

化工过程分析 与计算机模拟

张建侯 许锡恩 编著

化学工业出版社

化工过程分析与计算机模拟

张建侯 许锡恩 编著

化学工业出版社

内 容 提 要

本书主要介绍化工过程模型的建立、模型的解法和模拟计算的专著。其目的是使工程技术人员能更好地运用电子计算机来解决化工生产、设计、研究和开发中的问题，从而缩短过程研究和开发的进程。

本书共10章，第1~2章为一般情况的阐述讨论，第3~6章结合典型的精馏分离过程和反应过程提出并阐述稳态和非稳态的、集中参数和分布参数的、一维和多维的模型的各种不同数值解法。第7~10章主要介绍稳态流程模拟的主要方法、过程的优化、化工过程的能量分析等。每章内皆有较多的例题以加深理解。附录内附有较多的实用程序可供读者使用。

本书可供化工、石油化工等各专业的研究生和本科高年级学生作为教材使用，也可作为其有关工程技术人员的参考书使用。

工过程分析与计算机模拟

张建侯 许锡恩 编著

责任编辑：苗延秀

封面设计：曹乃询

化学工业出版社出版发行

(北京海淀区七区十六号楼)

化学工业出版社印刷厂印刷

新华书店北京发行所经销

开本850×1168¹/₃₂印张10¹/₂字数564千字

1989年4月第1版 1989年4月北京第1次印刷

印 数 1—2,120

ISBN 7-5025-0238-6/TQ·196

定 价 7.70 元

前 言

化工过程分析与计算机模拟是现代化学工程研究和实践的重要手段。通过对过程的分析 and 模拟可以加深对过程的理解，掌握过程变化的趋势，缩短过程研究和开发的进程，或者说用以秒为单位的计算机时间来换得以月或年为单位的工程时间，而且还可大大节约人力和物力。

为使工程技术人员能更好地运用电子计算机来解决化工生产、设计、研究和开发中的问题，现在编写了本书。主要包括过程模型的建立，模型的解法和模拟计算。这些内容以化学生产和化学工程的基本理论和专业知识为基础，涉及到基本数学问题、数值方法问题和具体的算法步骤或程序。在内容组织上，除第一章绪论外，对于模型的建立，首先在第二章就一般情况进行集中阐述和讨论，然后在以后的有关章节中再就具体问题分别提出。在第三章至第六章，结合典型的化工过程，主要是精馏分离过程和反应过程，提出并阐述稳态和非稳态的、集中参数和分布参数的、一维和多维的模型的各种不同的数值解法，包括正交配置法、有限元正交配置法、盖勒金有限元法，以及刚性微分方程的解法等。提出并阐述这些不同的解法并用于模拟计算，是这几章的主要目的和内容。第七章至第十章各有其不同的特有内容：第七章阐述了稳态流程模拟的主要方法。第八章包含了化工过程分析中若干常用的最优化方法。第九章的内容是从能量利用角度对化工过程进行分析，包括计算方法和优化问题。过程分析属于本书的主要内容，但过程分析和过程合成是相互联系的，为了达到合成的目的，先要进行分析，对合成来说，它是分析的结果，所以本书在最后部分第十章中也提到过程合成问题是适宜的。由于过程合成不是本书中心部分，所以其内容只涉及分离顺序和热交换网络两个方面。

本书可用作化学工程系各有关专业研究生和本科高年级学生的教材，并可用作化工科技人员的参考书。本书的目的是为读者作基础准备，使在面对具体化工过程问题时，能建立或选用数学模型，选用不同的解法，提出算法步骤或编制计算程序，或选用和利用已有程序（软件）。为了这个目的，本书对各种方法尽可能以例题进行说明。由于时间关系，部分例题仍用英制单位，未能转换为法定单位制或SI制。对不同的方法一般地都提出算法步骤或框图，并对少数方法，提出计算程序（软件）附于书末。

张建侯 许锡恩
于津大园

目 录

第一章 结论	1
(1) 化工过程分析	1
(2) 化工过程模拟	3
(3) 数字机模拟的发展	4
(4) 化工过程模拟的作用和限度	4
第二章 过程数学模型	7
2.1 数学模型	7
2.2 数学模型建立的步骤	7
2.3 数学模型方程式	10
2.4 传递过程模型	11
(1) 质量平衡	11
(2) 热量平衡	20
(3) 动量平衡	24
(4) 模型的简化, 活塞流模型	29
(5) 完全混合模型	34
2.5 群体平衡(“实体”数平衡)模型	40
2.6 边界条件	46
2.7 经验模型	49
2.8 数学模型分类	51
参考文献	57
第三章 非线性代数方程组求解的数值方法	58
3.1 线性代数方程组的解法	59
(1) 高斯消元法	59
(2) 高斯-约当法	61
(3) LU分解法	62
(4) 稀疏方程组的求解方法	67
(5) 超松弛法	75

