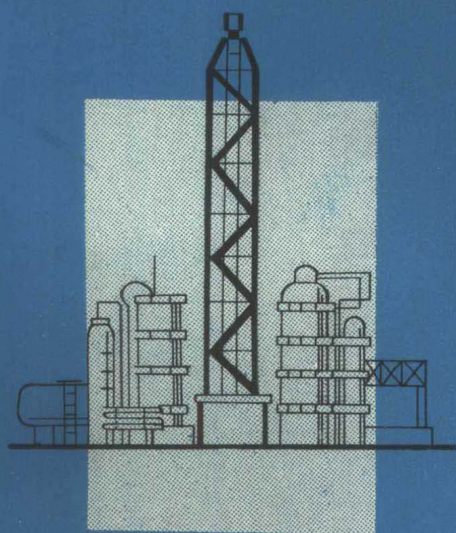




合成氨生产的计算机控制译文集

上海化工研究院技术情报室

上海科学技术情报研究所

合成氨生产的计算机控制译文集

上海化工研究院技术情报室

上海科学技术情报研究所出版

新华书店上海发行所发行

上海商务印刷厂印刷

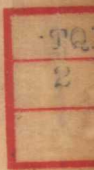
开本: 787×1092 1/16 印张: 7.75 字数: 196,000

1974年9月第1版 1974年9月第1次印刷

印数: 1—3,700

代号: 151634·207 定价: 1.00 元

(只限国内发行)



毛主席语录

鼓足干劲,力争上游,多快好省地建设社会主义。

学习外国的东西,是为了研究和发展中国的东西。

在生产斗争和科学实验范围内,人类总是不断发展的,自然界也总是不断发展的,永远不会停止在一个水平上。因此,人类总得不断地总结经验,有所发现,有所发明,有所创造,有所前进。

中国人民有志气,有能力,一定要在不远的将来,赶上和超过世界先进水平。

FBTS 67

前 言

在伟大领袖毛主席亲自制订的“鼓足干劲,力争上游,多快好省地建设社会主义”的总路线指引下,在深入批林整风运动中,我国化肥工业战线上的广大革命职工,斗志昂扬,意气风发,一个技术革命和技术革新的高潮正在兴起。有关化肥工业自动化的新技术,也正在蓬勃发展。

而在国外,近十余年来,已有十一个国家的二十多个氨厂中采用了计算机控制技术,并已取得较好效果。据称不仅可以提高合成氨产量和质量,降低生产成本,并可安全生产,提高劳动生产率。国外在应用发展这一门新技术的过程中,也发表了大量参考文献。

遵照毛主席关于“洋为中用”的教导,为了迅速采用和掌握这一门新技术,独立自主,自力更生,赶上并超过世界先进水平,促进我国化肥工业的发展,为人类作出较大贡献。我们在上级领导的关怀与上海科学技术情报研究所和本院自动化研究室的协助下,着重搜集整理编译了近几年来关于国外采用计算机控制合成氨生产的综述、技术经济分析、控制方式、数学模拟以及最佳控制等方面的文章共 16 篇,以供氮肥厂、大专院校以及设计研究单位等的有关工人、干部和技术人员参考。

由于我们对毛主席著作学得不够,业务技术知识也很差,本译文集难免存在许多缺点和错误,务请读者批评指正。

上海化工研究院技术情报室

1973 年 12 月

目 录

综 述

计算机在氨生产中的功能	1
-------------------	---

技术经济分析

大型氨厂的计算机控制与最佳化	7
氨厂的计算机控制	21
现代化合成氨厂计算机控制的实益	26

控 制 方 式

氨厂闭环计算机控制系统	31
小型氨厂的开环计算机控制系统	35

数学模型的研究

合成氨厂的静态与动态解析	39
氨生产的控制模拟	53
对氨合成塔几个数学模型的商榷	67
两段 CO 变换装置的数学模拟和最佳化	71

最 佳 控 制

现代化氨厂的最佳化	77
氨合成回路数字控制系统的实时最佳化	80
氨合成回路的最佳化	86
氨合成气制备系统的最佳控制	96
用动态规划法使氨生产最佳化	107
氨合成车间最佳控制算法的建立	112

