

第 27 篇 过程系统工程

主稿、编写人 袁 一 大连理工大学 教授
编写人 姚平经 大连理工大学 教授
俞裕国 大连理工大学 教授

1 概论	27-2	2.4 化工过程的数学模型	27-18
1.1 过程系统工程的领域	27-2	2.4.1 数学模型建立的基本原理	27-18
1.2 过程系统工程的基本概念	27-3	2.4.2 化工过程模拟对数学模型的要求	27-18
1.2.1 系统, 环境	27-3	2.4.3 化工过程模型化的进展与模型化 基本方法示例	27-19
1.2.2 过程系统	27-3	2.4.4 数学模型的简化	27-22
1.2.3 过程系统分析	27-3	2.5 化工过程系统的物料衡算与能量 衡算	27-23
1.2.4 过程系统综合	27-3	2.5.1 化工过程系统的物料衡算	27-23
1.2.5 过程系统优化	27-3	2.5.2 化工过程系统的能量衡算	27-24
1.2.6 过程系统设计	27-3	2.6 稳态流程模拟的序贯模块法	27-26
1.3 过程系统工程的研究方法与手段	27-3	2.6.1 序贯模块法的基本问题	27-26
1.3.1 数学模拟	27-4	2.6.2 系统的分隔与排序	27-27
1.3.2 数学模型的类型与建立	27-4	2.6.3 断裂	27-29
1.4 过程系统结构的表示	27-4	2.6.4 断裂流股变量的收敛	27-32
1.4.1 图形表示	27-4	2.6.5 控制模块	27-34
1.4.2 矩阵表示	27-5	2.6.6 应用实例	27-35
一般参考文献	27-6	2.7 稳态流程模拟的联立方程法	27-43
参考文献	27-6	2.7.1 基本原理与基本特点	27-43
2 化工过程系统的稳态模拟	27-6	2.7.2 稀疏线性方程组的解法	27-44
符号说明	27-6	2.7.3 决策变量的选择	27-47
2.1 稳态模拟的基本知识	27-7	2.8 稳态流程模拟的联立模块法	27-48
2.1.1 数学模型的基本类型与主要形式	27-7	2.8.1 基本策略	27-48
2.1.2 标准型问题、设计型问题与最优化问题	27-8	2.8.2 简化模型建立中问题的描述方式	27-48
2.1.3 稳态模拟的基本方法	27-8	2.8.3 Jacobi 矩阵的计算	27-49
2.1.4 流程模拟系统软件	27-9	2.8.4 分隔与断裂	27-50
2.2 物性系统	27-10	2.8.5 应用实例	27-51
2.2.1 物性系统的作用与结构	27-10	一般参考文献	27-55
2.2.2 通用模拟系统的物性数据库	27-12	参考文献	27-55
2.2.3 工程设计专用数据库	27-13	3 过程系统综合	27-57
2.3 化工单元与化工流程的自由度分析	27-14	符号说明	27-57
2.3.1 流股的自由度	27-14	3.1 过程系统综合研究的主要领域	27-58
2.3.2 化工单元的自由度分析	27-14	3.2 过程系统综合的基本方法	27-59
2.3.3 化工流程的自由度分析	27-18		

3.3	换热器网络综合	27-59
3.3.1	换热器网络综合的进展	27-59
3.3.2	换热器网络综合的目标	27-60
3.3.3	换热器网络综合的方法	27-61
3.3.4	今后的发展趋势	27-74
3.4	多组分分离序列的综合	27-75
3.4.1	分离序列综合问题	27-75
3.4.2	分离序列的能耗	27-76
3.4.3	直观推断规则	27-77
3.4.4	有序直观推断法	27-78
3.4.5	模糊直观推断法	27-79
3.5	公用工程系统的综合——结构优化法	27-80
3.6	过程系统能量集成	27-82
3.6.1	整个过程系统的设计	27-82
3.6.2	反应器和分离设备设计中的相互	

