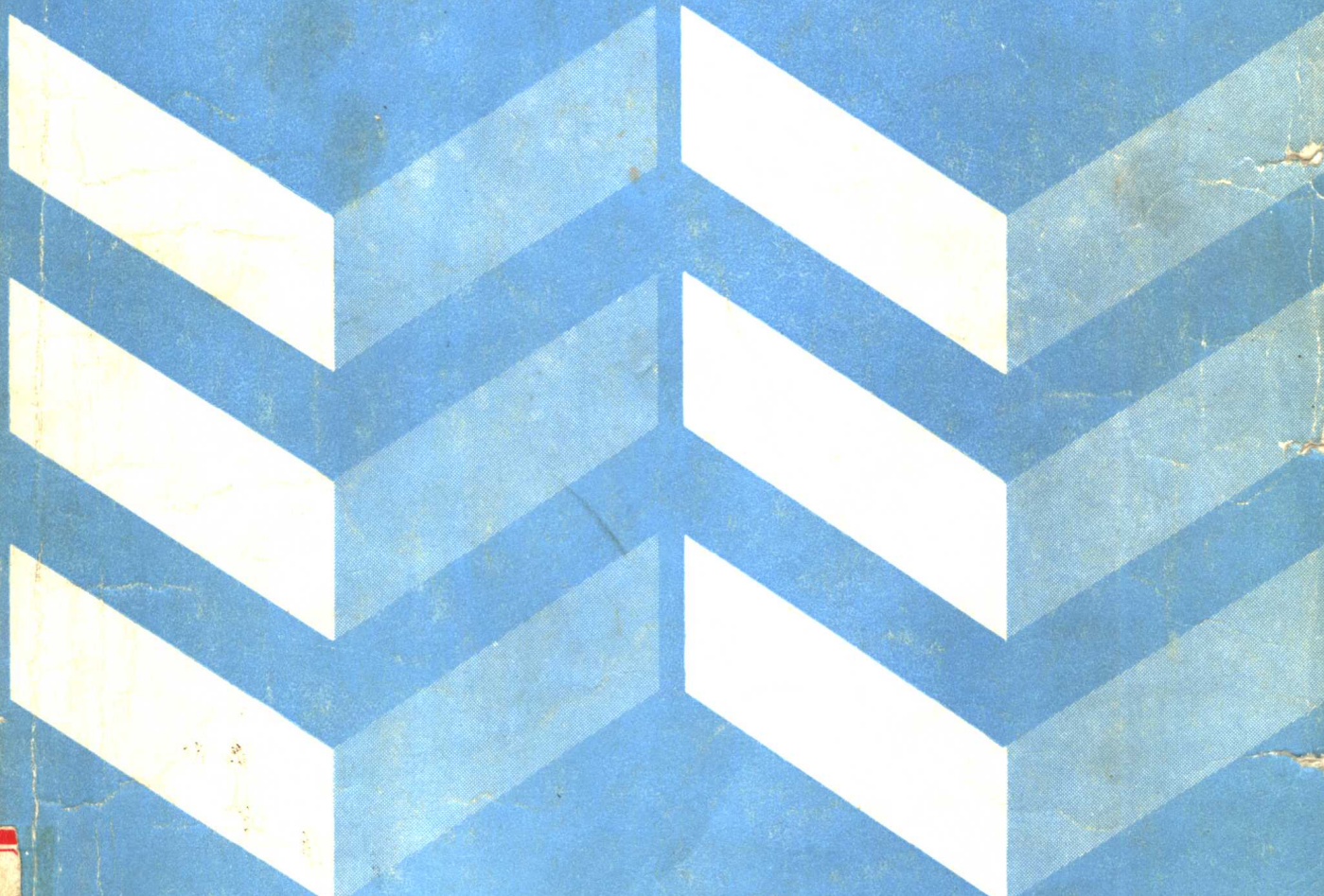




高等学校教材

化工系统分析与模拟

彭秉璞 编



化学工业出版社

化工系统分析与模拟

化学工

Q018

社

高等学校教材

化工系统分析与模拟

彭秉璞 编

化学工业出版社

内 容 提 要

本书为化学工程专业课教材，系按照化学工程专业教学指导委员会的要求而编写。内容包括：绪论；化工系统模型；物性数据库；代数方程组数值解法；化工单元操作模拟的基本方法；化工流程模拟基本方法；系统分解；化工流程模拟的信号流图法；热力学第二定律分析；化工流程模拟新进展等十章。

本书除作为化学工程专业课教材外，高等工科院校师生以及石油、冶金、轻工等部门的工程技术人员亦也参考。

高 等 学 校 教 材 化 工 系 统 分 析 与 模 拟

彭秉璞 编

责任编辑：骆文敏

封面设计：季玉芳

*

化 学 工 业 出 版 社 出 版

(北京和平里七区十六号楼)

化学工业出版社印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行

*

开本787×1092¹/₁₆ 印张14 字数349千字

1990年11月第1版 1990年11月北京第1次印刷

印 数 1— 2,200

ISBN 7-5025-0773-6/G·220 (课)

定 价 3.00元

目 录

第一章 绪 论

§ 1.1 化工系统分析与模拟——化工	索	8
系统工程的重要环节	1. 模拟的基本环节	8
1. 模拟——系统分析的有力手段	(1) 核心环节	8
(1) 系统、化工系统	(2) 辅助环节	9
(2) 系统的工况特性与系统分析	2. 模拟型问题与设计型问题	9
(3) 模拟	3. 化工流程模拟系统	10
2. 化工系统的稳态模拟——“化工流程模	(1) 专用化工流程模拟系统	10
拟”	(2) 通用化工流程模拟系统	10
3. 化工系统分析与模拟在化工系统工程	a. CHESS	11
中的地位和作用	b. FLOWTRAN	12
§ 1.2 模拟的几个基本问题与本书线	c. ASPEN	12