综 述

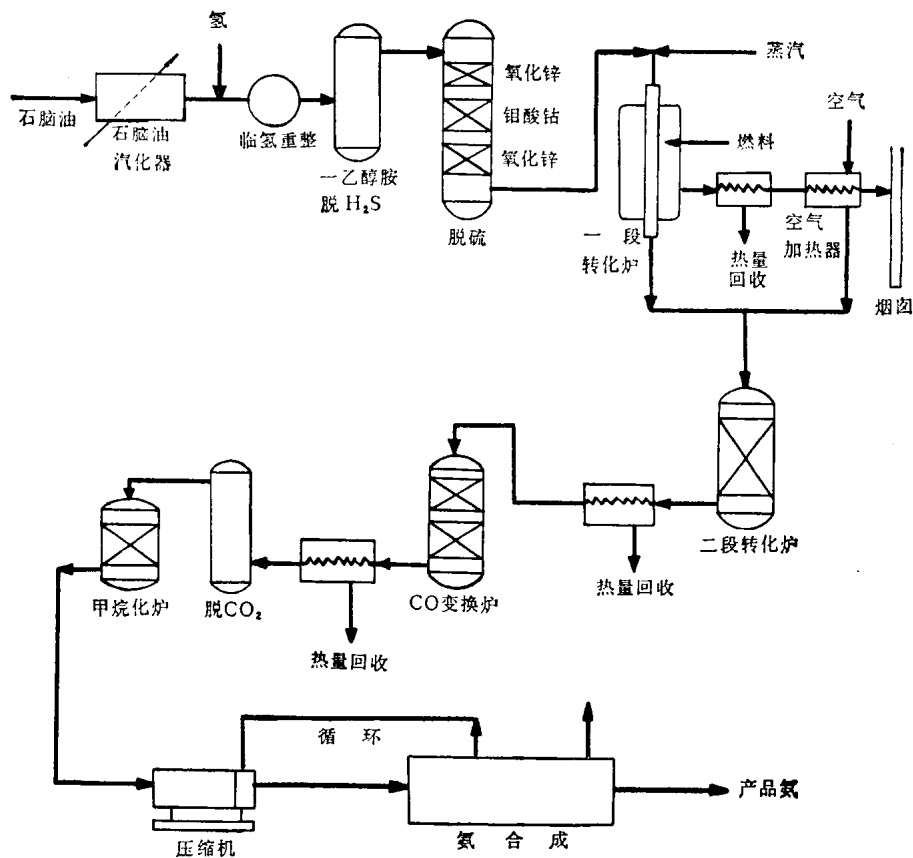
计算机在氨生产中的功能

1960年,美国孟山都化学公司的合成氨厂装设了第一个闭环计算机控制系统。一年后,阿莱德化学公司的日产1,000吨合成氨厂装设了第二个计算机控制系统。目前,世界上有许多氨厂都装置了计算机进行控制,这些计算机控制的结果表明,氨生产过程在化学工业中最适合于采用计算机控制。其理由如下:

积 能 回 路

由氨厂蒸汽催化转化装置* 简易流程图可以清楚地看出,在氨生产过程中,有许多单元相互之间参与能量交换。

1. 第一个回路是燃烧炉或管式转化炉的对流区域。在这里,由燃料油燃烧所生成的烟道



氨厂蒸汽催化转化装置简易流程图

* 该装置系国外主要制氨装置——编者

气体,其辐射热用于提供反应的热量,其显热用于产生锅炉的蒸汽。

2. 第二个回路是蒸汽回路。蒸汽是在生产过程不同控制点的废热回收系统产生的,其余的蒸汽则是在透平机内膨胀的。由透平机来的冷凝液再回到生产过程中。

3. 第三个回路是锅炉给水回路和预热回路。

4. 第四个回路是燃料用的合成气流和转化炉燃料系统之间的小回路。

5. 第五个回路是合成回路。

6. 第六个回路是由蒸汽再驱动氨压缩机的氨冷冻回路。

因此,由于以上许多变量的复杂性,故各个工段不仅生产过程气体等的传递联系在一起,而且能量的交换也联系在一起。合成氨厂任何一个工段的任何一个操作条件的稍加改变就会影响其它工段的操作工况。例如转化炉操作条件的改变就会改变烟道气体中所含有的热量,从而影响第二转化炉空气的预热、管式转化炉本身气流的预热、蒸汽的发生和蒸汽的过热,还会影响透平机等蒸汽进口的条件,换句话说,上述条件极微小的改变,就会完全扰动氨厂中所有工段的正常操作条件。

由于要处理许多相互关联的回路,所以这些回路无论在什么时候,它的最佳状态操作问题,是一个最复杂的问题。建立一个数学模型并将全部有关这些变量的系数编入其中,乃是一个困难而麻烦的任务。上述问题之所以能够解决,在于以计算机控制能够使这些工厂,以最低的费用获得最大的物料通过量,并使生产过程经常接近操作极限。

技术概况和化工动力学

有关氨生产过程采用石脑油蒸汽转化法的计算机控制。其程序的典型目的,可以按照下列主要单元进行讨论:

(1) 脱硫

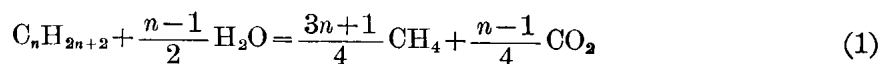
所有蒸汽转化法需要使原料气完全脱硫,以达到极低的硫含量。根据目前硫化物的总含量和类型,必须采用一种适宜的和经济的脱硫方法。目前最常用的方法是临氢重整法。该法汽化的原料用氢处理并脱除 H_2S , 硫化氢经一乙醇胺或碱洗,然后通过触媒床将其最终脱除。

动力学方程式已经有了,而且方程式中的常数将确定,故脱硫的净化度可以由反应的条件和进料中硫化物的特性来计算。

氨生产过程的数学模型建立在计算机中,使得触媒的活性可以由经验方法来估计。采用这种方法和已知化工动力学与热力学之间的关系,计算机决定对任何给定的氢气流量,计算出最大转化率的温度。然后,计算机考虑了影响整个工厂收益的所有经济因素,对氢气流量加以调节。

(2) 一段转化炉的操作

石脑油和蒸汽混合物在一段转化炉内,由还原镍化合物所制成的并由氧化铝或氧化硅,或这两种混合物为载体的触媒存在下,于温度 800°C 时,进行初始的甲烷化反应。化学反应式如同李厚氏(Dr. Lihou)所表示的一样:



式中就轻石脑油来说, n 通常为 7。

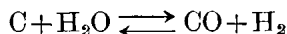
反应式(1)中所生成的 CH_4 , 按照下列方程式与蒸汽进行可逆反应:



如果反应式(1)要防止炭黑生成, 那末补充适量的蒸汽是必要的。引起炭沉积的第二个反应式是卜道尔德(Boudouard)反应式。



这样所生成的炭黑破坏了触媒的载体, 因而防止这个反应是必要的。炭黑可以按照下式与蒸汽反应, 自触媒中脱除。



如果 P 是代表总压, 那末反应式(2)、(3)和(4)的平衡常数可用分压来表示:

$$K_1 = \frac{(N_1 - N_2)(3N_1 + N_2)}{(1 - N_1)(2S - N_1 - N_2)} \cdot \frac{3n+1}{4} \cdot \frac{P}{N} \quad (5)$$

$$K_2 = \frac{\left(\frac{n-1}{3n+1} + N_2\right)(3N_1 + N_2)}{(N_1 - N_2)(2S - N_1 - N_2)} \quad (6)$$

$$K_3 = \frac{(N_1 - N_2)^2}{\left(\frac{n-1}{3n+1} + N_2\right)} \cdot \frac{3n+1}{4} \cdot \frac{P}{N} \quad (7)$$

式中, K ——以分压表示的平衡常数

n ——一个原料分子中的碳原子数

N ——转化气中总克分子数, $N = \frac{(3n+1)M}{4}$

M ——转化气中总克分子数的函数, 即

$$M = 1 + a + 2S + 2N_1$$

N_1 ——按照反应式(1)转化的甲烷百分数

N_2 ——完全变换为 CO_2 的甲烷百分数

S ——所需蒸汽克分子数的二分之一/初始存在的甲烷克分子数

a ——碳原子数的函数, 即

$$a = \frac{n-1}{3n+1}$$

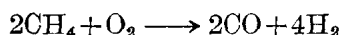
$$\text{总蒸汽量} = \frac{(3n+1)(2a+2S)}{4}$$

方程式(5)和(6)可以用来在任何温度和压力时计算平衡组成。

根据动力学实验室的数据分析, 发现石脑油与蒸汽的反应速率取决于下列因素: 1) 触媒颗粒的大小, 2) 气体的质量流速, 3) 进料组成, 4) 触媒床的温度, 5) 蒸汽的数量。前三个因素受到工厂设计的支配, 而后二个因素随着操作的条件而变化。当进料中蒸汽的数量增加时, 甲烷的转化率也增加。但是这会导致燃料更多的消耗, 因此会降低工厂的热量利用率。如果第一转化炉反应的温度增高, 则平衡因素有利于一氧化碳的生成。但是, 增高温度会降低触媒和设备的寿命, 引起工厂频繁的停车。计算机决定最佳的蒸汽与气体的比率和最佳的温度, 以便得到最大的转化率, 使炉子在设计的限值以内运转, 并保持触媒的合理寿命。

(3) 二段转化炉的操作

预热的空气于 480°C 时加入炉内,以便使一段转化炉出口气中未转化的甲烷进行转化,同时得到所要求比率的含有氢和氮的混合气。反应在镍触媒的存在下,于温度 900°C 时,按照下式进行。

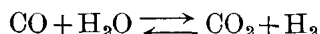


二段转化炉内必需加入可控制的空气量,过量的空气由于氧化作用,将导致昂贵氢气的消耗,而空气的不足,将导致在合成气中留下某些未转化的甲烷,因而在合成回路中惰性气体的含量将增加。

计算机计算出最佳的空气流量,以平衡出口气体中最佳的甲烷含量并提供所需要的氢氮比。

(4) 一氧化碳的低温变换

水煤气变换反应是在低温触媒(氧化铜、氧化锌和三氧化二铬的混合物)的存在下进行,当反应温度在 200~240°C 时,残余一氧化碳可低至 0.3%。



当蒸汽流量大、温度低时,一氧化碳的平衡浓度减小。这是因为热力学过程对于低温有利。但是,提高温度可以加速反应速度。反应速度可由下列方程表示。

$$r = K \cdot P^l \text{CO} \cdot P^m \text{H}_2\text{O} : P^n \text{CO}_2 \cdot P^g \text{H}_2 \text{ (向前反应)}$$

$$l=1 \quad m=1 \quad n=-0.5 \quad g=-0.5$$

就低温触媒来说,这些方程式阐述了极小粒子的内在的触媒活性。并修正了普通粒子大小的质量传递和热量传递。

因此,反应速度不仅取决于温度,而且也取决于触媒的活度系数。为了在合理的时间内得到最大的 CO 变换率,并保证触媒的最长寿命,故必需保证最佳温度。这个过程可以通过计算机的安排,进一步引伸到计算机控制系统,使在触媒活性衰老时提高蒸汽流量。但是,因为增加 CO 的变换费用必须和稍微提高 CO 含量(以及随着 CO 含量增高而增高的未转化的甲烷含量)的费用相平衡,所以必须控制蒸汽的最佳流量。计算机在考虑了影响整个工厂收益的所有经济因素后,决定并调节最佳的蒸汽流量。

表 1 表明触媒老化的两种情况,一种情况是触媒失去其初始活度的 25%,另一种情况是触媒下降其初始活度的一半。就上述两种情况和设计指标来说,变换气中惰性气体的组成如表 1 所示。

表 1 变换气中惰性气体的组成

	低温变换炉出口处 接近平衡的温度,°C	Ar, %	CH ₄ , %
设计指标	40	0.29	0.86
LTS 触媒,75% 活性	70	0.29	1.12
LTS 触媒,50% 活性	100	0.29	1.47

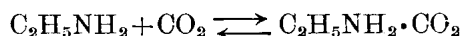
就合成气中惰性气体含量的增加来说,如果自合成回路中减少放空率,使惰性气体的百分数保持在合成塔入口处的设计值 13%,那末氨的产量分别下降到日产 1,475 吨和日产 1,442 吨。在这样条件下,合成塔比原来所设计的具有更高的生产能力,所以在合成循环系统中,允许提高惰性气体的含量。计算机的计算表明,就变换触媒的两种老化情况来说,所得到的最佳值如表 2 所示。

表 2 变换触媒两种老化情况的计算机计算

	进合成塔循环气 中惰性气含量	氨产量, 吨/天
设计指标	13.0	1,500
LTS 触媒, 75% 活性	13.4	1,480
LTS 触媒, 50% 活性	14.2	1,457