3.2 非线性代数方程组的解法	79
(1) 直接迭代法	80
(2) 韦格斯坦法	83
(3) 牛顿-拉夫森法	86
(4) 推广的割线法	89
(5) 矩阵 A 的更新	92
(6) 布罗登法	95
(7) 阻尼因子	96
参考文献	99
第四章 集中参数过程的稳态模拟	101
4.1 相平衡和化学平衡的计算	101
(1) 等温闪蒸的计算	101
(2) 绝热闪蒸的计算	103
(3) 伴有化学反应的相平衡的计算	108
(4) 一定压力下绝热反应温度的计算	114
4.2 多级塔的模拟	117
(1) 多级分离问题的数学模型	117
(2) 方程解离法	121
1. 泡点法	124
2. 流率加合法	133
(3) 同时校正法	139
(4) 松弛法	155
参考文献	156
第五章 集中参数过程的动态模拟和一维分布参数过程的稳态模拟 ..	158
5.1 集中参数过程动态模型和一维分布参数过程稳态模型的建立 ..	159
(1) 多级塔的集中参数动态模型	159
(2) 滴流床反应器的一维稳态模型	168
柱塞流模型	169
轴向返混模型	174
5.2 动态模拟中刚性方程的数值解法	177
(1) 一般方法	178
欧拉法	178
中点法	181

梯形法	182
龙格-库塔法	184
(2) 数值方法的稳定性	189
(3) 刚性常微分方程	193
(4) 刚性常微分方程模型求解的数值方法	199
半隐式龙格-库塔法	199
适应性半隐式龙格-库塔法	203
吉尔法	211
5.3 一维分布参数过程的模拟	218
(1) 有限差分法的应用	218
(2) 正交配置法的应用	227
(3) 有限元正交配置法的应用	251
拉格朗日多项式	251
赫米特多项式	257
(4) 盖勒金有限元法的应用	261
参考文献	274
第六章 分布参数过程的稳态和非稳态模拟	275
6.1 数学模型的建立	275
(1) 管式反应器的二维数学模型	275
(2) 翅片换热器的传热数学模型	280
6.2 用正交配置法的模拟	283
(1) 二维系统的内配置法	283
(2) 二维系统的混合配置法	292
6.3 用有限元正交配置法的模拟	300
6.4 用盖勒金有限元法的模拟	302
6.5 用有限差分法的模拟	312
(1) 传质和传热的非稳态模拟	313
(2) 具有径向扩散的管式反应器的稳态模拟	322
(3) 用线上法的模拟	337
参考文献	339
第七章 稳态流程模拟	340
7.1 稳态流程模拟的方法	340
(1) 序贯模块法	340

(2) 解方程法	343
(3) 联立模块法	344
(4) 方法比较	346
7.2 稳态流程模拟中的自由度	355
(1) 设备单元的自由度	355
(2) 流程的自由度分析	359
7.3 大系统的分解	361
(1) 将过程流程图转变成信息流程图	361
(2) 将信息流程图转变成数码形式	362
(3) 流程的分隔	364
1. 循迹法	364
2. 邻接矩阵的幂法	373
(4) 分隔所得分系统的处理方法——切断	380
7.4 迭代变量的处理	384
参考文献	387
第八章 化工过程分析中常用的最优化方法	388
8.1 最优决策问题的构成	389
(1) 固定热负荷卧式冷凝器的最优设计	389
(2) 吸收-蒸出过程的最优设计	394
(3) 间歇过程最优进料速度的确定	400
(4) 平衡组成的计算	402
(5) 设计方案的选择	404
8.2 化工过程分析中的若干常用的最优化方法	409
(1) 一维搜索黄金分割法	409
(2) 多维搜索	412
1. 单纯形法及其应用	412
2. 鲍威尔法	420
3. 拉格朗日乘子法及其应用	425
4. 复合形法及其应用	432
5. 几何规划及其应用	436
6. 连续变量系统的最优化, 庞特里艾根极小值原理及其应用	448
7. 动态规划及其应用	459
参考文献	470

