

化 学 工 业 信 息 化 丛 书

化工过程 模拟与优化

杨友麒 项曙光 编著



化学工业出版社

化 学 工 业 信 息 化 丛 书

化工过程 模拟与优化

杨友麒 项曙光 编著



化学工业出版社

北京

本书系《化学工业信息化丛书》的一分册。本书试图对化工过程的模拟与优化做一个深入浅出的介绍。全书分为5个章次及附录。第1章主要介绍一些基本概念和研究范畴；第2章分三个方面介绍了常用的单元过程数学模型；第3章介绍流程模拟计算的基本理论和流程模拟主要算法（序贯模块法和联立方程法），同时也介绍了流程模拟软件系统的基本内容 and 应用方法；第4章首先介绍动态模拟与稳态模拟的不同之处，然后介绍动态过程数学模型的数值解算方法，在此基础上结合动态模拟软件 HYSYS 的应用，讨论典型单元过程的动态模拟和复杂全厂过程的动态模拟，最后一节是动态仿真培训系统；第5章介绍优化算法的基本概念、过程优化的确定性方法和随机性方法，以及多目标优化算法，作为化工过程优化方法的应用，最后介绍了化工过程的在线实时优化。

本书可供石化企业的信息化工作者、管理者以及企业领导者使用，也可兼作与信息化相关的管理及计算机专业的研究生、本科生的参考书，以及各类化工信息化认证考试的参考书。

图书在版编目 (CIP) 数据

化工过程模拟与优化/杨友麒，项曙光编著. —北京：
化学工业出版社，2006.3

(化学工业信息化丛书)

ISBN 7-5025-8454-4

I. 化… II. ①杨…②项… III. ①化工过程-模拟
②化工过程-最优化算法 IV. TQ02

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2006) 第 025176 号

化学工业信息化丛书
化工过程模拟与优化
杨友麒 项曙光 编著
责任编辑：戴燕红
文字编辑：贾 婷
责任校对：于志岩
封面设计：关 飞

化学工业出版社出版发行
(北京市朝阳区惠新里3号 邮政编码 100029)
购书咨询：(010)64982530
(010)64918013
购书传真：(010)64982630
<http://www.cip.com.cn>

新华书店北京发行所经销
北京云浩印刷有限责任公司印刷
三河市延风装订厂装订
开本 787mm×1092mm 1/16 印张 19 字数 469 千字
2006年5月第1版 2006年5月北京第1次印刷
ISBN 7-5025-8454-4
定 价：49.00 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

总 序

在《化学工业信息化丛书》编委会、中国化工学会秘书处与信息技术应用专业委员会、化学工业出版社以及各位作者和有关部门的共同努力下，历时三年，该《丛书》问世了。我仅以中国化工学会和丛书编委会的名义，对丛书的出版问世表示热烈祝贺！

三年前，我们开始策划出版该套丛书。根据以信息化带动工业化，以工业化促进信息化，走新型工业发展道路的战略思想，中国化工学会信息技术应用专业委员会建议，利用专业委员会在化工信息技术应用领域的代表性和权威性，调动专业委员会内部力量与社会外部力量，尽快编写出一套化工信息化丛书。主要着眼点是总结国内外石油、石化、化工行业信息技术应用的经验，梳理其成长的轨迹，介绍其主流的技术，推荐其优秀的案例，展望其发展的未来，以满足广大石油、石化、化工领域技术工人、工程技术人员和领导干部从事信息化建设的需要，促进、推动在石油、石化、化工行业方兴未艾的企业信息化建设的科学、和谐与健康发展。

本丛书包括《企业信息化组织与管理》、《化工过程控制系统》、《化工过程模拟与优化》、《化工企业资源计划系统 ERP》、《化工生产执行系统 MES》、《化工过程先进控制》、《化工生产计划与调度优化》、《化工实验室信息管理系统 LIMS》和《数字油田》9 个分册。

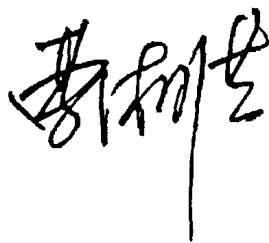
该套丛书的编写，采用了开放的模式，石油、石化、化工行业的信息技术应用专家、科研院所和高等院校的学者和教授，以及国外知名信息技术公司的高层技术主管“三结合”，参与书稿的讨论或撰写，达到了博采众长、兼收并蓄的效果。

该套丛书反映了石油、石化、化工行业信息技术的最新应用成果，具有前瞻性和先进性；同时又深入浅出，具有良好的实用性和可读性。丛书的编写原则是成系列而又不繁杂，选题新颖而又避免重复，突出行业特点而不是仅考虑通用性，重视实用而不仅偏重理论，也可以说是一套具有技术性、实用性、工具性、通俗性的高级科普读物或工具丛书。

在本书编写过程中，许多国内外石油、石化、化工行业的信息技术应用专家，高等院校、科研院所从事信息技术应用教学科研的教授、学者、化工出版社的领导和编辑，以及国内外许多 IT 公司的高级技术总监和顾问为本丛书的策划、组织、编写付出了大量心血，提供了大量资料甚至经费上的支持。在此，我谨代表中国化工学会暨信息技术应用专业委员会、代表丛书编委会向所有为丛书做出贡献的同志、朋友表示衷心的感谢！