第二章 化工系统模型

§ 2.1 模型与建模	(2) 设计变量的选择	24
1. 基本概念	(3) 设计变量的赋值	29
2. 模型的主要形式与建模	§ 2.3 流程结构的表述与化工系统模	31
(1) 三类模型	型	31
(2) 模型的主要形式	1. 流程结构的图形表述与矩阵表述	32
(3) 建模	(1) 图形表述	32
(4) 合理选择模型形式	a. 流程图	32
(5) 模型与模块	b. 信息流图	32
§ 2.2 模型的“方程-变量”构成与自由度分	c. 信号流图	33
析	(2) 矩阵表述	33
1. 系统模型方程的分类	a. 过程矩阵	34
2. 模型的“方程-变量”构成	b. 流线联系矩阵	34
(1) 单元模型方程的分类	c. 关联矩阵	34
(2) 变量的分类与数目	d. 邻接矩阵	34
3. 自由度分析与设计变量的选择	2. 化工系统模型示例	35
(1) 自由度分析		

第三章 物性数据库

§ 3.1 基本任务与要求	1. 专用化工流程模拟系统中物性数据的	40
1. 概说	处理方式	40
2. 化工流程模拟系统中的物性数据	2. 通用化工流程模拟系统的物性数据	41
库	库	41
§ 3.2 典型示例说明	(1) 基本物料	41

(2) 物性数据与模块设置.....41	(4) 用户另行补充物料的方式.....44
(3) 物性模型与特性参数.....42	3. 物性数据库的新进展45

第四章 代数方程组解法

§ 4.1 基本概念.....47	2. 牛顿-拉夫森法.....77
1. 方程的两种表达形式.....47	3. 直接迭代法与部分迭代法.....80
(1) 隐式的和显式的表达形式.....47	4. 韦格施坦法与割线法.....82
(2) 两种表达形式的相互转换.....48	(1) 韦格施坦法.....82
2. 单变量方程基本解法.....51	(2) 割线法.....83
(1) 迭代法基本概念.....51	5. 拟牛顿法——基本概念.....83
(2) 隐式迭代基本方法.....53	6. 布洛伊顿法.....84
a. 牛顿法.....53	7. 广义割线法.....87
b. 割线法.....55	8. 优势特征值法.....91
(3) 显式迭代基本方法.....56	9. 直接线性化法.....94
a. 直接迭代法.....56	10. 切割法.....96
b. 部分迭代法.....58	§ 4.3 与方程组求解有关的几个问题.....99
c. 韦格施坦法.....60	1. 方程组求解与最优化方法.....99
(a) 韦格施坦法——显式迭代形式的割线法.....60	(1) 收敛判据与最小平方和目标函数.....99
(b) 韦格施坦法的加界与间歇应用.....61	(2) 最优化方法用于确定阻尼因子.....100
(4) 其他解法.....62	(3) 最优化方法直接用于方程组求解.....100
a. 直线线性化法.....62	a. 最小二乘法.....101
b. 区间对分法.....65	b. 马夸特法.....101
3. 线性方程组基本解法.....65	2. 参数估值问题.....102
(1) 消去法.....66	3. 关于方程组解法的改进与新方法的探求.....104
(2) 迭代法.....67	4. 化工流程模拟中的方程组求解问题.....104
(3) LU分解法.....71	
(4) 稀疏方程组.....73	
§ 4.2 非线性方程组解法.....75	
1. 迭代法——应用广泛的一类方法.....75	

第五章 化工单元操作模拟基本方法

§ 5.1 平衡闪蒸.....107	(2) 确定泡点、露点温度.....116
1. 建模与闪蒸类型.....107	(3) 精馏塔计算.....118
2. 解法.....110	§ 5.2 管网中的流量分配.....118
(1) 传统解法.....112	1. 模型.....118
(2) 解法的改进.....114	2. 解法.....119
a. 改进解法1.....114	(1) m 次拟齐次方程组的新解法.....119
b. 改进解法2.....114	(2) 线性方程—拟齐次方程混合方程组.....120
c. 关于解法的进一步改进.....115	§ 5.3 化工单元操作的线性模型.....121
3. 闪蒸模块的灵活应用.....116	1. 通式与变换矩阵.....121
(1) 确定物流的焓和相态.....116	

2. 换热	122
3. 混合	122
4. 分流	123
5. 分离	123
6. 化学反应	124

(1) 单一反应	124
a. 利用转化率建立线性模型	124
b. 反应深度——定义与应用	126
(2) 复合反应	127

第六章 化工流程模拟基本方法

§ 6.1 序贯模块法	130
1. 基本概念	130
2. 再循环单元组与流程的分块	131
3. 再循环回路的切割与收敛块	132
4. 设计型问题处理法与控制块	134
5. 序贯模块法中方程组解法的应用	135

(1) 收敛块	135
(2) 控制块	136
6. 序贯模块法的缺点与问题	138
§ 6.2 联立方程法与联立模块法	139
1. 联立方程法	139
2. 联立模块法	141

第七章 系统分解

§ 7.1 有向图	144
1. 基本概念	144
(1) 图与有向图	144
(2) 结点间的关系	145
(3) 通路与回路	145
(4) 循环图与非循环图	146
(5) 最大回路	146
2. 有向图的矩阵表述	146
§ 7.2 流程分解	146
1. 分块	146
(1) 单元串搜索法	147
(2) 回路搜索法	148
(3) 可及矩阵法	150
a. 邻接矩阵的幂及其意义	150
b. 可及矩阵	152
c. 可及矩阵法	153
d. 作法的改进	154
(a) 逻辑矩阵乘法的简化作法	154
(b) 计算 R_n 的简单公式	155
(c) 可及矩阵 R 以及矩阵 W 的代替形式	155
(4) 关于流程分块的其他方法	156
2. 切割	156
(1) 回路矩阵法	157
(2) 信号流图法	159
(3) 基本切割算法	161
a. 切割理论	162

(a) 最小覆盖问题	162
(b) 回路矩阵的简化	164
i. 行优势	164
ii. 列优势	165
iii. 必选列	165
iv. 双向线回路	166
b. 切割理论在信号流图上的应用	166
(a) 不合格结点	167
(b) 必选结点	167
c. 切割理论在邻接矩阵上的应用	167
d. BTA程序	167
3. 关于流程分解的新进展	168
§ 7.3 方程组分解	168
1. 不相关子方程组的识别	169
2. 分块	170
(1) 输出变量集	171
(2) 输出变量集的寻求	172
(3) 有向图的构成和结点串搜索法	173
(4) 邻接矩阵的构成和回路搜索法、可及矩阵法	174
3. 切割	175
4. 关于方程组分解的新见解	176
5. 设计变量的选择	176
(1) 变量、方程剔除法	177
(2) 添补方程分块法	178