第九章 化工过程的有效能分析	471
9.1 有效能或熵的计算	471
9.2 有效能平衡和效率	490
9.3 化工过程的有效能分析	508
9.4 有效能与过程最优化	515
参考文献	521
第十章 过程合成	522
10.1 分离顺序的合成	522
(1) 分离顺序数、次级组分组数和分离方式数	522
(2) 分离顺序的合成方法	532
1. 启发法	532
2. 调优合成法	533
3. 算法合成技术——有序分支搜索法	536
10.2 热交换网络的合成	541
(1) 复合曲线, 窄点与最低能耗	543
(2) 以能耗最低为目标的热交换网络的合成	551
(3) 能耗与设备投资相互消长的权衡	554
(4) 流股的分支	562
(5) 利用多品位热(冷)源的热交换网络	570
参考文献	572
附录	573
一、多元多级精馏塔的泡点法计算源程序	573
二、吸收和蒸出计算的流率加合法源程序	594
三、米切尔森改进的半隐式RK法解刚性常微分方程组源程序	614
四、用正交配置法进行固定床管式催化反应器的二维稳态模拟	621
索引	631

第一章 绪 论

(1) 化工过程分析

对于一个化工过程，常需进行详细考察，以探求其在技术上的合理性，操作上的可靠性，以及尽可能达到最优化的条件。这样的深入了解是属于过程分析的内容，它涉及对整个过程及其组成部分有关的各种影响因素。实际情况是，过程分析对设计中过程的流程和技术条件的选择，对运转中过程的操作控制、考察和改进，以及对过程的研究和开发都是很重要的。

分析是对任何具有明确界限的事物，即系统的详细考察，以求了解其特性，常是与一定的目的相联系的。过程分析是对一过程的特定问题的认识并探求问题的解决途径和方法。过程分析早就被化学工程师所用。对于一个在运转中的化工过程，人们首先可以对它的各个方面进行直接观察，对现场数据加以分析研究，但这是有一定限度的，因现场条件常是不能随意改变的。在过程的开发和设计中，实际过程还未建立，就不能对它进行直接观察，对一些影响因素及其相互关系的考察，一种习用的方法是建立一个小型或中型的实际过程（小、中型工厂或装置，或符合相似性原理的实体模型）来进行实验观察。此外，也可通过数学计算加以考察。在不久的过去，由于计算方法的限制，对数学的利用有限，因此通过计算对复杂的实际过程进行分析是很困难的，甚致是不可能的。近时期来，由于电子计算机应用的发展，对复杂过程的分析已成为可能，其特点是复杂的数学方程和计算机技术的应用。现代应用电子计算机进行过程分析的一般步骤可用图1-1表示。

图1-1只简明地用粗线箭头表明了主要步骤及其间关系。“被分析的过程”和“分析目的确定”之间的双箭头虚线表明了两者的相依依赖关系。细线箭头表示单向关系，即分析的目的应是模型检

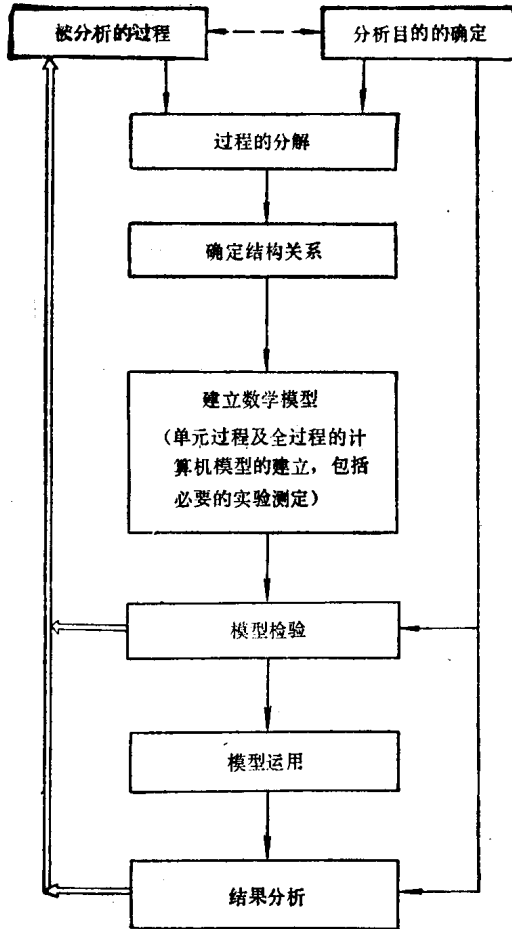


图 1-1 过程分析一般步骤

图中粗实线表示主要步骤及关系细实线表示单向关系，
虚线表示相互关系，双线表示返回

验和结果分析的依据之一。对于复杂过程，常需要将它分为若干个组成部分，称为“单元”，“单元过程”或“次级过程”，即图中的“过程的分解”。根据分解的方式，各单元间有一定的相互关系，