社会在进步，科学在发展，技术在不断涌现。我希望这套丛书在知识经济条件下，能成为石油、石化、化工领域的各级管理人员、技术工人和工程技术专家在信息化建设的过程中爱看、经常看的工具书。

中 国 工 程 院 院 士
中 国 化 工 学 会 理 事 长
《化学工业信息化丛书》编委会主任



2006 年 1 月

前 言

本书系《化学工业信息化丛书》中的一本，在整个化工企业信息化的架构中，化工过程的模拟与优化处于基础地位。因为，不论是化工企业的设计，还是操作运行都必须建立在对各个生产装置的理解上，而这种理解知识的结晶就体现在装置内部进行的化工过程的数学模型上。只有我们对一个装置能通过数学模拟计算预测其表现性能，才能对其进行优化设计和操作。所以，也有人称，以模型为基础的过程模拟与优化是信息化架构的核心。

本书的第1章、第2章、第4章及第5章的化工过程的在线实时优化一节由杨友麒执笔，第3章和第5章由项曙光执笔。整本书在历时两年的编写过程中，得到了美国 Aspen-Tech 公司刘有鸿博士、徐晓燕工程师的帮助，也得到了大庆石化总厂计算机开发公司原流程模拟室主任庄芹仙高级工程师的帮助，在此一并表示谢意。

本书在编写时尽量遵循《化学工业信息化丛书》的编著指导思想和原则，即可读性、先进性和实用性的原则。为了适应广大工作在生产一线的技术人员和管理干部的需要，尽量减少繁杂的理论公式推导；着重介绍应用案例分析；介绍当前模拟软件所达到的水平和如何实际应用软件来解决问题。但由于我们的水平有限，掌握的材料有限，所以这本书难免有不尽如人意之处。我们诚恳地欢迎读者不吝赐教，提出宝贵意见，以便今后再版时改进。

作者
2005年7月

目 录

第 1 章 绪论	1
1.1 过程模拟的一般方法	1
1.1.1 物理模拟与数学模拟	1
1.1.2 数学模型化的步骤	2
1.1.3 化工系统模拟的层次	3
1.1.4 数学模型的类型	3
1.2 数学模拟的用途及限制	4
1.2.1 化工开发的数学模拟	5
1.2.2 化工设计中的数学模拟方法	6
1.2.3 改进步化工厂生产操作的数学模拟方法	8
1.2.4 过程控制中的数学模型	8
1.2.5 规划和计划阶段中的数学模型	9
1.2.6 数学模拟方法的限制	9
1.3 过程模拟与优化	10
参考文献	12
第 2 章 单元过程的稳态模拟	13
2.1 基本概念	13
2.1.1 过程系统模拟	13
2.1.2 稳态过程模拟	13
2.1.3 过程模拟问题类型	14
2.1.4 过程模拟的基本环节	15
2.1.5 单元模型的变量选择和自由度分析	16
2.1.6 过程模拟应用中应注意的问题	21
2.2 通用单元操作过程模拟	21
2.2.1 相平衡及闪蒸器	21
2.2.2 物料的加合与分割	25
2.2.3 泵	26
2.2.4 压缩机与膨胀机	27
2.2.5 热交换器	28
2.2.6 多组分混合物分离塔	30
2.2.7 化学反应器模型	32
2.3 计算流体力学 CFD 模拟	41
2.3.1 计算流体力学的基本原理	42
2.3.2 CFD 模拟软件的功能	43
2.3.3 CFD 模拟软件的结构	45

2.3.4	CFD 模拟的应用优越性及特点	45
2.3.5	CFD 的应用步骤	46
2.3.6	CFD 技术的成功应用案例	47
2.4	聚合过程的模拟	48
2.4.1	聚合过程模拟软件的功能模块	49
2.4.2	聚合过程模拟软件的应用	51
2.4.3	聚合过程模拟的应用案例	51
2.5	专用化学反应器的稳态模拟	57
2.5.1	乙烯裂解炉的模拟	57
2.5.2	催化裂化反应器——再生器系统的模拟	65
2.6	换热器及加热炉的模拟优化	68
2.6.1	概论	68
2.6.2	管壳式换热器的模拟优化	70
2.6.3	管壳式换热器的优化设计案例 (HTFS 软件计算结果)	76
	参考文献	79
	第 3 章 稳态流程模拟	81
3.1	流程模拟的基本概念	81
3.1.1	过程与系统	81
3.1.2	流程模拟系统简介	82
3.2	过程系统模型	84
3.2.1	过程系统模型	84
3.2.2	流程模拟模型的构成	85
3.2.3	流程结构的表述	86
3.2.4	过程系统模型建立	89
3.2.5	流程系统模型示例	91
3.3	序贯模块法	92
3.3.1	序贯模块法的基本思想	92
3.3.2	过程系统分块方法	95
3.3.3	流程系统断裂方法	97
3.3.4	收敛模块	97
3.3.5	控制模块	100
3.3.6	序贯模块法的优缺点	101
3.4	联立方程法	103
3.4.1	联立方程法的基本思想	103
3.4.2	流程系统方程组的产生	103
3.4.3	联立方程法的求解策略	104
3.4.4	方程组分解	106
3.4.5	稀疏线性方程组求解	107
3.4.6	联立方程法的优缺点	108
3.5	流程模拟的其他方法	109