(5) 二氧化碳的清除——一乙醇胺法

CO₂ 的脱除, 用约 20% 的一乙醇胺溶液进行洗涤。其反应式如下:

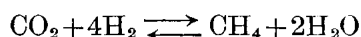
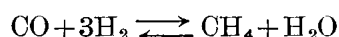


上述反应于高压低温时有利, 一乙醇胺经降压或提高温度进行再生。

出口气体中的 CO₂ 含量下降到 5 ppm 是必要的, 否则它将提高甲烷化炉的负荷, 并且所生成的甲烷必须从合成回路中经常不断地排放, 以便控制惰性气体的成分在一定的限值内, 由一乙醇胺系统去再生的溶液中二氧化碳浓度是由脱硫液流量和再生器蒸汽流量的不同组合来确定的。增加这两个变量中的一个, 就能脱除更多的二氧化碳, 但也导致消耗更多的动力或燃料, 并增加了生产成本。计算机处理所有这些可能的组合, 并且决定那一种组合更有利于整个工厂的最佳控制和最大收益。

(6) 甲烷化

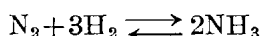
二氧化碳和一氧化碳在镍触媒的存在下, 于温度 300°C 时, 与氢反应生成甲烷。



平衡转化率在较低温度时增加, 而反应速度则降低。随着触媒的衰老, 应提高温度来补偿触媒活性的衰退。在这种场合, 计算机可选择最佳温度以达到工厂的最佳运转。

(7) 氨的合成

氢和氮在触媒的存在下化合合成氨



虽然上述反应表明, 氢与氮是按照 3 与 1 之比相化合, 但是, 氨的最大转化通常是在较低比例时 (2.8:1) 得到的, 这是由于在富氮气氛中, 按照理查德 (Le-Chatelier) 原理有利于合成的缘故。因此, 在动力学因素和热力学因素之间存在着氢与氮的最佳含量, 但动力学因素和热力学因素由于生产过程所发生的扰动经常变化着, 故计算机经常计算出这个最佳含量。在氨合成塔中, 为了提高合成率, 可使新鲜气和循环气的氢氮比保持在适宜值上。此外, 当周围条件变化时, 计算机计算出合成塔所需的温度, 并调节循环气量以保持合成塔所需的温度。

计算机也根据在线分析仪表的检测, 由合成回路中连续地控制惰性气体的放空操作来保持惰性气体的最佳含量。因此, 获得最合理的惰性气体的含量, 以保持所需要的氨产量, 并使放空的合成气量为最小。

压缩机系统

计算机程序设计处理压缩机系统的主要特点是:

1. 使压缩机系统不超过负荷, 达到最大物料流量。
2. 利用所有压缩机系统的有效生产能力。

3. 保持物料流量的最大压力在限值范围内。

紧急程序也建立在计算机内。进料的使用率、冷却水的温度以及压缩机和其它设备条件的任何变化都会得到不同的限值,该限值在不同的时间内成为限制性因素。因为限值会改变,所以计算机分析运转情况编制程序,以决定哪一个限值是限制性因素。因此,计算机可以选择并执行相应的控制方程式。计算机也用来检测压缩机在运转过程中的任何故障如阀与活塞环的泄漏,过多提高溢流水的温度,汽缸或曲轴的不适当润滑等。

计算机控制的经济效果

1. 由计算机所计算的操作数据,在表示式的限值内是精确的,完全的,并消除了人工计算的误差。这样,对连续生产过程的运转,可以提供较快的技术情报。这就是说,获得情报在实际生产之间的实时中滞后较小。

2. 操作人员要化费大约 90% 的时间完成简单的程序操作,这样使他只有 10% 的时间控制实际生产过程的操作。用计算机帮助程序操作,据估计,操作人员只化费 30% 的时间就可得到操作的结果,并使有 70% 的时间控制实际生产过程。

3. 所编制的程序是完全自动的,进料的各别数据可以编入目的程序,使得设计、监督和执行可以由非专业人员来完成。这样就会解除屑碎事务对技术人员的纠缠。

4. 氨的生产过程是极其复杂的,因而,最佳控制具有十分重大而深远的意义,以最低的成本获得最高的产量。

5. 在供电事故和其它能源事故频繁的场合,计算机控制能够在很短的时间内,以最大的安全效果执行生产过程的停车和开车。每当工厂的设备效率下降,发生危急情况的时候,计算机也能引导采取预防性的维修措施,并防止设备机器的损坏。

6. 工艺设计人员在这个计算机控制系统中,根据工厂容易调节的变量,以考虑许多可以选择的办法是可能的。这样,有了丰富的知识可以更详细地研究工艺条件改变的效果以进行评价。

7. 现代化氨厂的投资费用通常为 1 亿 5 千万卢比左右。在新建厂设置计算机控制系统的有关费用为这个厂投资的 2%。回收比率为 0.33,即在三年内,使用计算机的投资费用可以完全回收。

过去的经验表明,氨生产的计算机控制可以提高生产能力 5.5%。根据全厂各工段的分析表明,提高产量的主要因素如下:

适应环境条件的变化提高压缩机的生产能力	45%
在合成循环气中保持最佳氢氮比和惰性气体的浓度	25%
确定变换炉的最佳条件	10%
提高转化炉的效率	10%
提高 CO 的转化率和 CO ₂ 的脱除	10%

增产 100% 相当于 5.5%

因此,氨厂的计算机控制,虽然附加了一套复杂的仪表装置,但对于工厂来说,不但不是浪费,而且对于目前运转的老厂,特别是对于将要兴建的化工、钢铁或石油化工厂来说,乃是一项具有巨大技术经济意义的措施。

节译自《Chemical Age of India》1969, 20, No. 2, 123~127.