第八章 化工流程模拟的信号流图法

§ 8.1 求解线性方程组的信号流图法	181	e. 结点移动与消除规则	184
1. 基本概念	181	(2) 图的简化示例	185
(1) 基本定义	181	4. 方程组求解示例	186
(2) 基本规定	182	§ 8.2 广义信号流图	187
2. 由方程组构成信号流图	182	1. 基本概念	187
3. 信号流图的简化	183	2. 图的简化	188
(1) 图的简化规则	183	§ 8.3 化工流程模拟的信号流图法	189
a. 并列加法规则	183	1. 化工流程的信号流图表达	189
b. 串列乘法规则	183	2. 氨合成流程物料衡算示例	190
c. 自环消除规则	184	§ 8.4 关于信号流图法的编程问题	192
d. 支路移动规则	184		

第九章 热力学第二定律分析

§ 9.1 基础知识	195	d. 广义的可用能——焓	200
1. 可用能	195	e. 焓和熵的参考态问题	201
(1) 热能中的可用能部分	195	2. 损失功	201
(2) 作为物性参数的可用能	197	3. 热力学效率	203
a. 适用于封闭系统场合的可用能	197	§ 9.2 热力学第二定律分析示例	206
b. 适用于流通系统场合的可用能	199	附录1 熵的简化计算	207
c. 可用能函数	200	附录2 关于热力学第二定律分析适用性的判据	208

第十章 化工流程模拟新进展

§ 10.1 联立模块法的再认识	210	区别	214
1. 联立模块法的新格局	210	(2) 联立模块法与序贯模块法在设计型问题上的一点差异	215
2. 三种求解方式	211	§ 10.2 化工流程最优化问题	216
3. 加深对联立模块法的理解	214		
(1) 联立模块法与联立方程法的本质			

第一章 绪 论

现代化工生产是一个复杂的过程。从化工系统工程的观点,实现化工生产过程的企业、工厂、车间、乃至一套装置,都可看成是由互有联系、彼此影响的不同层次的子系统构成的复杂系统。例如一套化工装置,也通常是由实现不同化工单元操作的一系列化工设备组成的。对于一个复杂系统,要进行诸如规划、设计、以及建成后进行操作、控制、乃至管理等项工作,且预期该系统在运行中能体现某种最优要求(例如获取最大经济效益),这就必须以能对系统作出透彻的分析以期对其某方面的特性取得细致了解为前提。显然,在系统的复杂性增加时,这种分析工作的难度也增大。这时,运用计算机这一现代化工具进行模拟,就是实现系统分析的十分强有力的手段。

本章从化工系统工程的角度介绍化工系统分析与模拟的意义和作用。提出“模拟三要素”,它也是组织本书主要内容的线索。最后介绍一些有关的基本概念和关于化工流程模拟系统的简单情况。

§ 1.1 化工系统分析与模拟——

化工系统工程的重要环节

1. 模拟——系统分析的有力手段

(1) 系统、化工系统

为了在给定条件下实现一定目的,由若干互有联系、彼此影响的事物组成的一个统一整体,称为系统。

组成系统的事物,相对于系统而言,称为单元。这里采用了“事物”这一灵活的说法,表明组成系统的单元,可以是实物,如实际的化工设备,例如精馏塔、反应器等,也可以是不具有实体形态的东西,如计算机程序等。因此,在提到系统时,它可能是指“硬件”意义上的系统,也可能是指“软件”意义上的系统,读者不难从上下文自行判断出来。

系统与单元既是相对而言的,就不难理解,一个复杂系统中的单元,本身可能也是一个系统,是下一个层次的系统。因此,相对于它的上一层次的系统而言,可称之为子系统。

同系统要在给定条件下实现一定的目的相应,系统(指运转起来之后的系统)中必定有某种过程进行。因此,不同的系统也可以用其中进行的过程来区别。例如,化工系统,指的就是其中进行化工过程的系统。

化工过程,是指通过某些操作,使物料发生某种物理的、化学的变化,而生产出所需的化工产品的过程。这些操作的最基本的形态,就是各种化工单元操作。化工过程可以简单,也可以复杂。一个单一的化工单元操作的过程,就是最简单、最基本的化工过程。而化工产品的工业化生产,大多是要通过一系列化工单元操作来完成的,它们就组成了一个复杂的化工过程。这样的化工过程要在一系列化工设备中进行,这些设备就构成了一个化工系统——复杂的化工系统。当然,按照上述系统可分层次的概念,一台化工设备也可看成是一个化工系统——简单的化工系统。在本书中,化工过程、化工系统通常是指复杂的化工过程和化工

系统。

在不致发生混淆的范围内，化工过程和化工系统也常被简称为“过程”和“系统”。十分明显，为了实现给定目的，系统中必有过程进行，反过来，过程亦必发生在相应的系统之中。正因它们的联系如此密切，过程和系统二者在某些文献中常被混用，例如，过程一词常又被用来兼指进行该过程的系统，这种情况在国外文献中更属常见。

上面提到，化工过程是指物料在其中要发生物理的、化学的变化的过程。实际上，在通常的化工系统里，物料在多数操作中发生的变化，主要是物理的变化。如加热、冷却、混合、分流、蒸发、冷凝、溶解、结晶、干燥、沉淀、压缩、冷冻、一般精馏，乃至大多数普通的萃取、吸收，等等，物料在这些化工单元操作中发生的变化，都只是物理的变化。至于化学变化，它当然是生产各种化学品的行业中的关键的和核心的步骤，但物料于其中发生化学变化的设备（主要是各种类型的化学反应器），在一个化工厂中常是为数并不很多。如果只看厂里的一个工段（相当于化工系统中的一个子系统），更是很可能其中只有物理变化的过程，根本牵涉不到任何化学变化过程。如化肥厂中的压缩工段就是如此。而另一方面，目前被称为化工单元操作过程的各种基本的化工过程，又并不是仅存在于化学工业中；在化工行业以外的许多行业中，如轻工（包括造纸、食品、等）、石油、冶金、原子能等行业中，这些所谓的化工过程也都大量存在，而且十分重要。由此可知，化工过程，它带有一个“化”字，乃是从历史上沿用下来的一个名称，目前已经并不完全名实相符。相应的，化工系统（它实际上是化工过程系统的简称）这一名称，也同样不那么确切。为此，目前有些学者主张将化学工程改称为“过程工程”，相应地，将化工系统改称为“过程系统”，这未尝不是一个好的建议。

