



面向21世纪课程教材

# 化工过程分析 与合成

麻德贤 李成岳 张卫东 主编



化学工业出版社  
教材出版中心

面向 21 世纪课程教材

# 化工过程分析与合成

麻德贤 李成岳 张卫东 主编

化学工业出版社  
教材出版中心  
·北京·

(京) 新登字 039 号

图书在版编目 (CIP) 数据

化工过程分析与合成/麻德贤, 李成岳, 张卫东主  
编. —北京: 化学工业出版社, 2002. 6  
面向 21 世纪课程教材  
ISBN 7-5025-3845-3

I. 化… II. ①麻…②李…③张… III. 化工过程-  
高等学校-教材 IV. TQ02

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2002) 第 033020 号

---

面向 21 世纪课程教材  
**化工过程分析与合成**  
麻德贤 李成岳 张卫东 主编  
责任编辑: 徐世峰  
责任校对: 陶燕华  
封面设计: 蒋艳君

\*

化学工业出版社 出版发行  
教材出版中心  
(北京市朝阳区惠新里 3 号 邮政编码 100029)  
发行电话: (010) 64982530  
<http://www.cip.com.cn>

\*

新华书店北京发行所经销  
北京市彩桥印刷厂印刷  
三河市前程装订厂装订  
开本 787×960 毫米 1/16 印张 18½ 字数 326 千字  
2002 年 6 月第 1 版 2002 年 6 月北京第 1 次印刷  
ISBN 7-5025-3845-3/G · 1015  
定 价: 28.00 元

---

版权所有 违者必究

该书如有缺页、倒页、脱页者, 本社发行部负责退换

## 序

《化工类专业人才培养方案及教学内容体系改革的研究与实践》为教育部（原国家教委）《高等教育面向 21 世纪教学内容和课程体系改革计划》的 03-31 项目，于 1996 年 6 月立项进行。本项目牵头单位为天津大学，主持单位为华东理工大学、浙江大学、北京化工大学，参加单位为大连理工大学、四川大学、华南理工大学。

项目组以邓小平同志提出的“教育要面向现代化，面向世界，面向未来”为指针，认真学习国家关于教育工作的各项方针、政策，在广泛调查研究的基础上，分析了国内外化工高等教育的现状、存在问题和未来发展。四年多来项目组共召开了由七校化工学院、系领导亲自参加的 10 次全体会议进行交流，形成了一个化工专业教育改革的总体方案，主要包括：

——制定《高等教育面向 21 世纪“化学工程与工艺”专业人才培养方案》；

——组织编写高等教育面向 21 世纪化工专业课与选修课系列教材；

——建设化工专业实验、设计、实习样板基地；

——开发与使用现代化教学手段。

《高等教育面向 21 世纪“化学工程与工艺”专业人才培养方案》从转变传统教育思想出发，拓宽专业范围，包括了过去的各类化工专业，以培养学生的素质、知识与能力为目标，重组课程体系，在加强基础理论与实践环节的同时，增加人文社科课和选修课的比例，适当削减专业课分量，并强调采取启发性教学与使用现代化教学手段，因而可以较大幅度地减少授课时数，以增加学生自学与自由探讨的时间，这就有利于逐步树立学生勇于思考与走向创新的精神。项目组所在各校对培养方案进行了初步试行与教学试点，结果表明是可行的，并收到了良好效果。

化学工程与工艺专业教育改革总体方案的另一主要内容是组织编写高等教育面向 21 世纪课程教材。高质量的教材是培养高素质人才的重要基础。项目组要求教材作者以教改精神为指导，力求新教材从认识规律出发，阐述本门课程的基本理论与应用及其现代进展，并采用现代化教学手段，做到新体系、厚基础、重实践、易自学、引思考。每门教材采取自由申请及择优选定的原则。项目组拟定了比较严格的项目申请书，包括对本门课程目前国内外教材的评述、拟编写教材的特点、配套的现代化教学手段（例如提供教师