3.5.1	联立模块法	109
3.5.2	数据驱动法	109
3.5.3	人工智能参入法	109
3.6	流程模拟系统	110
3.6.1	定义、分类及结构	110
3.6.2	物性系统	112
3.6.3	国外流程模拟系统的简单比较	115
3.7	流程模拟应用案例	116
3.7.1	流程模拟的一般步骤	116
3.7.2	年产10万吨乙醇生产装置反应工序模拟	118
3.8	流程模拟发展趋势	129
3.8.1	扩大可模拟物系的范围	129
3.8.2	向动态模拟发展	129
3.8.3	稳态模拟与动态模拟的结合	129
3.8.4	开发新的模型	129
3.8.5	软件间的集成	130
3.8.6	软件的智能化	130
3.8.7	基于Web的远程应用	131
	参考文献	131
第4章	动态过程系统的模拟	133
4.1	由稳态模拟转向动态模拟	133
4.1.1	为什么需要动态模拟	133
4.1.2	动态模拟与稳态模拟的差别	134
4.1.3	控制器的设置	138
4.1.4	两种不同的动态模拟系统	140
4.2	动态过程系统的建模	141
4.3	动态过程数学模型的数值解算方法	142
4.3.1	从欧拉法看数值积分解法的特点	142
4.3.2	四阶龙格-库塔法	143
4.3.3	显式及隐式积分法	144
4.3.4	数值解算法的稳定性	145
4.3.5	常微分方程的刚性问题	147
4.4	单元过程的动态模拟	149
4.4.1	分离槽的动态模拟	149
4.4.2	精馏塔的动态模拟	161
4.5	复杂的全厂过程的动态模拟	171
4.5.1	乙苯制造工艺过程	171
4.5.2	稳态设计	174
4.5.3	控制结构	174
4.5.4	模拟结果	176
4.6	动态仿真培训系统	179

4.6.1	仿真培训系统的作用	179
4.6.2	动态数学模型是系统的核心	181
4.6.3	仿真培训系统的软件环境	183
4.6.4	仿真培训系统的硬件环境	189
4.6.5	今后的发展趋势	191
	参考文献	193
第5章	化工过程的优化	194
5.1	过程优化基础	194
5.1.1	过程优化的概念	194
5.1.2	过程优化的基本要素	194
5.1.3	过程优化问题的分类	195
5.1.4	过程优化问题的数学模型	197
5.1.5	过程优化的一般步骤	198
5.1.6	过程优化问题举例	198
5.2	最优化方法简介	202
5.2.1	确定性搜索方法	203
5.2.2	随机性搜索方法	203
5.2.3	确定性搜索方法与随机性搜索方法的简单比较	203
5.3	过程优化的确定性方法	204
5.3.1	无约束最优化方法	204
5.3.2	约束最优化方法	210
5.3.3	序贯二次规划法	216
5.4	过程优化的随机性方法	220
5.4.1	模式识别法	221
5.4.2	遗传算法	223
5.4.3	模拟退火算法	225
5.4.4	粒子群优化算法	227
5.5	多目标优化	228
5.5.1	多目标优化的基本概念	228
5.5.2	多目标优化的基本方法	229
5.5.3	多目标优化进展及应用	234
5.6	化工过程的在线实时优化	235
5.6.1	在线实时优化的基本概念	235
5.6.2	在线实时优化的应用场合与经济效益	239
5.6.3	炼油厂常减压装置的实时优化应用案例	240
	参考文献	243
附录 A	单元过程模拟	246
附录 B	流程模拟软件	255
附录 C	计算流体力学软件 CFD	271
附录 D	动态模拟及仿真培训软件	279
附录 E	实时优化软件	291

第 1 章 绪 论

进入 21 世纪，以化学工业为代表的过程工业正在发生深刻的变化，这种传统工业正面临新世纪的挑战。这种挑战可以从以下几个方面看出。

a. 由于信息技术的高度发展和经济全球化趋势，化工企业正向数字化、网络化过渡，以制造过程自动化为核心的计算机集成制造系统 CIMS 正向全价值链的自动化和优化方向发展。

b. 大宗化学品的赢利空间持续下降，迫使化学工业转向精细化工，生产方式也正向着个性化订制模式转变。

c. 21 世纪是可持续发展的世纪，这将促使化工企业由单纯追求利润最大化，转向节约资源利用，开发环境友好的过程及产品并兼顾经济效益的多目标追求。因此，相应出现了“绿色化工”、“绿色过程系统工程”等新兴学科及技术。

为了迎接以上各种挑战，化学工业势必逐步实现全盘信息化，从产品开发到工业制造装置的生产运行系统 MES 都会在计算机辅助或控制之下，而这一切的基础核心就是“化工过程的模拟与优化”。在本章中我们先给读者介绍以下几个基本概念。

- a. 什么叫“过程模拟”？它的一般方法如何？
- b. 过程模拟有什么用处？这种方法有什么优越性和限制？
- c. 数学模拟与优化是什么关系？

1.1 过程模拟的一般方法

1.1.1 物理模拟与数学模拟

如果一个化工过程系统 A 是比较复杂的系统，而无法预知其效果如何，则可以找到一个比较简单的系统 B，其操作特性与系统 A 相同，但是比 A 容易进行试验或解算。因而，为了预知系统 A 的效果，就可以用试验系统 B 的性能来代替 A。这就是说，利用一个更为方便、经济而性能相似的系统 B 来模仿系统 A 的性能。也就是，利用一个更为方便、经济而性能相似的系统 B 来模仿系统 A 的性能，这种方法称为“模拟”（simulation），有时也称为“仿真”。而试验系统 B 称为系统 A 的“模型”。