大型氨厂的计算机控制与最佳化

序 言

由于世界肥料需求的增长,对基本肥料拼料的需要也在增加。近年来氨厂工艺设计的进展使得在新建厂中能实现大的生产能力。结果在世界上建立了很多日产 600~1,500 吨氨的工厂*。这些单系列的氨厂,采用离心压缩机以取代往复式压缩机。

随着合成氨新工艺的出现,要求在制备 H_2 、 N_2 混合气的转化段采用比老厂为高的压力,而在合成段采用比老厂为低的压力。离心压缩机由气体或蒸汽透平推动。蒸汽是利用合成塔和第二转化炉产品气体的显热以及第一转化炉烟道气体的废热而产生的。新设计的一个主要优点是有效地利用工厂本身产生的热量。生产过程和设备的性能对运行的影响都是非常显著的。曾由于对工厂内部的相互作用没有足够的认识,诸如离心压缩机等机械设备的效率随着时间而下降,并使生产蒸汽的设备过载,故曾导致氨厂的新工艺归于失败。为了了解图 4 所示流程图中的相互作用,让我们作为一个例子来研究当操作人员调整或控制合成回路中的 $H_2:N_2$ 比时所造成的后果。为此,可以分别实行两个校正动作来达到目的。一个是调整合成回路的放空速率,第二个是在一定时间里改变空气流量,因而改变了合成压缩机新鲜气流中的 $H_2:N_2$ 比,跟着就改变了合成回路中的 $H_2:N_2$ 比。

因为放空气体大约占了第一转化炉燃料容积流量的一半左右,故放空速率的变动造成了对第一转化炉烟囱温度和过程气体的温度的扰动。前者是对生产蒸汽的单元的扰动,后者则引起第一转化炉出口温度变动,特别是甲烷泄漏变动。这个温度进一步再传递到第二转化炉过程气体的出口温度和组份,还有废热锅炉也立即跟着第二转化炉而变化。在合成压缩机新鲜气中出现组份扰动,同时,对生产蒸汽的单元的扰动直接影响各个压缩机的运行。并且,新鲜气中甲烷含量的变化将要求进一步调节放空速率,以避免合成气中惰性气浓度的变动。另一方面,压缩机运行条件的变化将引起来自冷凝段的压力和环流物料流量和组分的变化。由于在第一转化炉的炉子里,从燃料变化到在过程气体中反应出这个变化的作用有 15~20 分钟的延滞时间,所以上述各种扰动将慢慢地在氨厂的各段中积累起来。

空气流量的变化引起第二转化炉过程气体温度的变动,结果影响废热锅炉的热回收和压缩机新鲜气流中的惰性气体组份。正如上述情形一样,这些扰动将传到合成段,并通过放空而返回至第一转化炉。

可想而知,在合成段的一个单一的校正动作可以带来对整个工厂的强烈扰动,从而引起稳定性的问题。另一方面,如果不采取校正措施以补偿对合成气组分的扰动,则对于某组给定的温度、压力和急冷流条件,由于合成塔的自热型特性,将导致反应器到达淬灭点(quench point)或吹灭点(blowout point)。在这一点,合成塔不再能合成氨,而需要重新开车。还有这种可能

* 据 1972 年统计,国外日产 600~1,500 吨以上的氨工厂有 105 家——编者

性, 由于对合成回路的扰动不够注意, 可能造成对压缩机的冲击, 从而带来压缩机严重和永久性的损坏。

从上述例子的讨论似乎可以认为这些新的氨厂的最好性能的问题不能用常规的模拟控制来解决。本文的目的就是讨论这类大型单系列氨厂的计算机控制, 以达到最佳和稳定运行的问题。

计算机系统的描述

图 1 示出氨厂与 IBM1800 型控制机各个部件之间的简单联系方框图。所有的仪表测量值通过一个比较器实行连续的越限检查, 其动作与计算机的运算单元无关。操作人员控制台

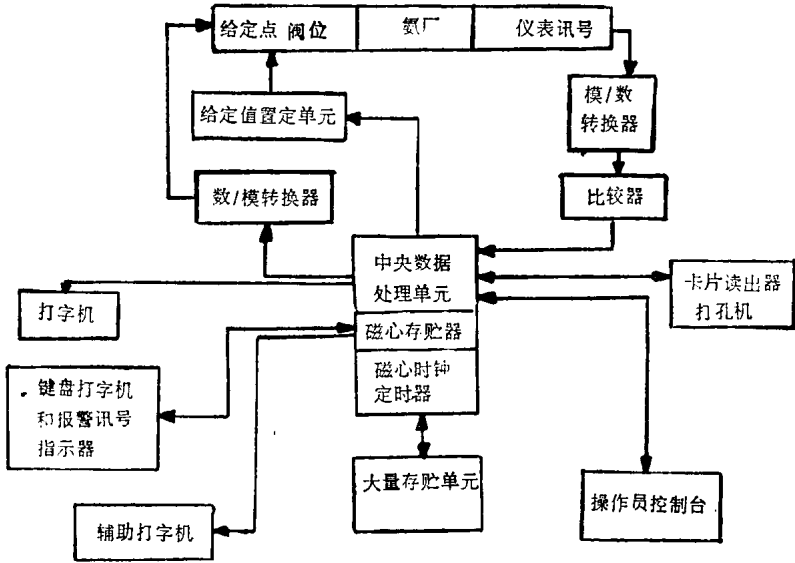


图 1 控制机的各个单元

是用来通过计算机系统与生产过程直接通讯, 例如将任何一个过程变量的测量值或计算值加以显示等。控制台还用于人工改变工厂中各个控制回路的设定值。计算机的输出则通过设定值置定单元改变设定值。有些调节阀是没有模拟反馈的, 例如合成塔的急冷阀就是如此, 在这种