在课堂上使用的多媒体教学软件，附于教材的辅助学生自学用的光盘等)、教材编写大纲以及交稿日期。申请书在项目组各校评审，经项目组会议择优选取立项，并适时对样章在各校同行中进行评议。全书编写完成后，经专家审定是否符合高等教育面向 21 世纪课程教材的要求。项目组、教学指导委员会、出版社签署意见后，报教育部审批批准方可正式出版。

项目组按此程序组织编写了一套化学工程与工艺专业高等教育面向 21 世纪课程教材，共计 25 种，将陆续推荐出版，其中包括专业课教材、选修课教材、实验课教材、设计课教材以及计算机仿真实验与仿真实习教材等。本教材就是其中的一种。

按教育部要求，本套教材在内容和体系上体现创新精神、注重拓宽基础、强调能力的培养，力求适应高等教育面向 21 世纪人才培养的需要，但由于受到我们目前对教学改革的研究深度和认识水平所限，仍然会有不妥之处，尚请广大读者予以指正。

化学工程与工艺专业的教学改革是一项长期的任务，本项目的全部工作仅仅是一个开端。作为项目组的总负责人，我衷心地对多年来给予本项目大力支持的各校和为本项目贡献力量的人们表示最诚挚的敬意！

中国科学院院士、天津大学教授

余国琮

2000 年 4 月于天津

# 前 言

按照天津大学、华东理工大学、浙江大学、北京化工大学、大连理工大学、四川大学和华南理工大学七校联合制定的《面向 21 世纪化学工程与工艺专业培养方案》(以下简称《培养方案》),《化工过程分析与合成》是一门必修的化工基础课程。

根据七校多次研讨得到的关于“夯实基础、拓宽专业”,加强综合能力培养和加强化学工程与工艺专业教学实践性的共识,本课程力图通过对原有课程体系和教学内容的整合,面向典型的化工过程系统,培养学生综合运用化工系统工程、化学工艺、化学反应工程和传递与分离工程知识处理实际问题的能力。例如,以典型的、现代的化学工艺过程作为研究对象、载体和实例,使学生学习并初步掌握有效地组织工艺流程,科学地确定系统的操作条件,以实现过程系统高效、平稳运行,达到所期望的技术、经济、环境和资源目标的方法,即系统工程的方法。在作为载体的过程系统的选择方面,注意到了典型性,如有机与无机工艺过程、反应与分离过程、连续与间歇过程和配置了集散式控制手段的过程系统,等等;在教学内容的组织方面,尝试突破传统《化工系统工程》教材的限制,希望从单纯突出系统工程方法论过渡到在介绍基本数学方法的基础上,强调注意运用系统工程思想和方法进行“案例”分析,突出实践性和综合性。

为了给学生自学提供方便,与本书配合,还开发了一批计算机辅助教学课件,结合《化工仿真实习》、《化工设计》等软件,预计将会对提高教学活动的灵活性和教学效率有所帮助。

考虑到设置本课程的目的,它的教学活动势必涉及到几乎所有的化工专业课程,因而建议将其安排在专业教学的后期并应注意与《化学工艺学》、《化工设计》和《化工仿真实习》等课程或教学环节紧密结合,相互协调,避免不必要的重复。

全书由北京化工大学教师负责编写。由麻德贤、李成岳、张卫东主编,参加编写的还有毕立群、陈标华和施宝昌。成稿后,又由大连理工大学姚平经教授、华东理工大学于遵宏教授、王弘轼教授主审。他们都提出了许多非