如果系统 B 与系统 A 不仅性能相似（描述系统的数学方程相同），而且物理化学过程本质也一样，只不过规模尺寸大小不同，则这种模拟称为“物理模拟”（又称相似模拟）。例如，利用中间试验车间 B 来模拟生产工厂 A 就是这类模拟。

如果系统 A 和系统 B 只是描述方程式相同，而系统 A 是化工过程而系统 B 是电子计算机，二者物理过程本质不同，则称为“类似模拟”。如果模拟系统 B 是一台数字计算机，它所演算的数学方程组可以足够准确地描述化工过程 A，于是，为了知道化工过程 A 的特性和效果，只要在计算机上对“数学模型”B 进行试验研究（数学试验）就可以了。这种方法称为“数学模拟”，本书讨论的“化工过程模拟”均为这种数学模拟。

由于数字化技术的长足进步，用计算机建立数学模拟的虚拟系统取代实际物理（包含化学）现实系统不但是当前进行系统研究的普适化方法，而且已成为生产操作运行的辅助工具。

1.1.2 数学模型化的步骤

建立数学模型的目的是要找到尽可能简单的数学描述方法，使之能足够精确地描述所研究的过程特性。数学模型不可能也不必要完全描述实际过程，只应反映我们感兴趣的主要特性，在精度足够的前提下，所用的数学方程愈简单愈好。

要模拟一个系统，往往需要将其分解为一些基本单元过程，这涉及系统分析的方法，容以后介绍。此处只就单元过程的数学模型建立一般步骤，如图 1-1 所示。每一步骤的编号在框的左上角。

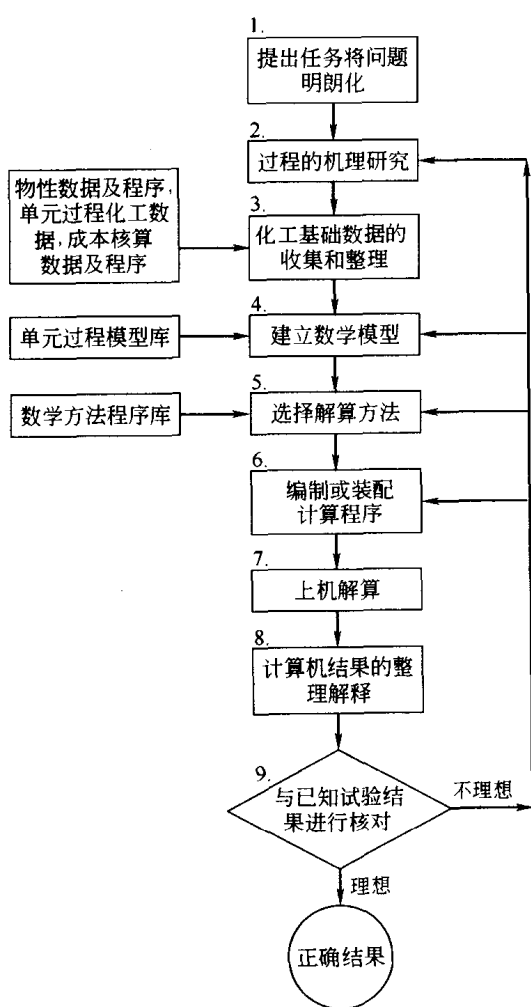


图 1-1 单元过程数学模型建立步骤

第一步：提出问题。这往往是具有决定意义的一步，因为提得是否正确恰当，将问题明朗化过程是否抓住主要矛盾，很大程度上将影响最终效果。

第二步：从有关的资料和基本原理中寻找对象过程的已知规律，以奠定该过程的理论基础。如果没有现成理论可循，或者有好几种理论，那就要做一些选择或假定。

第三步：化工基础数据的收集和整理。这里包括物性数据、该单元操作的化工数据及成本核算数据。如果现成的数据库中有，则比较省事，否则还要将其编成程序供计算使用。

第四步：建立数学模型。这往往是比较困难的一环。分析人员要善于将次要影响因素忽略，适当地将那些在过程中变化不大的变数当作常数，用平均值代替，以减少变量和方程式数目。并不是任何过程都可以用确定性模型来描述，为了判别哪一种模型最合适还有一个模式识别问题。

第五步：选择解算方法。最好从已有的数学方法程序中挑选。如果实在没有合适的现成程序可以用，则必须自己从头编，这就比较麻烦，最好与计算人员合作解决。

第六步（编制或装配计算程序）和第七步（上机解算）是不困难的。在现代计算机上往往直接由工程技术人员在终端上进行。

第八、第九步：整理计算结果并与已有知识做核对，来验证数学模型建立得是否正确。由于真实过程的复杂性及数学方法的限制，开始开发的数学模型往往是高度理想化的。也就是说，简化到只能反映过程的少数特性。这种简化是否已经足够确切地反映了过程的有关特