为了照顾传统习惯，本书中仍将沿用化工过程、化工系统的名称。在作了如上说明之后，当不致引起误解。

（2）系统的工况特性与系统分析

本章开始时提到，为了作好一个系统的规划、设计等工作，须以能对系统作出透彻分析为前提。分析的内容可以很广泛。分析一个系统，究竟是指分析它的哪一方面的情况，需要予以明确，才有利于讨论。本书中的系统分析，除了第九章中的热力学第二定律分析稍有不同以外，主要是指对系统的工况特性进行分析，以取得对这方面情况的细致了解。

一个系统在其范围被划定之后，系统范围以外的一切事物被总称为**外界**。有实际意义的系统不会是与外界相隔绝的孤立系统。例如一个化工系统，为了实现一定的生产目的，其所需原料总须取自外界，而所生成的产品亦将向外界提供。这就是说，系统必将有来自外界的输入，和向外界提供的输出。系统的输入和输出并不仅限于物料，通常还包括能量（在物料进入和排离系统时，必然要以焓的形式同时向系统输入和自系统输出了能量。此外还可能通过专门的加热或冷却的方式进行热能的输入和输出。电能的输入，例如为驱动系统内的泵或压缩机所需的，亦属常见。至于系统另外还有多余能量可向外界输出的情况，也是有实例的，例如硫酸厂焙烧炉排出的热气体就可通过废热锅炉和相应机组实现余热发电）。此外，如果广义地看，还应包括信息，例如外界向系统发出某种指令，对系统内的过程进行调节，就属于系统的信息输入。

向系统输入的和自系统输出的、以及在系统内部各单元或子系统间传送的物料、能量、以及信息，可以形象地用**物料流**、**能量流**、以及**信息流**来表达。这样，在表达系统的示意图中，它们就可以用标有箭头（指明传送方向）的线来表示（参看图1-1）。

一个系统的功能，主要体现为能够对来自外界（可暂按物料形式的输入表理解）进行加工，将其转变成预期的输出后，向外界提供。显然，系统自身必须首先具备某些相应的特定条件，才能使上述预期的输入-输出的转变得以实现。系统本身必须具备的具体的特定条件，可概括地简称之为**系统特性**。

系统特性的含义是什么，可通过简例来说明。先看一台化工设备被看成是一个简单化工系统的情况。如果是一台管壳式换热器，则它的尺寸，管数，管径，挡板型式和挡板间距，管程、壳程中的流体流速……，等等，就确定了这台换热器的系统特性。如果是一台板式精馏塔，则它的尺寸，塔板型式，板数，板间距，回流比……，等等，就确定了这台精馏塔的系统特性。而设备的类型、尺寸……等等，以及其他类似的有关数据，都是属于**设备参数**（*equipment parameters*）。因此，这些例子表明，简单系统的系统特性可以通过系统中的设备参数予以定量的描述。但是，如果是复杂的系统，其中包括有多个单元或子系统，则单元或子系统之间的联接和匹配的关系，即整个系统的构成情况，显然也将对系统特性有明显影响。

对于给定的系统，其系统特性是确定的。这样，只要有给定的输入进入系统，经过系统特性的作用，必能产生出确定的输出；这就形成了一种规律性的因果关系。以下，一个系统的这种“输入-系统特性-输出”的规律性关系，就简称为系统的**工况特性**。而对一个系统的工况特性进行分析，或形象地说，在系统特性和输入为已知的前提下，预测其输出（参看图1-1），就成为**系统分析**的最主要内容。

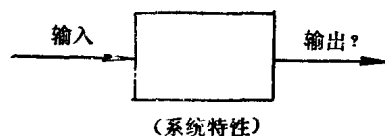


图 1-1 系统分析

系统分析的任务有简有繁。例如一台化工设备，如果也看成是一个低层次的简单的化工系统，则它的工况特性中规律性关系的基础，就是物料衡算与热量（能量）衡算的基本关系，以及也是建立在这些基本关系的基础之上的所谓的“三传一反”，即热量、质量、动量的传递以及化学反应工程的基本规律。因此，这一个层次上的系统分析，就相对比较简单，特别是对于其中进行的过程比较简单（例如混合、换热、简单的反应等）的化工设备，或在只需进行简捷计算的场合，基本上是属于化工原理（以及化学反应工程）的学科范围，许多情况下靠手算去作也不难完成。当然在目前，计算机条件已经比较方便，如果计算量较大，也不妨采取上机计算的作法。

但如果一个系统是由多个单元（如多台化工设备）组成的复杂系统，则情况就不那么简单。这时，整个系统的系统特性，就不仅仅是取决于其中各个单元（作为子系统）的系统特性，而且，已如上述，还要取决于整个系统的构成情况。这样，对于复杂系统，系统分析的任务，如果表述得细致些，就是要在系统输入和系统中各个单元的系统特性以及整个系统构成情况为已知的前提下，预测系统的输出。这显然比分析单台化工设备工况特性的任务要复杂得多。

不言而喻，进行这样的比较复杂的系统分析的任务，单靠手算已往往难于完成，而通常要借助于电子计算机（以下简称计算机）这一现代化工具。

（3）模拟

模拟（*simulation*）^①，是进行系统分析的强有力的手段。

^① 在一些其他学科领域，*simulation*也有译作“仿真”的。

一般含义上的模拟是指：借助于一个系统或过程的性能，对另一个系统或过程的性能作出模仿性的演示。这样，借助于试验水槽里的船舶模型来研究船舶的性能，借助于风洞中的飞机模型来研究飞机的性能，等等，就都是模拟的很好例子。这些，可以称为物理模拟。

与物理模拟相对应的，是数学模拟。这一般是指，把要加以研究探讨的系统或过程的性能，用一个数学模型（通常是一组数学方程）描述出来，然后采取某种解算手段去对数学模型进行求解，从而达到研究的目的。这时，用来对原来系统或过程作出模仿性演示的，也就是那数学模型，以及解算该数学模型的手段了。