常宝贵的修改意见，对提高本书质量有很大的帮助，谨此致谢！

由于这是化学工程与工艺专业教学计划中教学内容重新整合力度较大的一门课程，还没有任何实践经验，加以我们的水平有限，因而本书一定还有许多不足之处，恳请读者批评指正。

编 者

2002年1月

# 目 录

<b>1 绪论</b> .....	1
1.1 化工过程 .....	1
1.1.1 化学反应过程 .....	1
1.1.2 换热过程 .....	2
1.1.3 分离过程 .....	2
1.2 化工过程生产操作控制 .....	2
1.2.1 集散系统 (DCS) .....	3
1.2.2 DCS 的先进控制与优化控制 .....	3
1.3 化工过程的分析与合成 .....	4
1.3.1 化工过程系统的分析 .....	4
1.3.2 化工过程系统的合成 .....	5
1.4 化工过程模拟系统 .....	5
1.4.1 化工流程稳态模拟系统 .....	5
1.4.2 动态模拟系统 .....	6
1.5 化工企业 CIPS 技术 .....	7
1.5.1 CIMS 技术 .....	7
1.5.2 CIPS 技术 .....	8
1.6 人工智能技术在化工过程中的应用 .....	8
1.6.1 人工智能技术 .....	9
1.6.2 专家系统 .....	9
1.6.3 人工神经网络 .....	9
1.6.4 人工智能技术在化工过程系统中的应用 .....	10
1.7 本教材的目的与内容 .....	10
<b>2 化工过程系统稳态模拟与分析</b> .....	11
2.1 过程系统模拟的三种基本方法 .....	12
2.1.1 过程系统模拟的序贯模块法 .....	12
2.1.2 过程系统模拟的面向方程法 .....	13
2.1.3 过程系统模拟的联立模块法 .....	13
2.2 过程系统模拟的序贯模块法 .....	14
2.2.1 序贯模块法的基本原理 .....	14



2.2.2	再循环物流的断裂	16
2.2.3	断裂物流变量的收敛	21
2.2.4	序贯模块法解设计问题	28
2.3	过程系统模拟的面向方程法	29
2.3.1	面向方程法的原理	29
2.3.2	大型稀疏非线性方程组的降维解法	30
2.3.3	联立拟线性方程组解大型稀疏非线性方程组	34
2.4	过程系统模拟的联立模块法	41
2.4.1	联立模块法的原理	41
2.4.2	建立简化模型的两种切断方式	44
2.5	氨合成工艺流程的模拟与分析	48
2.5.1	氨合成工艺流程的模拟	48
2.5.2	氨合成工艺生产工况的模拟分析	51
<b>3</b>	<b>化工过程系统动态模拟与分析</b>	<b>56</b>
3.1	化工过程系统的动态模型	56
3.1.1	化工过程系统的动态特性	56
3.1.2	化工过程系统的动态模型	56
3.1.3	确定性动态模型的数学处理	58
3.2	连续搅拌罐反应器的动态特性	60
3.2.1	动态数学模型	60
3.2.2	模型的数学处理与应用 (I)	64
3.2.3	模型的数学处理与应用 (II)	65
3.3	精馏塔的动态特性	68
3.3.1	动态数学模型	69
3.3.2	模型的数学处理与应用	70
3.3.3	更实际的问题	73
3.4	变压吸附过程的模拟与分析	74
3.4.1	数学模型的建立	74
3.4.2	动态模型的数学处理	78
3.4.3	模型的应用	79
<b>4</b>	<b>化工过程系统的优化</b>	<b>83</b>
4.1	概述	83
4.2	化工过程系统优化问题基本概念	84
4.2.1	最优化问题的数学描述	84
4.2.2	最优化问题的建模方法	87

4.2.3	化工过程系统最优化方法的分类	88
4.3	化工过程系统最优化问题的类型	89
4.3.1	过程系统参数优化	89
4.3.2	过程系统管理最优化	92
4.4	化工过程中的线性规划问题	92
4.4.1	线性规划问题的数学描述	92
4.4.2	求解线性规划的图解法	96
4.4.3	求解线性规划问题的单纯形法	96
4.4.4	按原料资源供应、市场需求价格等因素进行的排产计划	100
4.5	化工过程中的非线性规划问题	100
4.5.1	无约束条件最优化问题的经典求解方法	100
4.5.2	有约束条件最优化问题的经典求解方法	101
4.5.3	动态系统参数的变分优化法	104
4.6	化工过程大系统的优化	120
4.6.1	可行路径优化法	123
4.6.2	不可行路径	124
<b>5</b>	<b>化工生产过程操作工况调优</b>	<b>134</b>
5.1	化工生产过程操作工况调优的作用与意义	134
5.2	化工生产过程操作工况离线调优的方法	135
5.2.1	机理模型法——液体空气精馏塔的操作工况调优	135
5.2.2	统计模型法——苯酐生产过程的操作工况调优	148
5.2.3	智能模型法——乙苯脱氢反应过程的操作工况调优	161
<b>6</b>	<b>间歇化工过程</b>	<b>175</b>
6.1	间歇过程与连续过程	175
6.1.1	间歇化工的特点	176
6.1.2	间歇过程与连续过程的比较	177
6.1.3	间歇过程的基本概念	178
6.2	过程动态模型及模拟	183
6.2.1	混合过程	183
6.2.2	喷雾干燥过程	185
6.2.3	间歇、半连续反应过程的模型、模拟和优化	186
6.3	间歇过程的最优时间表	189
6.3.1	时间表问题	190
6.3.2	简单多产品和多目的间歇过程最优时间表的计算规则	196
6.4	多产品间歇过程的设备设计与优化	200