性，就要依靠系统分析人员进行判断，并找出其毛病及修正方法。这往往要反复循环才能得到理想结果。

1.1.3 化工系统模拟的层次

化工系统模拟的对象正在从传统的以设备及流程为对象向两头延伸：一方面向以产品设计为代表的微观世界延伸；另一方面则向以供应链管理为代表的超大规模系统延伸。这种情形如图 1-2 所示。

由图 1-2 中可以看到，化工过程系统的模拟从规模上看可以分成许多层次，下面一层模拟的结果和输出，使之成为上一层模拟的输入。从大体上看可分为三大层次：以产品设计为核心的分子模拟，以“三传一反”和流程模拟为中心的传统化工过程模拟，以企业经营管理为中心的管理业务过程的模拟。

因为在这一系列丛书中，微观的分子模拟和宏观的管理业务模拟有专册介绍，所以这里讲的“化工过程模拟”就是指尺寸在 $10^{-7} \sim 10^2$ m 规模的传统化工制造过程的模拟。

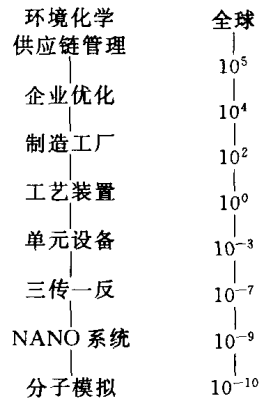
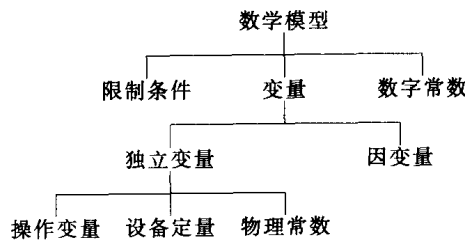


图 1-2 过程系统的规模和层次

1.1.4 数学模型的类型

数学模型是由描述过程的数学方程及限制条件所组成的，其构成可以视为：



1.1.4.1 按数学描述的本质分类 按模型描述的本质来看，可以分为机理模型与经验模型。

机理模型：通过分析过程的物理-化学本质和机理，利用化学工程学的基本理论，如质量守恒定律、能量守恒定律及化学反应动力学等基本规律来建立一套描述过程特性的数学方程式及边界条件。这种数学方程组往往比较复杂，但应具有明确的物理意义。

经验模型：直接以小型试验、中间试验或生产装置的实测数据为根据，只着眼于输入-输出关系，而不管过程本质，所以又称黑箱模型。这种由大量数据中归纳出有用的经验模型的方法已形成一个新兴热点分支，称为“数据挖掘与知识获取 (data mining and knowledge discovery)”，简称“数据挖掘”。

1.1.4.2 按与时间的关系分类 按对象的时态本质来看，可以分为稳态模型与动态模型。

稳态模型：过程对象主要研究的参数不随时间变化而变化，如物料及能量平衡模型。这种模型从数学上讲往往涉及代数方程组，是目前应用得最广泛的情况。

动态模型：考虑过程对象的参数随时间变化的关系，反映过程在外部干扰作用下，引起的不稳定过程或开、停车过程，或某些间歇操作过程。在模型中时间是一个主要自变量，在数学表现上往往是常微分方程组问题。

1.1.4.3 按过程属性分类 按对象的属性不同，又可分为确定模型、模糊模型和随

机模型。

确定模型：每个变量对任意一组给定的条件取一个确定的值或一系列确定值时，这种模型称为确定模型。

模糊模型 (fuzzy model)：指输入、输出、状态变量具有模糊性关系的数学模型。其根本特征在于模糊集，以往的集合论中元素是“分明的”——要么属于某一集合，要么就不属于，即其从属函数或取 1 或取为零；而模糊集中的元素的从属函数可在 0~1 中连续取任意值。

随机模型：用来描述一些不确定性的随机过程，这些过程服从统计概率规律。用来描述这种过程的输入-输出关系的变量或参数所取的值是无法准确知道的。例如，按统计方法说：“ X 值为 $(a \pm b)$ 的或然率为 95%”，意思是：在 X 值的长期变化中大于 $(a + b)$ 或小于 $(a - b)$ 的情况只有 5%。如含有气泡的聚式流化床中气泡的生成运动及颗粒运动，聚合反应器中高分子聚合物的生成，都是典型的随机过程。随机模型比确定模型更难处理，本书不讨论这类模型。

从系统工程学角度，又可将数学模型分为黑箱模型、白箱模型和灰色模型。

白箱模型：指模型的输入与输出之间可以通过机理分析建立起确定映射关系的模型。

黑箱模型：指对某些复杂化工过程系统的内部机理完全不了解，认为该系统处于黑箱之中，只建立输入（向）量与输出（向）量之间的关系。黑箱模型的建模基于试验观测数据，是一种纯经验模型。

灰色模型 (gray model)：信息完全明确的系统称为白色系统，信息完全不明确的称为黑色系统。部分明确、部分不明确的系统称为灰色系统，基于灰色系统理论的数学模型称为灰色模型。这种灰色系统理论是在 1982 年提出的，它用灰色数、灰色方程、灰色规律及灰色群来描述。

1.1.4.4 按过程对象的数学描述方法分类 按过程对象的数学描述方法不同，可以分为集中参数模型和分布参数模型。

集中参数模型：过程参数随空间位置不同的变化被忽略的情况下，过程系统的各种参数都被看作在整个系统中是均一的，这样建立的模型中，各种参数的数值与空间位置无关，故称集中参数。数学上表现为代数方程组或常微分方程组（动态情况下）。