场合, 就用计算机的输出通过步进马达直接改变阀门位置。关于 IBM1800 型控制机系统, 详见参考资料。

图 2 所示是用于 IBM1800 型控制机的程序编制结构图。“分时程序”在预指定优先权的基础上为图中所列各种计算机职能分配中央数据处理机的时间。如果必须用磁心存储器存储中断程序, 则被中断的程序之计算值存

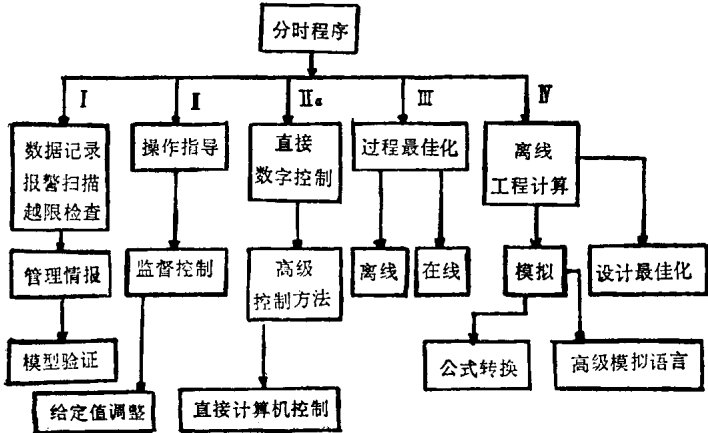


图 2 控制机的程序编制系统

贮于磁盘中。

监控是通过 IBM 的 prospro 程序实现的,它在相互作用控制计算的基础上实行给定值的调整或阀门定位。模拟调节器在各自的控制回路里实行两作用或三作用控制。另外,考虑到各个回路的动态特性不同,给出改变给定值时所沿的不同步级如图 3 所示。

调整给定值的方程一般形式是:

$$F_1 \Delta T_1 = F_2 \Delta M_1 + F_3 \Delta U_1 + F_4 \Delta V_1 + F_5 \Delta V_2 + \dots \quad (1)$$

式中, F_1, F_2, F_3 等是系数, T 是欲控制的目标变量, M 是调节变量, U 是扰动变量, V_1, V_2 等是由于同其他回路的相互作用而引入的其他变量。方程(1)的系数的非线性表示如下式:

$$F_j = A_j + B_j [C_j + (D_j/G_j)]^{E_j} \quad (2)$$

式中, A_j, B_j, C_j, D_j, E_j 和 G_j 可以是常数或 V_j 的函数。

(1) 最佳化

除了用 prospro 程序实现合理的工厂调节之外,对利润函数实行周期性静态最佳化也带来明显的经济收益。最佳化程序,同时用于在线和离线最佳化。如果 X 是独立变量或决定性变量的矢量(可以是给定值、阀位或非直接控制目标), Y 是因变量(有或没有限制条件)的矢量,则利润函数可最佳化如下:

$$\begin{aligned} P &= f(Y) \\ Y &= f(X) \end{aligned} \quad (3)$$

限制条件是,

$$\begin{aligned} X_L &< X < X_U \\ Y_L &< Y < Y_U \end{aligned} \quad (4)$$

另外,在程序中规定,在符合预先指定的报酬条件时,这些限制条件是可以违反的。最佳化用分段线性化方法,在一个运行点得出梯度矩阵 dY/dX ,再用线性规划方法在指定的限制条件下达到新的 X 值。比较两点的 P 值,以确定可能的运动方向。如果利润 P 增加,则在新的点上重新计算 dY/dX 。最佳化的手续重复下去。

(2) 其他职能

计算机还有其他有用的职能,例如周期性的数据记录以及色谱讯号计算。在波登(Borden)化工厂中,这些职能以及生产过程同操作人员控制台之间的通讯是分别有各自的程序的。计算机还有足够的空余时间以便执行离线计算任务或借助于(图 2)所示的“公式转换”(Fortran 语言)和模拟语言来移去程序中的错误及进行程序试验。

(3) 在氨厂的应用

由讨论得知,为了实行氨厂的监控和最佳化,需要掌握氨厂各种变量的某些基本关系。特别是,对于相互作用监控,需要有如方程(1)、(2)那样的方程式,另外还要掌握每个回路的动态特性的某些情况,以便定出调整给定值的步级顺序。对于最佳化,则需要有因变量(受限制的工厂变量)与独立变量(控制变量)之间的关系,犹如方程(3)所表示那样。