6.4.1	基本定义、原则和术语 .....	200
6.4.2	多产品间歇过程设备的基本算法 .....	203
6.4.3	多产品间歇过程设备尺寸的最优设计 .....	207
6.5	间歇过程的控制模型 .....	214
6.5.1	配方模型 .....	214
6.5.2	控制功能模型 .....	215
6.5.3	过程模型 .....	216
6.5.4	物理模型 .....	217
6.5.5	程序控制模型 .....	217
<b>7</b>	<b>换热网络合成 .....</b>	<b>220</b>
7.1	化工生产流程中换热网络的作用和意义 .....	220
7.2	换热网络合成问题 .....	221
7.2.1	换热网络合成问题的描述 .....	221
7.2.2	换热网络合成的研究 .....	221
7.3	换热网络合成——夹点技术 .....	221
7.3.1	第一定律分析 .....	221
7.3.2	温度区间 .....	222
7.3.3	最小公用工程消耗 .....	223
7.3.4	温焓图与组合曲线 .....	225
7.3.5	夹点的特性 .....	227
7.4	夹点法设计能量最优的换热网络 .....	229
7.4.1	匹配的可行性原则 .....	229
7.4.2	流股的分割—— $FC_p$ 表 .....	232
7.4.3	流股的匹配——勾销推断法 .....	234
7.5	换热网络的调优 .....	236
7.5.1	最小换热单元数 .....	236
7.5.2	能量与设备数的权衡 .....	236
7.5.3	$\Delta T_{\min}$ 的选择 .....	239
7.6	实际工程项目的换热网络合成 .....	240
7.6.1	数据提取 .....	240
7.6.2	选择物流 .....	241
7.6.3	老厂改造 .....	243
7.6.4	禁止匹配与强制匹配 .....	246
7.6.5	阈值问题 .....	247
7.6.6	多品位公用工程 .....	249

<b>8 分离塔序列的综合</b> .....	254
8.1 精馏塔分离序列综合概况 .....	254
8.2 分离序列综合的基本概念 .....	255
8.2.1 简单塔 .....	255
8.2.2 顺序表 (Ranked List) .....	256
8.2.3 可能的分离序列数 .....	256
8.2.4 分离子群 (Subgroups) .....	256
8.2.5 可能的分离子问题 .....	257
8.2.6 目标产物组 .....	259
8.2.7 判别指标 .....	259
8.2.8 分离序列的综合方法 .....	259
8.3 动态规划法 .....	260
8.4 分离度系数有序试探法 .....	267
8.4.1 经验规则 M1 .....	267
8.4.2 经验规则 M2 .....	269
8.4.3 经验规则 D1 .....	269
8.4.4 经验规则 S1 .....	269
8.4.5 经验规则 S2 .....	269
8.4.6 经验规则 C1 .....	269
8.4.7 经验规则 C2 .....	269
8.5 相对费用函数法 .....	271
8.6 分离序列综合过程的评价 .....	272
8.7 调优法 .....	274
8.8 复杂塔的分离顺序 .....	279