分布参数模型：要研究过程参数在整个系统空间从一个点到另一个点上性能的变化，则这些过程参数就不再与空间无关，而成为空间位置的函数。数学上表现为偏微分方程式。

值得注意的是，同样一个过程对象，如果处理方法不同，可以是集中参数模型，也可以是分布参数模型，这要视所要研究对象的何种特性而定。如一块塔板，只研究其塔板效率，则可以视为集中参数模型；气相进、出口组分与液相进、出口组分均各取一个确定值。但如果要研究其“点效率”，则进入塔板的气相组分在不同位置可能不同，塔板上的液相组分在各点上也可以不同，出塔板的气相组分自然也就因位置而异。这就要表达为分布参数模型了。

1.2 数学模拟的用途及限制

利用数学模型在计算机上做实验以研究系统的性能是系统工程学的基本方法。由于计算机技术的长足进步，这种基于数学模型的数学模拟技术已从过程/设备的模拟发展到一个化工厂的模型，形成“虚拟化工厂”、“桌面炼油厂”等虚拟系统，可以模拟一个工艺

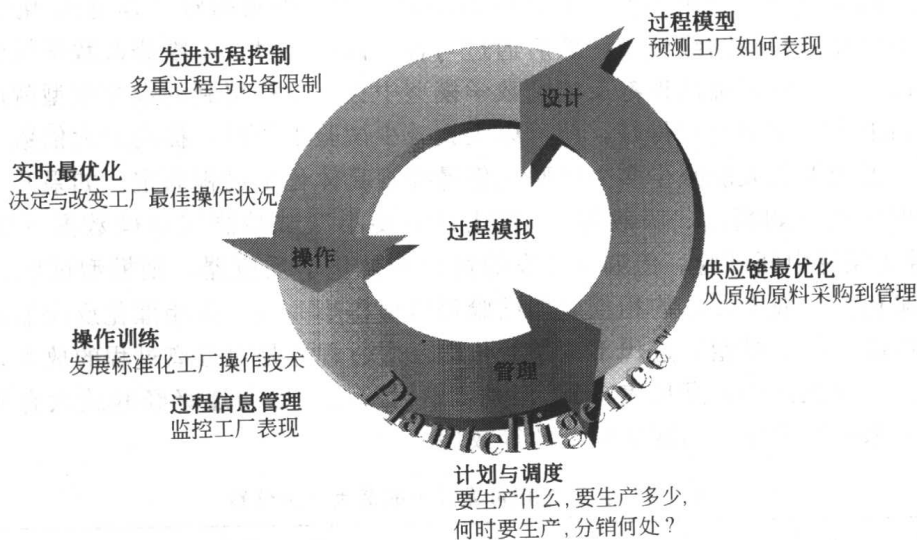


图 1-3 化工过程模拟的用途

装置/一个炼油化工厂从设计（预测）到操作运行，到性能反馈、改进/改造各个细节，如图 1-3 所示。

下面分几个方面介绍过程模拟的用途。

1.2.1 化工开发的数学模拟

近代化工过程开发的特点是：要求放大为工业化的速度愈来愈快；开发出的新工艺过程不仅要在技术经济上合理，而且应当达到最优化；开发提供的信息要全面完整，以适应后部工业化设计的要求。

采用过去传统的经验逐级放大方法是无法满足这些要求的。近代化工过程的开发是由实验室中的试验和计算机上的数学模拟两个部分组成的，并且由两组不同的技术人员平行地进行，相辅相成，直到工业化，如图 1-4 所示。

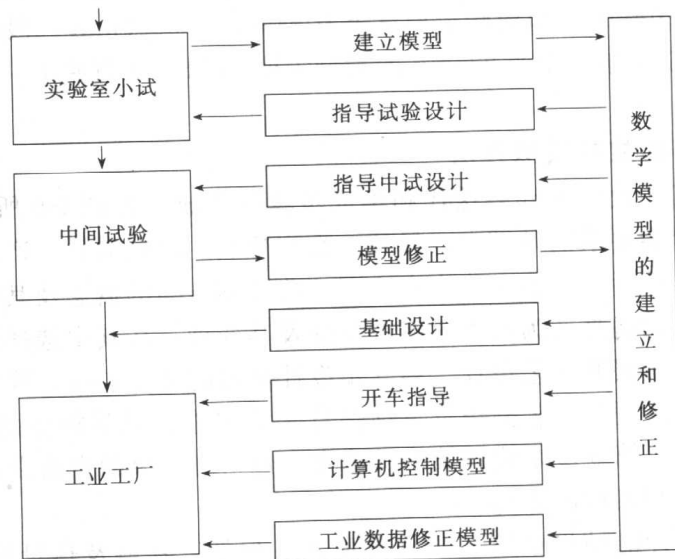


图 1-4 化工开发放大中的试验与数学模拟关系

这种方法的实质是：利用实验室中获得的结果及前人积累的对过程物理-化学规律的了解，建立一个描述过程的初级模型，然后通过各种试验核对，不断修改数学模型，尽可能地把我们对这一过程的正确认识都反映到数学模型中去，这样得到的数学模型就成为放大设计的基础。如果数学模型建立得好，就可以大大减少试验工作量，提高放大倍数。