对所研究的氨厂,所需要的关系式是通过各工厂单元的数学模拟得到的。在进行数学模拟时,写下了基本的物料、能量和压力平衡方程式,并解出了它。在这些模拟方程中,包括有化

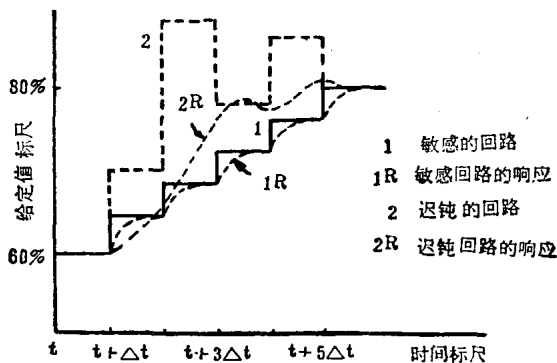


图 3 调整给定值的方法及响应

学反应的动力学和热力学关系。

下面研究六个最重要的单元的模拟问题,而诸如废热回收系统、二氧化碳汽提段和甲烷化炉等单元,只要考虑简单的物料或能量平衡就足够了。

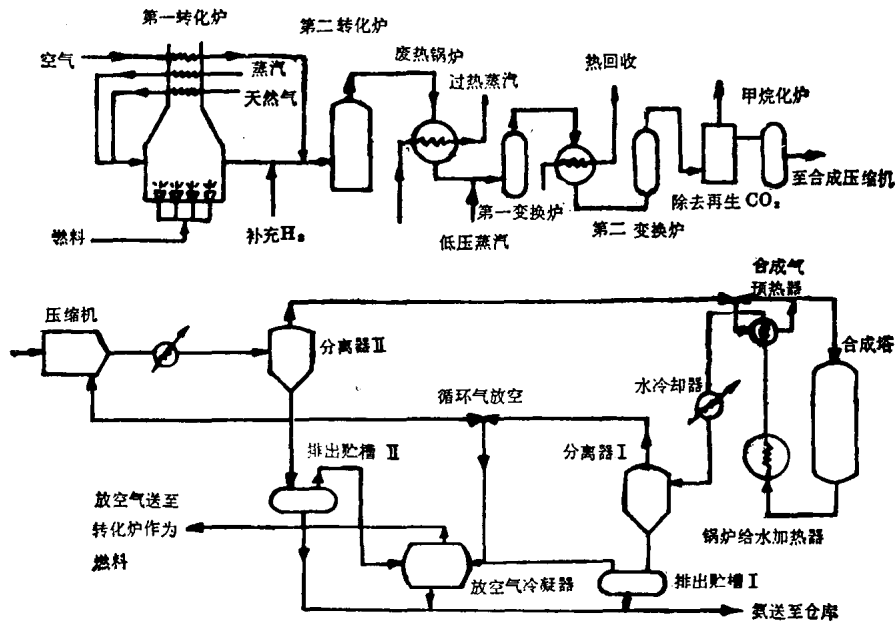


图 4 氨厂的简化流程图

各个单元的模拟

(1) 合成塔

因为合成塔是所有单元中最难以模拟的,我们首先处理它。氨合成反应是:



上述反应在一个高压多级自热型反应器中进行。合成塔有各种设计,而最流行的一种是有急冷供气流的绝热床。急冷供气流的目的是控制进入触媒床的反应混合物的温度。

Van Heerden、Badour 等人和 Shah 都已经讨论过这种自热型反应器运行的稳定问题,发现反应器的供气条件(例如供气的流速、组份、温度和压力、以及急冷分流的百分数和热传导系数)有一个范围,超过这个范围则变为不稳定。Shah 还进一步指出,最佳的氨产量和热回收是在这个稳定区域边缘的各点上取得的。

考虑(图5)所示的合成塔, Shah 在另一文中已有详细叙述。设 n_i 表示第 i 种组分的每小时磅分子气体流速, z 表示床长(呎), T 和 P 表示反应混合物的温度($^{\circ}\text{F}$)和压力(大气压), f 是触媒活性因子, K 和 K_0 分别是理想反应平衡常数和活性常数。则触媒床中的氢转化率由 Temkin-pyzhev 反

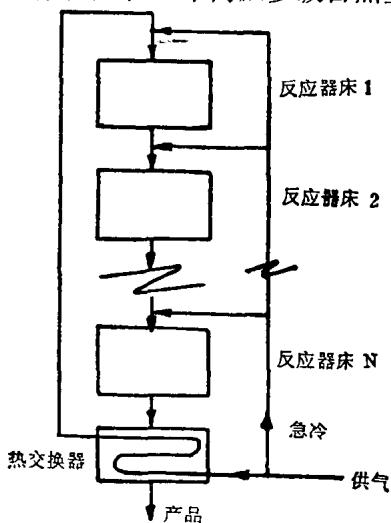


图5 急冷式合成塔简化框图

应速率表达式的修正形式表示之:

$$\frac{dn_1}{dz} = -240.5 f \cdot A_1 \cdot P^{0.63} \exp\left(\frac{-24092.2}{T'} + 33.5566\right) \cdot \left[\left(\frac{K}{K_v}\right)^2 \cdot \frac{P^{1.5} n_2 n_1^{1.5}}{n_5 n_t^{1.5}} - \frac{n_5 n_t^{0.5}}{n_1^{1.5} P^{0.5}}\right] \quad (6)$$

这里, 脚注 1, 2, 5 和 t 各为 H_2 , N_2 , NH_3 和总的克分子数。

在方程(6)中产生温度的能量平衡方程是:

$$\frac{dT}{dz} = \left(1.2 \Delta H \frac{dn_1}{dz}\right) / \sum_i n_i c_{p_i} \quad (7)$$

式中, c_{p_i} ——热容量(英国热量单位 Btus/磅分子/ $^{\circ}F$)

ΔH ——反应热(Btus/磅分子)