# 1 绪 论

过程一词的哲学意义指的是客观事物从一个状态到另一个状态的转移。在工艺生产上，对物料流进行物理或化学的加工工艺称作过程工艺。过程工艺按工艺行业的不同又分为化工过程、冶金过程、石油炼制过程、医药生产过程等。像电视机、汽车、切削车床等的生产，都是以工件为对象的加工工艺，称作制造工艺。

## 1.1 化工过程

化工过程是以天然物料为原料，经过物理或化学加工制成产品的过程。通常化工过程大都包括三个部分：原料制备、化学反应、产品分离等。化学的单元过程包括有合成、氧化、加氢、裂解、电解质溶液反应等。这些单元过程由被处理的物料流连接起来，构成化工过程生产工艺流程。在多种多样的单元过程中，最重要的也是最多用的单元过程是：化学反应过程、换热过程和分离过程。

### 1.1.1 化学反应过程

化学反应过程是化工过程的核心部分。主要的化学反应过程有：催化反应过程、热裂解反应过程，电解质溶液离子反应过程以及生物化学反应过程等。

#### (1) 催化反应过程

现代化工过程中的化学反应大都是在催化剂存在下进行的化学反应。当前用于化工过程的催化剂已有 2000 多种。化工生产中的催化反应过程有：

合成反应：合成氨、合成甲醇等的反应过程；

氧化反应：萘氧化制苯酐、乙烯氧化制环氧乙烷等的反应过程；

脱氢反应：乙苯脱氢制苯乙烯的反应过程；

裂化反应：重质油催化裂化制轻质油的反应过程；

烷基化反应：乙烯与苯的烷基化制乙苯的反应过程；

加氢裂化反应：正庚烷加氢裂化制丙烷和丁烷的反应过程。

#### (2) 热裂解反应过程

典型的热裂解反应过程有：煤干馏生成焦炭、煤焦油、焦炉煤气的反应过程；轻油裂解制乙烯的反应过程。

### (3) 电解质溶液离子反应过程

各种无机盐生产以及氨碱法制碱的反应过程。

### (4) 生物化学反应过程

发酵法生产氨基酸、有机醇、酮等的反应过程。

#### 1.1.2 换热过程

化工过程工艺流程中被处理的物流，总是要按进入各单元过程所要求的温度，通过换热器进行加热或冷却。满足这种换热要求的热量或冷量，可以来自流程中的工艺物流或是来自公用工程。这些过程中的换热器与换热物流构成了换热网络。合理的换热网络设计，应能充分回收过程系统中的热量或冷量，例如对反应热、冷凝热的回收利用。这也就意味着对公用工程的节省。

以最大限度的节能、经济的设备投资、良好的操作适应性为目标，实现最佳的换热网络设计，是化工过程系统综合研究的一项典型的事例，也是本书将要重点研讨的一项内容。

#### 1.1.3 分离过程

分离过程要依据分离物料是属于非均一系的还是均一系的，从而确定采用哪种单元操作。

对于非均一系物料的气固相分离，可考虑采用沉降、过滤、湿法除尘、电除尘等单元操作。液固相分离可用过滤、干燥、沉降等。

对于均一系物料的气相分离，可采用吸附、吸收、膜分离。液相分离则可用蒸馏与精馏、蒸发、结晶、汽提、萃取、膜分离等。

在分离过程中最多用的是采用蒸馏塔或精馏塔实施的蒸馏或精馏操作。对于从某种已知组成的液相混合物中分离出某几种目标产物的分离过程，可以设计出采用不同流程、不同塔数的多种流程方案。这些方案相应的设备投资、操作费用等会有很大差异。从中选择经济的、能满足分离要求的最佳方案，是化工过程系统工程设计研究中一项复杂的系统综合任务。

## 1.2 化工过程生产操作控制

化工过程生产操作工况的调节，主要是对物流温度、压力、流量、液位、组成等操作参数的调节。20世纪四五十年代的早期过程控制技术，采用基地式控制仪表实施单输入、单输出的简单回路控制，控制目标主要是保持生产工况平稳。其后又出现了单元组合式控制仪表，并从简单控制回路发展了串级、前馈补偿等控制系统。早期的这种过程控制技术，其特点为各个控制回路都是相互独立的，其优点是当某一控制回路出现故障时，不致影响其他回路的正常工作，系统的可靠性易于得到保障。对于规模范围较大、被

