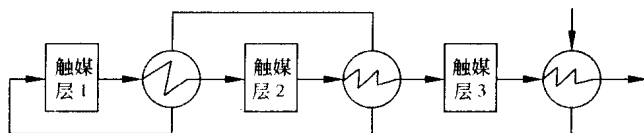


图 1-3 固定床反应器结构示意图

原料气入塔条件及离开反应器的合成气的氨含量等均已确定,要使整个反应器的触媒装置最少,对各触媒层的体积、各换热器的面积就有一个最优设计问题。假如循环气量为 7×10^4 标准 m^3/h ,操作压力为 90.4MPa,进、出口反应器的氨含量为 4% 和 17.7%,对该问题进行优化计算,可求得各触媒层的体积分别为 0.538m^3 , 1.149m^3 和 1.472m^3 。

1.1.4 化工企业的管理优化问题

在市场经济条件下,原材料、能源和产品的价格瞬息万变,及时调整用以指导生产经营的生产计划,优化产品结构,提高经济效益是企业生产管理的当务之急。以某炼油厂为例,共有常减压、催化重整、催化裂化、柴油加氢、气体脱硫和脱硫醇等 6~7 套塔设备,10 类不同罐区,约 90 种不同的产品和半成品。由于生产设备多,工艺流程复杂,优化产品结构时必须周密考虑原油性质、各产品收率、各种设备的处理能力、各种指令性指标和市场价格之间的各种复杂的制约关系,以寻求一个可行的最优方案。这是凭经验、凭手工所做不到的。必须将其追求的目标,这一目标应满足的各种条件用数学语言描述出来,即建立起数学模型,用计算机求解,实现生产计划的优化。

以上我们叙述了化工过程中的综合、设计、操作和管理等优化的必要性。国内外应用优化技术的实践表明,在同样条件下,经过优化技术的处理,对过程系统能耗、物耗的降低,资源的合理利用,经济效益和效率的提高等,均有显著的效果。据美国 Aspen Tech 公司估计,利用过程工业建模系统 PIMS(process industry modelling system)实现产销一体化的解决方案,一个实际每年加工 8 000 万 t 的原油企业,其效益在 8 640 万美元/a 以上,一个每年实际加工 550 万 t 的炼油厂,计划优化的效益可达 400 万美元/a。同样规模的炼油厂的先进调度系统,效益可达 510 万美元/a。一般说来,处理对象的规模愈大,效果也愈显著。如 Aspentech 公司在对 SK Corp 石油公司计划优化,包括原油选择、炼油化工一体化的优化、操作方案的优化、生产调度的优化;一个加工量为 817 000 桶原油/d,乙烯 695 000t/a,芳烃 81 500 桶/d 炼油厂,其单独优化的效益:炼油——2 500 万美元/a,化工——1 000 万美元/a;炼油化工——一体化的效益比单独优化的效益多出 620 万美元/a,其中 365 万来自化工,255 万来自炼油。这对长期