这种关系代表原过程的内部结构，需要加以正确认识并确定下来，这就是其中的“确定结构关系”。其次就是对各单元进行分析，以建立各单元的数学模型。这里除了建立数学模型方程式外，还包括有关的计算方法问题和计算机程序的编制。很明显，对于简单的过程，就不存在“分解”和“确定结构”这两步。

图1-1中左侧双线箭头表示返回。通过模型检验和对模型运用结果的分析，根据所发现的问题，可以返回对分析过程作必要的校正，重复进行。关于模型建立和检验与实验的关系，图中只作了简单表示，将在下一章中继续讨论。

(2) 化工过程模拟

假定已有能在一定准确水平上代表一个原过程的数学模型，包括模型方程的解，计算方法和计算机程序都已具备，并已通过“模型检验”，接着就是对模型进行运用。运用的内容根据所确定的目的可以各不相同，就是说是多样的。通过模型进行计算机计算，可以体现原过程的特性和行为，并可对这些特性和行为加以研究，或是在说可在一定准确水平上通过计算获得与对原过程进行实际考察所可能获得的相应结果，或是回答对原过程所提出的问题，即进行模型实验。这样运用计算机数学模型以代替原过程，就是对原过程的计算机模拟（或仿真）。从一定意义上说，过程模拟是过程分析的继续。无论是对实际存在的过程或尚未建立的过程，过程模拟都具有很重要的现实意义。对于已有的过程，例如运行中的生产过程，它一般不允许改变条件以进行实验，或实验耗费是很昂贵的可以通过数学模型加以考察。对于尚未建立的过程，也可以通过过程模拟进行研究探索，以获得在建立前所需要的数据。

数学模型的原理早有应用，但在电子计算机的广泛运用之前只限于简单的或理论性的问题。只有和计算机的应用相结合后，其作用才愈益显著和重要，其应用领域也愈益广泛，现已扩及工程、工业生产、经济学、社会和政治科学、生物和生命科学、运筹学、行政管理 and 军事等领域。本书的范围是属于工程领域的化工过程问题。这里，化工过程是指对物质主要是进行化学处理以实现工业生产的

全过程，它常因物流多和步骤多而具有结构复杂的特点。也可指组成上述全过程的单元过程（或操作）。

过程模拟除数学模拟外，还有实体模拟，这是模拟的两种类型。利用计算机的数学模拟又可分为模拟机的模拟，数字机的模拟和混合机的模拟。本书只限于在数字机上对化工过程的数学模拟。

（3）数字机模拟的发展

用模拟机进行模拟发展较早。但到六十年代中期以后，由于数字机硬件和软件的不断发展，用数字机进行模拟的作用和优点已逐渐得到普遍承认。概括地说，用数字机进行模拟可分四个阶段。

第一阶段由1955至1959年。在这一阶段中，高速和大容量的计算机尚未出现，还没有成熟的计算机语言，模拟计算只限于较简单的单元如换热设备，还不能对较复杂的单元或生产过程进行数学模拟。

第二阶段由1960至1964年。在这期间，由于采用了FORTRAN语言和子程序的形式，出现了比较完善和比较方便的模拟软件，但还不能成功地用于一些较复杂的实际工业问题。

第三阶段由1965至1969年。由于更有效的大型电子计算机的出现，和计算方法等的发展，数字机模拟的可靠性大大增加。从这一阶段的开始时期起，对工业过程的模拟，数字机就逐渐代替模拟机而为人们所采用。

第四阶段是1970年以后，数字机模拟的作用逐渐比较广泛地被接受，在购置新化工厂时开始提出对过程进行数字机模拟的要求。数字机的过程模拟已成功用于若干需要大量重复建造的大型化工厂如合成氨厂、乙烯厂等。

近年来，新的和经过改进的模拟软件不断出现，例如美国孟山都公司的FLOWTRAN系统，模拟科学公司的PROCESS系统，麻省理工学院的ASPEN系统，英国剑桥大学计算机辅助过程设计中心的CONCEPT系统等等。现在的一般情况是，一个大型化工厂或石油化工厂的建造，都要预先经过数字机模拟这个过程。