控参数较多的对象来说,较多的控制回路需要相应设置较多的硬件。此外,这种分散的控制,难于实现总体优化的控制方案。这些都是这种分散控制的缺点。

自20世纪60年代以来,化工过程向着大型化、连续化发展,出现了单系列年产30万t合成氨装置、年产30万t乙烯的轻油裂解装置。这些巨型装置要求检测、控制的生产操作参数数量很多,并需要更优良的控制质量。这就对过程控制技术提出了更高的要求。由于当时计算机的发展,计算机应用迅速渗入各个领域,过程控制也开始了应用计算机的尝试。

计算机用于化工过程控制,可以把各个控制回路的运算、控制、显示都集中于计算机来实现。这种集中控制可以大大的节省硬件成本,便于同时分析各个控制回路的信息,为实现全系统的优化控制提供了条件。但这种集中控制,一旦发生计算机故障则将出现全控制系统瘫痪的危险。虽有运行双工计算机的尝试,但仍难达到可靠性的保障。由于这种缺陷的困扰,曾使计算机控制技术一度陷于难于发展的困境。20世纪70年代中期分散系统的出现,使计算机控制技术出现了灿烂的应用前景。

### 1.2.1 集散系统 (DCS)

随着化工装置规模的增大,被控对象参数、控制回路的增多,为了满足对工业控制计算机应具备高度可靠性和灵活性的要求,出现了分布式控制系统(Distributed Control System, DCS),又称集散系统。这是把计算机技术、控制技术、通讯技术、图像显示技术等集成为一体化的计算机控制系统。集散系统吸取了分散系统和集中系统两者的优点,集是指管理、操作、控制(CRT)这三个方面的集中,散是指功能分散、负荷分散和危险分散,这就克服了分散系统难于实现全局系统控制的缺点,也克服了集中系统的危险集中。

国际上有很多专业公司向市场推出了DCS产品,如美国Honeywell公司推出TDC-3000、Foxboro公司推出SPECTRUM、Fisher公司推出PROVOX、Bailey公司推出NETWORK90、Taylor公司推出MOD-300,日本的横河公司推出CENTUM等等。

我国化工、石化装置从1981年开始引进、应用了DCS。当前国内化工装置使用的DCS约有400多套,石化装置使用的DCS约有300多套。

当前DCS的发展前景是:向扩大应用覆盖面方向发展;向管控一体化方向发展;DCS产品向开放化和标准化方向发展;向现场在线技术发展。

### 1.2.2 DCS的先进控制与优化控制

当前,国内化工、石油化工系统应用的DCS绝大部分是从国外引进的,总计有800套左右,各企业应用水平参差不齐。一般而言DCS作为计算机

控制系统，远远没能充分发挥出计算机的作用。考察一下这些 DCS 中的控制回路基本还是依循比例积分微分 (PID) 规律的。每一条控制回路的设定值还都是通过键盘由人工设定的。

PID 控制模式是以单元组合控制仪表为基础的。由计算机执行控制运算远比控制仪表功能高超很多。目前已经出现了很多先进的控制规律，自适应控制、预估值控制、模糊控制、智能控制等等。以这些先进的控制置换 DCS 中现有的 PID 控制，在控制质量上将会有显著的提高。

在化工生产实践中为实现高产、优质、低耗的最佳工况，应向 DCS 各控制回路给定最佳设定值。但化工过程运行工况是随多种因素的改变而不断变化的。因而，应该随着运行工况的变化估选相应的设定值。为此，应在 DCS 上位机安装运行过程的数学模型，按既定的目标函数进行优化计算。从而实现 DCS 优化控制。

针对国内 DCS 现状实施先进控制和优化控制的技术改造，是提高 DCS 效能的重要技术措施。

### 1.3 化工过程的分析与合成

20 世纪 60 年代初，在化学工程、系统工程、运筹学、数值计算方法、过程控制论等学科边缘，产生了过程系统工程，也称化工过程系统工程。这个新学科的任务，就是以系统工程的思想、方法用于解决化工过程系统的设计、开发、操作、控制等问题。其主要任务就是进行系统的分析与合成。实施化工过程分析、合成的手段是运算描述过程系统的数学模型，这种模型的运算称作化工过程系统模拟。