自计算机技术迅猛发展以来，计算机就自然而然地被广泛地采用为进行数学模拟的主要手段。有两大类计算机，即数字计算机 (*digital computer*)，和模拟计算机 (*analog computer*)。在数字计算机取得飞速进展，其应用范围已日益扩大的今天，在化工计算领域中，数字计算机的应用已经占据了主要地位。本书以下计算机一词，均指数字计算机。

因此，特殊含义上的、文献中给出的特别适用于化工系统的模拟的如下定义^①，就十分容易理解：

模拟，就是指对描述某一实际过程的数学模型进行求解。数字模拟 (*digital simulation*) 是指应用数字计算机求解数学模型，用以根据装置的输入变量和装置的特性，计算出它的输出变量的数值。

按此，本书中所讲的化工系统的模拟，或简称系统模拟，都是指这一定义下的模拟，即应用数字计算机的模拟。

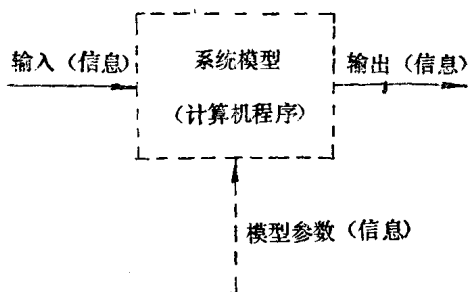


图 1-2 系统模拟

综上所述，系统模拟这一项工作的内容，可如图1-2所示形象地表示出来^①。描述系统性能的数学模型（简称“系统模型”）被编成计算机程序，送入计算机。表达系统输入，以及表达系统特性的各项数据（其中表达系统特性的数据，称为系统模型中的模型参数），作为使系统模型能够实现求解的必要信息，也送入计算机。然后计算机就可以根据这些信息和调

用同时也被编入程序的模型解算方法，对系统模型进行求解，最后得出表达系统输出的数据；这些数据的信息通过某种形式（例如通过打印机进行打印或在屏幕上予以显示），就被输出出来。这样，就完成了以上所说的进行系统工况特性的分析，也就是系统分析的任务。

2. 化工系统的稳态模拟——“化工流程模拟”

化工系统（具体指一座化工厂，一个化工车间，一套化工装置，等等）的操作，有稳态的，也有非稳态、即动态的。如间歇操作的反应釜，它进行周期性的生产：加料-反应-出料（其中还可能包括加热或冷却，等等），周而复始，这就是非稳态操作的一个典型例子。而另一方面，进行稳态生产的化工系统就更多。如大多数一头稳定地连续进料，中间经过一系列稳定连续的加工操作，最后从另一头稳定连续地提供出化工产品的工厂、车间或装置，都是属于进行稳态操作的，实际例子多到可以不必专门列举。这样的化工系统量大面广，而且

^① 图中框内只写了系统模型，是为了突出系统模型所起的表达输出取决于输入和模型参数这一关系的作用。实际上计算机程序中，如文中所述，也编入了求解模型所需的算法。

流程 (*flowsheet*, 又译作**流程图**, 原指将各种单元设备等用图形符号画出, 并示出其间联接关系, 从而将整个化工系统的构成情况描绘出来的图形表达; 现也用来一般地指一个化工系统的构成情况) 也通常比较复杂。流程上的复杂当然带来系统分析上的困难, 从而促使人们更早地考虑在这一工作中采用模拟手段。另一方面, 各种稳态单元操作的有关计算(原理、数学模型和算法) 已经在化工原理以及其他有关化工计算的范围内经过几十年的研究、开发, 逐渐积累得比较丰富, 它们又容易在对系统内各单元进行模拟的层次上加以引用。由于这样一些原因, 稳态化工系统的模拟, 或又叫做化工系统(或化工过程)的稳态模拟, 以及实现这种模拟的整套计算机程序, 亦即相应的软件系统, 就发展得较动态化工系统的模拟为早, 目前也较为成熟。本书亦仅限于讲述这一方面的内容, 动态模拟不属本书范围。

在其发展初期, 这方面内容在名称上被直接称为“化工系统稳态模拟”, 或“稳态化工过程模拟”, 等等, 是很自然的。文献[2]的标题就是一个典型的例子^①。但到了70年代后期, 在国外(英文)文献中逐渐出现了一个新名词: *process flowsheeting*, 在很多情况下取代了原来的名称, 并很快为人们所习惯。著名专著文献[3]的书名就是一个典型的例子。这种演变可能是由于避繁趋简的原因。这一英文名词如直译, 将很困难。因此目前中文资料中多译作“化工流程模拟”, 或简称“流程模拟”。本书以下在一般情况下也将采用这一名称。

文献[3]在书的一开始就对此被译为化工流程模拟的 *process flowsheeting* 作了如下定义:

化工流程模拟, 是指应用计算机辅助手段, 对一化工过程进行稳态的热量和物料衡算、尺寸计算和费用计算。

这里, 尺寸计算和费用计算是指对流程中有关设备的尺寸予以确定, 以及对设备费用乃至运行费用等所进行的计算。按照这一定义, 对一个化工系统进行稳态模拟, 如果广义地看, 也应将尺寸计算、费用计算包括进去。由于这两方面计算确实重要, 这种定义也是可以理解的。但是, 化工系统的稳态的物料衡算和热量衡算, 毕竟是上面所讲的稳态化工系统工况特性分析的基础, 从而也是整个稳态模拟工作, 包括尺寸计算、费用计算在内的基础, 同时相对而言, 也是更为困难的主要部分; 有了这个基础之后, 尺寸计算、费用计算就不难完成。由于这个原因, 本书中将只限于讲述这一部分, 而不涉及尺寸计算、费用计算的内容^②。

3. 化工系统分析与模拟在化工系统工程中的地位和作用

化工系统工程是化学工程领域中的一个新兴学科, 迟至80年代初, 即1982年, 才在日本召开了化工系统工程的首届国际会议(会议简称: *PSE'82*)^③。由于是新兴学科, 其内容或定义都尚未完全定型。现参照这一领域中著名的日本学者高松武一郎在 *PSE'82* 上所作主旨报告^[4]中的说法, 提出化工系统工程的一个简明定义如下:

化工系统工程是研究如何制定复杂化工系统的最优决策——最优规划、设计、

① 文献[2]是化工系统稳态模拟发展到已趋比较成熟时出现的第一篇优秀的综述文章, 对有关问题阐述得比较详尽和全面, 其后经常被其他作者引用。这篇文章已有中文译文, 题为“化工过程的稳态模拟”, 刊登在《化学工程译丛》1979年第3、4期上。

② 实际上, 文献[3]一书中也并未包括尺寸计算、费用计算的内容。

③ 会议简称中的 *PSE* 所代表的是“*Process Systems Engineering*”, 这就是已通常被译作“化工系统工程”的原文(英文)名词。

操作、控制、管理^①——的工程学科。

这一定义表明，化工系统工程包含有比较广泛的内容。但是可以认为，化工系统的最优设计，乃是化工系统工程重要的也是核心的一环。因此，在阐述化工系统分析与模拟在化工系统工程中的地位和作用时，可以主要从化工系统最优设计的角度来看一下。

对于为实现特定生产任务而进行某种化工过程（指由一系列化工单元操作所组成的复杂化工过程）的化工系统进行设计，最首要的一步就是作出流程图设计——提出一张能够实现给定设计目的（通常主要是指：用什么原料生产出多少质量合格的产品）的流程图来。这一步工作属于化工过程设计的范畴。如果再加上追求某种最优目标（通常是经济目标，如追求高产值、低消耗这样的直接带来经济效益的目标等；但同时考虑诸如系统的安全性、可靠性、可操作性、无污染等非经济目标，也逐渐被提上议事日程），这就成为实现化工系统最优设计的首要一步。由于问题的复杂性，这一任务的实现，目前常需依靠计算机的帮助，这样，这一步工作就被称为计算机辅助化工过程设计(*computer-aided chemical process design*)^②，或简称机辅化工过程设计^③。

很明显，机辅化工过程设计也将是包含有多环节的一项复杂工作。这一项工作的全部内容，及其各环节间的关系，可用图1-3中示出的框图表明^[3]。

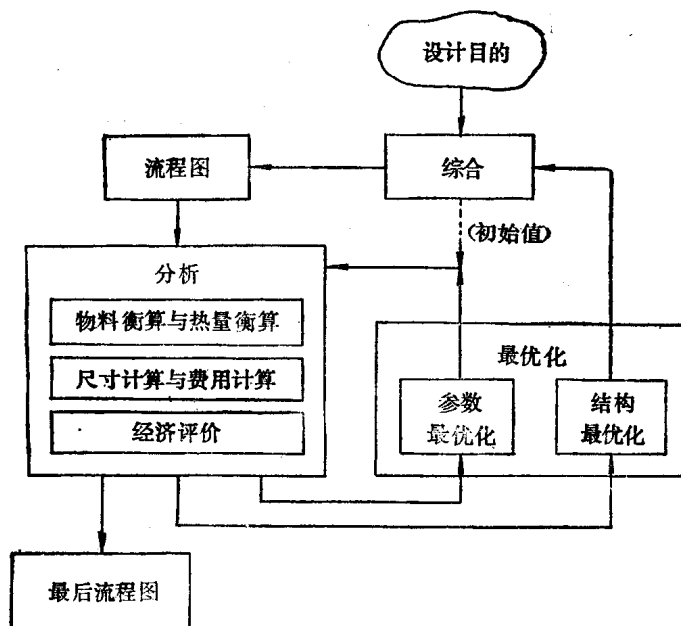


图 1-3 机辅化工过程设计

从图1-3可以看出，机辅化工过程设计的全部工作，要通过在三个基本环节之间进行循

① 在高松的定义中未将管理一项列入。这也许是因为考虑到了系统的最优管理通常已被认为是广义的系统工程 (*Systems engineering*) 的主要内容。鉴于化工系统仍然有其自身特点，化工系统的管理，特别是其技术管理（例如怎样根据石油化工企业的原料供应和产品销售的情况和其他约束条件，对每种产品的产量作出合理安排，以求实现最大经济效益一类的工作）方面的问题，时常仍需涉及化工领域有关原理的运用，因此还是将管理一项也予列入，似更好些。

② *Chemical*—词亦可省去。

③ 由于设计工作通常隐含着要追求某种最优目标，“最优”字样常被略去。

环迭代来完成。这三个基本环节就是：综合，分析，和最优化。其中，综合 (*synthesis*)^① 是化工系统工程中的一个常用术语，它的含义，可以同分析对照起来理解：如前所述，在对一个系统进行分析时，这个系统的结构（即系统是由哪些单元、怎样地组合起来而构成的）是已知的，分析的结果是对这一结构为已知的系统的工况特性作出预计；那么，对一个系统进行综合，则指的正是解决一个相反的问题：为了使一个结构尚属未知而待定的系统能够实现给定工况特性的目的，把该系统应具有的结构合理地确定下来。按此，并参照有关文献[5,6,7]，可以给出化工系统综合的一个如下的简明定义：

化工系统综合，就是指化工系统的结构的确定。

由于一个化工系统有时也被不甚严格地称作一个化工过程（见前），此外，化工系统的结构也常被称作流程结构，因此，在有关文献中，系统综合、过程综合、流程综合等名称（化工二字均被省去）都可见到，且常有混用的情况。

图1-3表明了化工过程设计的整个工作，是怎样地被分解成同上述三个基本环节相应的不同阶段，并以循环迭代的方式进行的：根据设计目的，设计者首先提出一个可以作为整个工作出发点的初步的可行的流程图来（这一步工作从性质上看也是属于综合），随即进入分析阶段，在初始流程图的基础上进行系统分析（其内容包括物料衡算与热量衡算、尺寸计算与费用计算和经济评价，这一步工作正是要通过化工流程模拟来实现的），从而求得这一初始系统的工况特性。分析时要用到的有关参数（如进料的流量和物性参数，以及系统内各单元的设备参数等）的初始值，同样应由设计者合理地提供。然后，进入最优化阶段，分别进行参数最优化和结构最优化——通过前者给出各有关参数的改进值，反馈给分析阶段，供下一轮分析之用；通过后者给出流程结构应作如何改进的信息，反馈给综合阶段，供下一轮系统综合之用。于是，新一轮的综合给出了较前有所改进的流程图，然后又以此为基础开始新一轮的系统分析。如此循环迭代，直至系统的工况特性达到能够满足设计目的的要求（其中包括能够实现某些给定的最优目标）为止。此时给出的最后流程图，就是化工过程设计整个工作的最终成果^②。