（4）化工过程模拟的作用和限度

概括地说，化工过程模拟可用于尚未建立的或已建立的过程，

既可用于过程的研究、开发和设计，也可用于考察其运转、控制和改进。简言之，它可用于研究各种因素对过程在各方面的影响。这种模拟研究，即模拟实验的特点是可以节省人力、物力和时间；可以完成在实物实验中难以进行的考察，例如对于一些在实际中不能或不宜采用的操作条件，可以用数学模拟进行考察，即数学模拟可以在需要时外推至一般所允许的操作范围以外，数学模拟可以不因时间因素而引起实际困难，即对于时间这个变量，可以采用任何很小或很大的数值，而不引起在实物实验中所可能引起的问题。

分别地说：

① 在研究、开发阶段，需要一个根据初步分析及少量数据而得的模拟程序，以探索不同条件对过程的影响，并从经济上加以检验和比较。对于在经济上可行的过程，要继续对其规模大小及操作条件的影响进行模拟考察。

长期以来，对一个化工生产过程的开发，一般都需要逐级放大。过程模拟发展到目前阶段，对于不同的过程，根据其复杂程度和对它分析了解的深度，有可能以过程模拟代替中间试验。同时，中间试验的作用也转变为以检验和改造已建立的数学模型为主，即利用中试所得的少量数据对大厂进行模拟估算；

② 在设计阶段，通过过程模拟可以方便地在不同的过程方案中进行比较，例如有目的地改变某些单元过程，改变设备大小及其相互间的排列位置，改变某些操作条件或引入某些新的影响因素。还可对过程不同部分的互相作用进行考察，对不同的控制系统进行估评，模拟开停工及事故发生情况。通过模拟，可以在设计中从经济、节能等不同角度进行方案选择，以达到最优化目的。此外，以较高准确水平的数学模型和经过评选的数据储存为基础的模拟软件有利于设计中的设备计算，减少计算中的不肯定因素，使一般所采取的安全因子降低；

③ 在工厂操作阶段，利用过程模拟这一手段，可以对改变或改进生产条件（例如原料组成、操作条件等），提高生产能力，改进控制系统，解决技术困难等进行考察，使工厂操作达到最优化。

过程模拟还可有助于开工、停工、运转操作等进行人员培训。应顺便指出，利用过程模拟，并非就无需工厂实测，后者仍有其重要作用，包括检验模拟结果及改进数学模型。

以上是过程模拟所可能起的作用，但过程模拟也受到以下限制，

① 首先对有关的过程需要建立达到一定准确水平的数学模型，这是一个关键问题。同时还需要有足够的和可靠的物理、化学数据。因此模拟软件的开发，除在数学方面需要进行大量工作外，还要对已有物性数据进行汇集、评选和关联，对缺少的物性数据进行测定；

② 模拟软件的开发，包括数学模型的建立等，需要耗费一定的人力和物力。这种耗费随着过程的复杂程度及有关问题的难度而增加。就是说，对于不同的过程，都需要一定的投资，因此对模拟软件的开发，自然地受到其经济效益因素的影响；

③ 对于尚不能建立数学模型的复杂系统，或是虽能建立数学模型，但由于其非常复杂尚无法用现有计算技术完成其解的情况，过程模拟当然还不能发挥作用。

第二章 过程数学模型

从前一章可以看到，建立数据模型是过程分析的重要环节，数学模型是进行过程模拟的基础。在过去，一个复杂过程的模拟有两个关键的困难步骤，即数学模型的建立和进行复杂的计算。由于电子计算机技术的迅速发展，对复杂数学方程组的求解一般已可解决，或者已不象过去那样不可逾越，而数学模型的建立常常仍相对地是过程分析的控制环节。本章将从一般的角度讨论化工单元过程数学模型的建立，以后各章将分别对不同类型和不同复杂程度的化工过程包括工业生产流程的模拟进行讨论。

2.1 数 学 模 型

模型是一事物的近似代表，或其模仿。所说的事物包括概念、实物、过程或复杂系统。相对于模型来说，原事物可称为原型。数学模型是一种符号模型，它是用数学方程式近似地描述或代表原型，它可以在一定的详细程度上精炼地表示原型的特征，它包括各变量间的相互关系。从上一章可以看到，为了进行研究、设计和控制，为了进行数学模拟，数学模型的应用一般必须与数字电子计算机相结合，就是说在数学模型方程式建立以后，必须解决应用计算机的计算问题，它包括模型方程式解的计算方法和计算机程序编制。在过去的二十几年，对数学模型的研究，很大一部分是致力于数学模型的计算机运用。与此同时，数学模型的应用也由主要是物理性科学和工程领域扩展到很多其它学科领域，这些领域在上一章讨论过程模拟时已经提到。

2.2 数学模型建立的步骤

数学模型可以用解析法建立，即根据表示过程特征的方程式进