ΔH , K 和 K_v ——温度和压力的函数

每个触媒床中的压力假定是线性下降的。

另外, 从末端热交换器的能量平衡得到温度之间的关系:

$$T'_{(0)} = T_f / \frac{(\beta/\alpha - 1) + T_{(0)} \cdot (1 - \phi)}{(\beta/\alpha - \phi)} \quad (8)$$

$$T_{(L)} = T_{(0)} - [T'_{(0)} - T_f] \cdot \beta/\alpha \quad (9)$$

这里, T_f 是合成塔供气的温度, $T'_{(0)}$ 是热交换之后的供气温度。

$$\alpha = \sum_i n_i c_{p_i} \quad \text{和} \quad \beta = \sum_i F_i c_{p_i} \quad (10)$$

$$\phi = \exp[(1 - \beta/\alpha) \cdot h' L' / \beta] \quad (11)$$

h' 是传热系数与总传热面积的乘积, F_i 是到达合成塔的第 i 种组分的供气流速。

由化学计算导出除 H_2 以外的物料平衡关系:

$$n_2 = n_{2(0)} - \frac{1}{3} [n_{1(0)} - n_1] \quad (\text{对 } N_2)$$

$$n_5 = n_{5(0)} + \frac{2}{3} [n_{1(0)} - n_1] \quad (\text{对 } NH_3)$$

$$n_3 = n_{3(0)} \quad (\text{对 } CH_4)$$

$$n_4 = n_{4(0)} \quad (\text{对 } Ar) \quad (12)$$

这里, n_i 表示在 $z=0$ 处, 第 i 种组份的克分子数。必须使在两个端点上给定的边界条件得到满足的情况下解出模拟方程(6)至(12)。

$$n_i = F_i (1 - \delta_1 - \delta_2 \dots) \quad \text{在 } z=0 \quad (13)$$

这里, δ_1 , δ_2 , δ_3 等等是到达 1, 2, 3 床的急冷分流系数。 $z=0$ 处的温度 T 则必须先假设一个数值, 然后用热交换器的计算结果去校正它。即是将计算出来的供气温度与指定的供气温度相比较。一个较好的计算顺序是先给最后一个触媒床的出口温度假设一个数值, 使假定值收敛于真实的值, 并由热交换器计算出第一床 $z=0$ 处的温度 T 。

方程(6)至(13)用 Milno 的五价预告-校正积分法解之。Shah 在另一文章中讨论的两床反应器的一些结果引于图(6)和图(7)。

它表示出合成塔的供气温度和到达第一个触媒床的供气分数对 H_2 转化为 NH_3 的影响。每个图中的两根曲线代表模拟方程的两个解, 下面的一根代表反应器的亚稳态运行。两曲线交点的左面代表反应器的不稳定运行区。

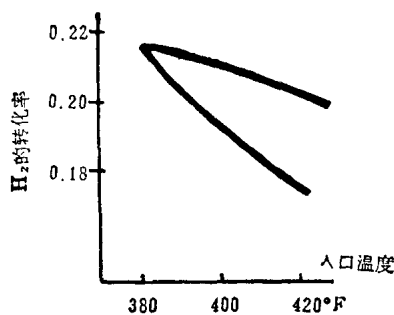


图6 入口温度对合成反应的影响

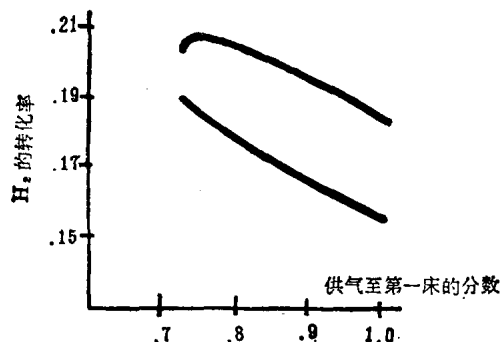


图7 急冷流的变化对合成反应的影响

方程(6)至(12)对于监控和在线最佳化是不适用的,因为要花费大量的计算时间去解它们。所以一旦得到反应器的良好测量值,则模拟结果可用运行点附近的参数变化来表示之。然后借助于回归程序由这些模拟结果导出简单的非线性关系。

(2) 第一转化炉

第一转化炉是一个直接燃烧的炉子,在炉子内,蒸汽和碳氢化合物通过几根并行的管子,管内充满着转化触媒体。蒸汽与碳氢化合物反应生成 CO , CO_2 和 H_2 。当用天然气作为碳氢源时,在 $1,450^\circ\text{F}$ 左右的温度下,所有比 CH_4 重的碳氢化合物均完全反应。正如 Moe 所指出在此温度下,下述反应达到平衡:



而下面这个反应则以一定速度进行,而且不达到热力学平衡:



当触媒老化时,反应离平衡状态愈远。而物料平衡方程则建立在反应平衡的基础上,即假定蒸汽-甲烷的反应达到平衡温度。当第一转化炉的出口温度是给定的控制变量时,则反应热的负荷可从全部反应直接计算出来。

如果 x 是甲烷的反应分数, y 是蒸汽生成 CO_2 的反应分数,则物料平衡方程如下:

$$\begin{aligned} \text{H}_2: \quad n_1 &= 3 \cdot x \cdot F_3 + y F_{12} + 5 F_8^* + 7 F_9 + 9 F_{10} \\ \text{N}_2: \quad n_2 &= F_2 \\ \text{CH}_4: \quad n_3 &= (1-x) F_3 \\ \text{Ar}: \quad n_4 &= F_4 \\ \text{NH}_3: \quad n_5 &= 0 \\ \text{CO}: \quad n_6 &= x \cdot F_3 - y F_{12} + F_6 + 2 F_8 + 3 F_9 + 4 F_{10} \\ \text{CO}_2: \quad n_7 &= F_7 + y F_{12} \\ \text{C}_2\text{H}_6, \text{C}_3\text{H}_8, \text{C}_4\text{H}_{10} \text{ 和 } \text{O}_2: \quad n_8 &= n_9 = n_{10} = n_{11} = 0 \\ \text{H}_2\text{O}: \quad n_{12} &= (1-y) F_{12} - x F_3 - (2 F_8 + 3 F_9 + 4 F_{10}) \\ \text{总的克分子数: } n_t &= \sum_{i=1}^{12} n_i \end{aligned} \quad (16)$$

这里, F_i 是进入第一转化炉物料中第 i 种组分的克分子数,而 n_i 是出口克分子数。

* 原文误为 $1F_8$ ——译注