#### 1.3.1 化工过程系统的分析

化工过程分析，主要是分析过程系统的运行机制、影响因素、过程模型的数学描述、目标函数的建立、优惠工况下的最佳操作参数等等。例如：我国某年产 30 万 t 乙烯装置改扩建为 45 万 t 装置，竣工投产后达到了预期的产量，但能耗超标。装置的扩建增容可以降低产品的成本，但从过程内涵探求节能降耗的措施也是降低成本的重要途径。如何选择这类问题的对策，就要对这套工艺装置进行分析，要在对过程系统进行系统分析的同时，也要作必要的单元分析和物料、能量利用的分析。分析的目标是使所选择方案在技术上先进、可行，在经济上优越、合理。

对于操作工况的分析也就是通常说的生产操作调优。众所周知，化工过程操作工况由于受到各种因素的影响是经常变化的。因而，为了实现优惠工况需要经常进行操作调优。生产操作调优又分为离线调优、在线调优。离线调优由于易受人为主观因素的干扰，难于收到理想的效果。由于当前国内的



DCS 装置应用已相当普遍，实施在线闭环控制调优已是当务之急。

### 1.3.2 化工过程系统的合成

化工过程系统合成包括有：反应路径合成、换热网络合成、分离序列合成、过程控制系统合成，特别是要解决由各个单元过程合成总体过程系统的任务。如上节的例子：该套扩建不久的年产 45 万 t 乙烯装置，又面临着进一步扩建为 60 万 t 规模的任务。这就要吸取前次扩建的经验，应该在既要达到产量要求又要达到能耗指标的前提下完成扩建方案。这是一个大系统的合成问题，是一个按既定目标函数寻优的系统合成问题。由于化工过程系统的复杂性，这类优化问题常是具有非线性、奇异、有约束、多极值等现象。传统的寻优方法由于它们在求解策略上的局限性，对这类问题的求解往往是无能为力的。近年来出现的模拟退火法和进化算法，在化工过程合成的优化求解问题中得到了相当广泛的研究和应用。在各种进化算法中遗传算法颇受关注。

## 1.4 化工过程模拟系统

20 世纪初期，对于化工过程的开发、设计，只是采用由实验室到中间厂逐级放大的经验方法。到了 30 年代出现了以相似论为基础得出准数方程的办法。与此同时还出现了建立数学模型的模拟放大法。50 年代后期，由于计算机的应用以及数值计算的发展，应用数学模拟的方法基本上解决了大部分单元过程的开发放大问题。即只需一些最基本的单元过程实验数据，就可以利用数学模型在计算机上解决其开发放大问题。据报道，丙烯二聚反应由实验室数据可放大到工业反应器设计，放大倍数可达 1700 倍。甲苯歧化反应过程的放大倍数为 6000 倍。提升管催化过程的放大倍数达到 80000 倍。

20 世纪 50 年代末期，人们开始尝试在计算机上实现由各种单元过程组成的化工过程工艺流程的开发设计问题。第一个完成这种工艺流程模拟计算的是美国的 Kellogg 公司。该公司于 1958 年开发了 FLEXIBLE FLOW-SHEET。这个模拟系统可以用于计算整个工艺流程的物料平衡、能量平衡以及进行开发设计的多方案评比问题。Kellogg 公司应用这个模拟系统在 60 年代，开发了单机组、大容量、低能耗的合成氨新工艺流程装置设计。

这种在计算机上模拟化工过程工艺流程的软件，称为化工流程模拟系统。应用化工流程模拟系统进行化工过程工艺开发设计的这种技术，称作计算机辅助过程设计 CAPD (Computer Aided Process Design)。

### 1.4.1 化工流程稳态模拟系统

化工流程模拟系统是稳态模拟系统。稳态模拟的特点是，描述过程对象的模型中不包括时间参数，即是把过程中的各种因素都看成是不随时间而变