以上的讲述清楚表明，化工系统分析与模拟确实是化工过程设计全过程中的一个十分重要的环节。可以说，如果没有化工系统分析与模拟，也就无法进行现今的机辅化工过程设计。这样，也就从一个侧面有力地显示了化工系统分析与模拟在化工系统工程中的地位和作用^③。事实上，即使不配合以最优化等其他环节，只通过化工流程模拟本身，也可以对一个化工系统（一套化工装置，一个化工车间，等等）的工况特性进行细致的分析研究。为此，只要在计算机上逐次改变各种条件（这些条件可以包括得很广泛，例如：进料配比和进料量、操作温度和压力、设备参数……、乃至流程结构等等）的输入信息，就可以得到表明相

① 在有些国内文献中，亦被译作“合成”。考虑到*synthesis*作为*analysis*（分析）的反义词，在哲学上以及许多其他场合中通常被译作“综合”，取此译名似更好些。这样也可同合成氨、合成橡胶……等中的合成相区别。

② 关于化工过程设计整个工作划分阶段的问题，文献中有不同说法。如文献[8,9]中都划分为四个阶段，即，把经济评价从分析阶段中抽出，单独作为一个阶段。（其中文献[8]的作者和文献[9]的主要作者还是同一人。）但这种说法上的差异并不影响对化工过程设计基本内容的理解。

③ 不妨指出，如果是着眼于一个化工企业的规划、设计、建造、直至投产的全过程，则工作范围还要更广泛得多。在提出了被采纳的流程图之后，还有诸如全厂布置，公用工程（水、电、汽等的供应）设计，管线设计与配置，仪表及自动控制系统设计与配置，安全性及可靠性分析，设备、器材的准备（材料的选用，标准设备的定货，加工件的制图、制造），设备、管线、仪表的安装、调试……等等一系列复杂工作要做。这些提到的工作，目前也被归入“项目工程（*Project engineering*）”的范围。从这个角度来看，化工系统分析与模拟又只是整个复杂工作的小环节，这样理解就全面些。但这一环节本身的重要意义，并不会因此而降低。

应的变化了的工况特性分析结果的输出信息。这一项可以提供出广泛结果的工作，有时被称为是“(计算)机上实验”，它丝毫不受实际装置不允许任意改变操作条件、轻易进行现场实验，即使偶而允许安排小规模、小范围的实验，也将耗费大量人力物力的限制，而能针对预期的目的，很容易地提供出多方面的有用信息。不言而喻，它显然对于搜寻现有装置的薄弱环节，探求改进方案，也就是说，对于老厂的挖潜改造工作，也是一种十分有用的手段，而不仅仅是可以用于新厂设计的目的。

§ 1.2 模拟的几个基本问题与本书线索

1. 模拟的基本环节

开展化工流程模拟这项工作的绝大部分内容，实际上是具体体现在要开发出一套能够用来实现这种模拟的一整套计算机程序，或软件系统。用于这一目的的软件系统，叫做**化工流程模拟系统**，以下有时也简称“模拟系统”。剩下的工作，不过是应用这套模拟系统上机运行，取得结果而已。有关人员需要懂得这类模拟系统是怎样构成的，它的基本环节有哪些，在此基础上，才能进一步去开发这类模拟系统。

(1) 核心环节

如前所述，化工流程模拟就是指对一个化工系统进行稳态模拟。为了执行这样的模拟，以下三方面的内容是一套化工流程模拟系统中所必不可少的：

首先是系统模型，即描述化工系统性能的数学模型。一个完整的系统模型，不仅必须包括组成此系统的各个单元的模型，而且还要包括能对系统结构给予明确表述的部分。对于化工系统，其单元模型首先包括描述化工系统中各项化工设备性能的模型。但由于化工系统中物料进行的某些过程，例如简单的混合、分流等，不一定是在被认为是化工设备的地方（例如是在管道的三通里）进行的，而也同样需要有模型来描述，因此，**单元模型**实际上是指各和化工单元操作的模型，而不受化工设备的局限。单元模型是化工系统模型的基础。至于表述化工系统结构即流程结构的部分，虽然同样重要，但处理起来可有不同的灵活作法，见下。

其次是物性数据。化工系统有别于其他工业系统（如机械的、电子的等）的重要一点，就是其中物料会发生种种状态的和组成的变化。为了进行这方面的分析，必然需要有这些物料的各种物性数据。

最后是解算方法。前已指出，模拟实际上就是对一个数学模型进行求解。因此就必须有针对不同模型特点的有效的解算方法。

系统模型、物性数据、和解算方法，这就是模拟的三个核心环节，缺一不可，不妨称之为“模拟三要素”。当然，单单对一台化工设备进行模拟也同样需要有这三个环节^①。但是，由于化工系统是由多台化工设备组成的复杂组合体，它的数学模型，特别是考虑到它还要包括表述流程结构的部分，肯定要比单台设备的复杂得多。而所需要的解算方法也随之而复杂化，要能够处理单元之间互有联系、彼此影响所带来的困难，对整个系统的模型进行有效的求解。在物性数据方面，特别是在建立通用的化工流程模拟系统（见后）时，有必要为用户（指使用模拟系统的人员）提供尽可能多种物料的物性数据，以供针对不同情况任意选用，

^① 目前化工原理等有关学科领域中也同样注重了计算机的应用。在这种情况下，单台化工设备的稳态模拟同这些学科范围内的有关内容已逐渐变得没有多大差别。

这就构成了通常所说的“物性数据库”，而建立这样的物性数据库显然也需要有一套特定的作法。因此，化工流程模拟在这三个环节上，都和单台化工设备的模拟有着明显的区别。

本书的主要内容，也正是按照这三个环节组织的，而以有关解算方法的讲述为重点。具体是这样的：第二章是讲述有关系统模型的问题，第三章是讲述有关物性数据的问题，而第四至第八章都主要是讲述有关解算方法的问题，其中个别章节，如第五章，也牵涉到有关模型的问题。