然而数学模型拟放大能减少多少试验工作量要视具体化工过程而定。如果开发的过程只是单纯的物理过程（如精馏、吸收等），往往只需要小型试验测定基础数据（如相平衡数据），而不需要经过中间试验。但如果开发的过程涉及化学反应器，则模型试验乃至中间试验往往不可避免。一般来说，均相反应器试验可以做得小一些，多相催化反应器则试验要做得大一些。借助于数学模型，近代不论是对化学反应过程还是对分离过程的放大倍数已有显著提高，最新资料提供的数据见表 1-1。但是，这时的试验已与逐级经验放大有所不同，是在理论指导下检验简化了的数学模型的等效性。

表 1-1 化工过程可靠放大的最大放大倍数

放大对象		放大倍数	放大对象		放大倍数
化学反应器	多管固定床	>10000	分离过程	精馏塔	1000~50000
	均相管式反应器	>10000		吸收塔	1000~50000
	均相搅拌槽反应器	>10000		萃取塔	500~1000
	鼓泡塔	<10000		干燥	20~50
	气-固流化床	50~100		结晶	20~50

数学模拟放大成功的典型例子，从 20 世纪 60 年代以来就有不少报道。例如美国在 20 世纪 60 年代开发丙烯二聚法制造异戊二烯的工艺过程时，核心的二聚反应器是气相均相管式反应器，在数学模型与小试结合吻合以后，跳过中间试验，放大 17000 倍进行大厂设计。

20 世纪 80 年代末，我国某大型化工公司开发从催化裂化和蒸汽裂解副产碳四中生产甲基叔丁基醚（MTBE）的案例也是成功地采用数学模拟放大方法的证明。他们从 1980 年起，只用了三年半的时间就完成了基础研究、过程工艺研究及工程研究等全过程。他们采用 3.7mL 的微型反应器研究了反应动力学，并测定了各种相关组分的二元、三元体系的汽液、液液平衡数据，从而建立了数据模型，在计算机上进行试验研究，找到反应的最优结构及流程。然后在 $\phi 8\text{mm} \times 3000\text{mm}$ 恒温管式模试上及 $\phi 89\text{mm} \times 5000\text{mm}$ 三段绝热床外循环中试上验证了数学模型。1986 年，年产 27500t 的大型工业 MTBE 装置建成，一次投产成功。

1.2.2 化工设计中的数学模拟方法

现代化工厂的工艺设计由许多迭代和集成步骤所组成，如图 1-5 所示。由左下角开始，在弄清当前状况及社会要求的基础上，导致一系列想法，包括原料、产品和将原料转化为产品的各种化学途径。然后，在第 3 步中产生了一些流程方案的概念及其变种，从其中选择最具吸引力的工艺流程结构来作为基本方案的概念及其变种，从其中选择最具吸引力的工艺流程结构来作为基本方案展开工艺设计。第 5 步设计基础的建立包括：确定设计参数；固定设计参数值的确定；对不同的工艺操作及特性估算关联式进行数学模型的选择；粗估水、电、汽等公用工程消耗量。第 6 步是设计策略的确定，包括对剩余的自由设计变量进行初值选定以及确定适合的物料和热量衡算的收敛方法。

基本方案工艺设计的结果如第 7 步框图所示，包括：物料及热量衡算；工艺流程一览表；工艺设备总结表；公用工程汇总表；工艺流程图；一个工艺说明；热力学第二定律分

析。工艺设计中还包括设备尺寸的计算书等。

基础方案设计还要求对投资和操作成本进行彻底分析，并导出经济上具有吸引力的评选指标或准则。第7步中列出了一些应当考虑的因素，如经济指标、热力学效率、可操作性、健康及安全的因素、环境保护问题，这一领域是发展较晚、难度较大的化工系统工程问题。最后，在采用适当的最优化目标函数下，按最优化策略进行自由设计变量和流程结构或二者之一的优化。

最后工艺设计一旦被接受，即可形成一个工艺设计报告，但有进一步要求辅加的信息，如精馏塔塔结构、反应器结构细节等。这里除了第1步和第2步主要依靠手工完成以外，从第3步~第10步无不以计算机模拟计算为基础，可统称为计算机辅助工艺设计 CAPD (Computer-Aided Process Design)。这些将在后面做具体介绍。

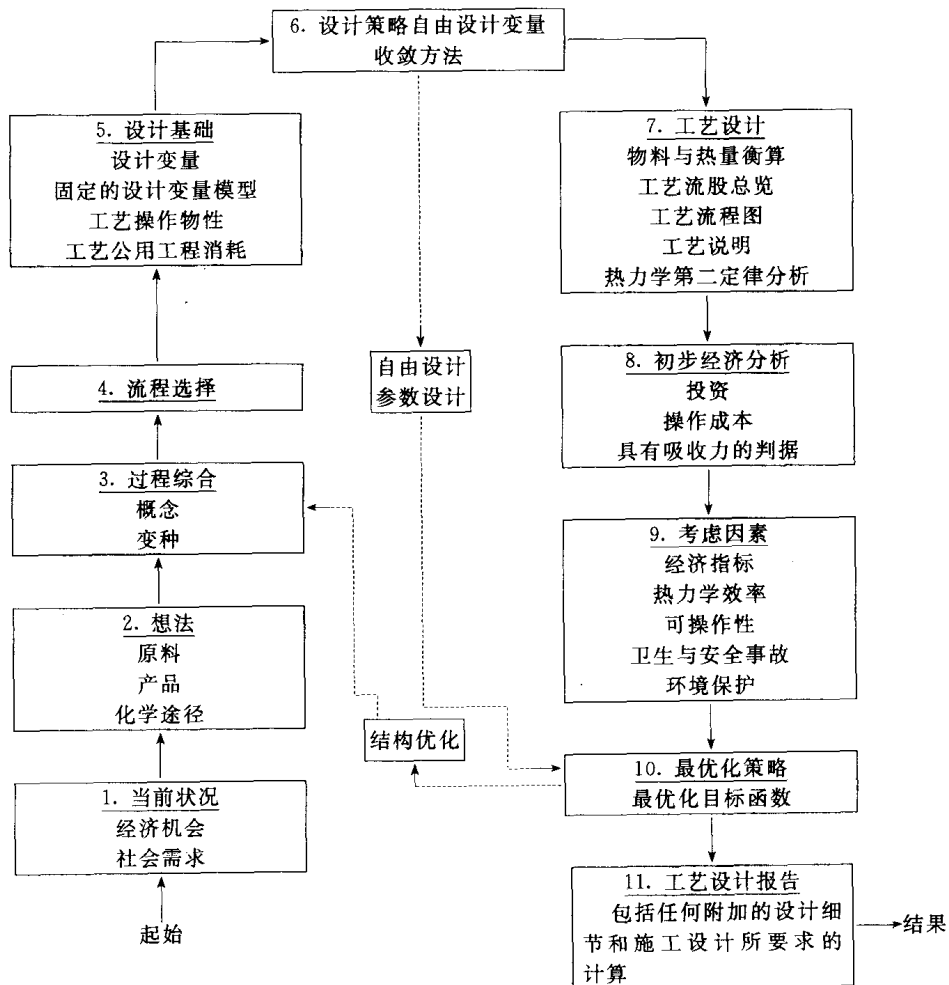


图 1-5 化工工艺设计的步骤

设计计算的核心环节是第7步工艺设计。这里首先是建立在单元操作数学模型基础上的流程系统的数学模拟，也就是通过整个系统的物料与热量衡算来确定各部位流股的温度、压力及组成，从而显示流程系统的性能。

采用计算机模拟技术进行化工设计不但使工作效率大为提高，而且便于多种方案评比甚至最优化，所以也使设计质量大为提高。不仅如此，计算机模拟所给出的信息既深入又全

面，为后续工作步骤提供了良好的条件。

1.2.3 改进化工厂生产操作的数学模拟方法

虽然在化工厂的设计中已考虑到结构与操作参数的最优化，但是实际投入生产的化工装置的操作往往并非处于最佳状态。这是由于：

- a. 现场的生产负荷可能比设计低得多或超负荷运行；
- b. 实际原料条件或其他生产条件与设计条件不符；
- c. 设计的计算公式可能不够精确，往往使设计的精馏塔塔板数偏多，回流量偏大，反应器转化率偏低等；
- d. 流程中的个别设备已得到革新提高（如更换了催化剂）或老化（如催化剂老化），因而使整个系统操作条件不再配套；
- e. 由于市场情况变化，可能要使某种产品的产量尽量提高，而另一种产品尽量减少，使生产策略发生相应变化。

所以，根据现场实际条件，建立数学模型，用计算机进行模拟和优化是具有现实意义的课题。而且操作参数的优化不涉及设备改造，具有投资少、见效快的优点，因而受到重视。

用模拟方法来优化生产操作有离线与在线之分。

离线模拟优化：指数学模型的输入不是实时地直接由装置测量得到的数据经过控制计算机（DCS 或其他转换装置）输入的，而是手工输入后，一个工况一个工况地模拟计算。

在线模拟优化：指数学模型的输入是由控制系统将装置测量得到的数据实时输入的，这就是要求以较快的计算机速度来完成模拟计算。这一方面对计算机速度提出了要求；另一方面也对数学模型的算法提出了要求。

由于离线模拟的模型是不变的，所以比较容易实施。但反过来时间一长，这种“以不变应万变”的模型就会失去指导作用。而在线模拟则要求能根据装置变化自动修正模型中的参数，因此其数学模型是“活”的。虽然不容易实施，且其费用也高，但指导作用却大得多。

按优化对象的不同，操作参数的优化可以分为以下几种。

a. 单元设备优化 通常选择生产中最薄弱的一环进行模拟优化，因而只需要单元设备的数学模型。

b. 流程系统的优化 从系统工程观点出发，以流程整体为对象来寻找各个单元操作的优化条件，这就要借助流程模拟系统软件。

按数学模型的本质不同，又可分为以下几种。

a. 经验模型方法 如统计模型法和模式识别法。

b. 机理模型方法 如以反应动力学为基础的反应器严格模型，以汽液平衡计算为基础的分离塔模型。

c. 混合模型方法 如在流程模拟中对反应机理不清楚的反应器采用经验模型，其他均采用机理模型，组合在一起进行流程模拟与优化。

1.2.4 过程控制中的数学模型

在过程控制中要弄清楚对象的输出参数对输入参数的响应关系，表达这种响应关系的动态方程式就是控制数学模型。

在经典控制理论中，人们往往不需要确切了解对象过程的数学模型，而假定其输入输出