(2) 辅助环节

上述三个环节的内容，当然都不能以其本来面目进入模拟系统，而必须首先被编成计算机程序，才能成为模拟系统的组成部分。因此，程序设计（*programming*，指计算机程序的编制，目前也较多地被译作“编程”）方面的知识和技巧，就是开发模拟系统所必需的另一方面的基本功。例如，为了使上述三个核心环节在模拟中相互配合，紧密联系地共同起作用，在程序设计上可以采取主程序-子程序结构，具体可以这样作：每个单元模型，连同它的解算方法，被编成一段子程序，有关物性数据的估算方法，也都被编成一些子程序。子程序又常被称为**模块**（*module*），上述这些子程序也相应地常被称为**化工单元操作模块**（简称“单元操作模块”或“单元模块”）和**物性模块**。于是，采取由主程序调用这些子程序（主程序调用单元操作模块，单元操作模块调用物性模块）的方式，就可以实现流程模拟所要求的运算。而在这方面，除了要能编制出正确、能顺利运行的程序，并力求其巧妙、合理（不冗长而笨拙）以外，还应尽可能作到让用户在使用时感到方便。对此，这里提出以下几点：

模拟所需数据的输入，特别是模拟结果的输出，都应力求采取让用户容易掌握和使用、以及清晰易懂、整齐美观的方式与格式。

一套完善的模拟系统应该具有提供错误诊断信息的功能，在程序运行由于出错而中断时，它能使用户方便地查出错误之所在，从而有助于采取相应的改正或变更作法的措施。

应充分利用程序中允许插入注释行的条件，对有关问题加以注解和说明，使人们在查看程序时容易看懂有关程序段的内容，理解编写时的思路和意图。

还可列出其他一些可使程序更加完善的作法。

以上这些，有的是程序所必需的，如输入、输出方式；有的则并不一定是程序本身所必不可少的组成部分，如错误诊断信息和注释行。如何把这些方面的问题处理得更好，让用户使用起来感到更加方便，都是属于程序设计的知识领域，而不属本书范围。这里只是把它们作为模拟的辅助环节简略地提一下，供读者参考。

2. 模拟型问题与设计型问题

按照上面对模拟所下的定义，它的任务是对一个化工系统作出工况特性分析，即根据给定的系统的输入数据（例如进料的组成、流量等）以及表达系统特性的数据（例如各个单元的设备参数等），预计系统输出的数据（例如产品的组成、流量等）。这完全是比照着实际系统工况特性的因果关系在计算机上进行模仿性演示。但是，有时人们所要完成的任务是另一种类型的。例如，人们预先规定了系统输出的某项数据，例如规定了产品组成中某种组分所必须达到的数值，而去寻求能够满足这类规定的要求的，譬如说，系统中某项设备参数的数值。当然，人们希望给予规定的也并非只能是整个系统最后输出的数据，也可以是系统内某个单元的输出数据，例如是某台换热器出口物料流所必须达到的温度，而所要寻求的也不仅限于表达系统特性的设备参数，也可以是其他，例如是系统进料中某一组分的含量，等

等。情况可以是多种多样的。这种类型的问题，是人们进行某项化工设计时所经常遇到的，因此，常被称作是**设计型问题**。而与此相对应，那种单纯地对系统工况进行模拟的问题，就被称作是**模拟型问题**。不难看出，在设计型问题中，同模拟型问题中的情况很不相同，其已知条件和待求结果的关系，和实际系统工况特性的因果关系是不相一致或甚至是相反的。因此，靠直接运用如上定义的模拟的正常作法，处理不了设计型问题。

有必要指出，这里所说的设计型问题，和图 1-3 所示的化工过程设计的问题，并不相同，后者包括了流程结构的设计（即流程综合）和运用了最优化方法，是更全面地体现了化工系统工程特点的高层次的设计任务。而这里所说的设计型问题，通常只是指对流程结构为已知的化工系统进行一般含义下的设计计算，即计算出能满足设计者所规定的要求的某些参数或变量（设备参数，描述物料性质的变量等）所应具有数值，而这些数值，若是在模拟型问题中，本应是由用户给出作为数据输入的。因此它并不涉及流程结构的设计，也不追求实现某种最优目标，从而是相对简单和更为基本的任务，也是设计人员更常遇到的一类问题。

虽然原始意义上的模拟方法能顺当地解决模拟型问题，而不能直接用来解决设计型问题，人们还是提出了一些可以在模拟的基础上解决设计型问题的方法，见第六章、第十章。

3. 化工流程模拟系统

从应用范围方面来看，化工流程模拟系统可分为两大类，即专用的和通用的化工流程模拟系统。二者有共同之处，例如都要具备系统（指被模拟的化工系统）模型、物性数据、和解算方法这三个核心环节，但又有明显的繁简差别。下面，为了文字简洁和减少混淆，化工流程模拟系统有时只称“系统”，而被模拟的化工系统则改称“流程”。

（1）专用化工流程模拟系统

专用化工流程模拟系统是针对特定流程专门开发的模拟系统，只用于对该流程进行模拟的目的，不具有通用性。

由于只具有专用性，这类系统的特点是结构比较简单，如：在模型方面，只需备有该流程中涉及的单元模型即可，而且表述流程结构的问题也通常可在程序设计中解决——在模拟系统的主程序中调用各个单元操作模块的顺序，就体现了流程结构^①。在物性数据方面，也只需备有该流程中涉及的物料的有关物性数据即可。在解算方法方面，也相应地比较简单，例如，由于对流程内各单元的求解顺序已如上述可由模拟系统的开发者预先排好，就不必要求模拟系统具有执行这一任务（排出各单元的求解顺序）的功能，而要使模拟系统具有这样的功能，是要牵涉到采用某些比较复杂的作法的（参看第七章关于流程分解的有关内容）。

由于这种专用的模拟系统结构比较简单，而“模拟三要素”在其中也同样得到体现，因此，如能先对一套这样的模拟系统进行考察，将有助于对化工流程模拟系统的一般概貌取得完整印象。

（2）通用化工流程模拟系统

通用化工流程模拟系统是指并非针对特定流程开发的、对不同流程均可适用的、带有通用性的化工流程模拟系统。有了这种通用化工流程模拟系统，有关人员在开展同流程模拟有关的各项工作时，显然将会感到有很大方便。

① 这是指在采用“序贯模块法”——一种最常用的流程模拟的作法，详见第六章——的模拟系统中的情况。