1 概 论

随着科学技术的进步,现代过程工业实现了综合生产,生产装置日趋大型化,产品品种精细化,要求实现整个装置的最优设计、最优控制和最优管理,并在安全、可靠、对环境污染最小的情况下运行。在能源紧张、竞争日益加剧的情况下,以单元操作概念为基础的传统的化学工程方法已不能适应时代的要求。60年代初,在系统工程、运筹学、化学工程学、过程控制及计算机技术等学科的基础上,产生和发展起来一门新兴的技术学科——过程系统工程。

60年代是过程系统工程产生和发展的理论准备时期,代表性的研究者有美国的 Rudd 和 Watson (1968)^[1], Himmelblau 和 Bischoff (1968)^[2], 日本的矢木荣和西村肇 (1969)^[3], 苏联的 Кафаров (1971)^[4]等,上述论著开创性地阐述了过程系统工程的研究方法和内容,并给以不同的名称,如“过程工程”、“化学过程工学”、“化工控制论”等。

70年代是过程系统工程走上实用的时期。随着计算机应用的普及,采用过程系统工程方法研制工业用化工流程通用模拟系统,对过程系统生产实现计算机控制,取得显著经济效益。

80年代是过程系统工程普及推广的时代,不仅在化工、石油、石油化工、核工业和能源等过程工业中获得广泛应用,而且向冶金、轻工、食品等工业部门推广,有力地促进了这些部门生产技术的发展,相应地,过程系统工程学科在理论、方法和内容方面也在不断发展和完善。

90年代,计算机技术的显著进步,使复杂大系统的

关系	27-83
3.6.3 蒸馏过程与系统的热集成	27-84
3.6.4 公用工程与过程系统的能量集成	27-87
一般参考文献	27-89
参考文献	27-89
4 人工智能技术在化工中的应用	27-90
4.1 专家系统及其在化工中的应用	27-90
4.1.1 专家系统的定义及基本结构	27-90
4.1.2 专家系统的建造	27-93
4.1.3 化工领域中的专家系统	27-94
4.2 人工神经网络及其在化工中的应用	27-95
4.2.1 人工神经网络及其学习算法	27-95
4.2.2 人工神经网络在化工中的应用	27-96
一般参考文献	27-97
参考文献	27-97

分析与综合成为可能。过程系统工程学科将在国民经济各部门深入广泛地应用。

1.1 过程系统工程的领域

过程系统工程,或化工系统工程,是将系统工程学的理论和方法应用于过程工业领域的一门边缘学科,是化学工程的一个分支^[5]。

系统工程学是以系统(特别是大系统)为对象的一门跨学科的边缘科学。它是根据总体协调的需要,将自然科学和社会科学中的某些思想、理论、方法、策略和手段等从横的方面有效地组织起来应用于实践中,是应用现代数学和计算机等工具对系统的构成要素、组织机构、信息交换和自动控制等功能进行分析研究,而达到最优设计、最优控制和最优管理的目标,是为更加合理地研制和运用系统而采取的各种组织管理技术的总称。归根结底是一种工程学的方法论^[6]。

过程工业是从给定的原料,通过物理和化学操作,经济地生产附加价值更高的产品。一个完整的过程工业系统从研究开发直到操作运行的全过程如图 1-1 所示^[7]。根据市场调查和过程研究开发以及经营管理的决策等资料,可以着手生产某项产品的过程设计及设备设计,然后按着图示顺序进行设备制造、安装、调试和投产运行。原料、能源、市场、技术等状况的变化,这一过程系统还需要不断改进,以达到相应的最优状态。其中大体上包含了过程系统的规划、设计、操作和控制等方面。

过程系统工程的基本内容就是从过程系统的整体目标出发,根据系统内部各个组成部分的特性及其相互关系,确定在规划、设计、操作和控制等方面的最优策略。

第 27 篇 过程系统工程

主稿、编写人 袁 一 大连理工大学 教授
编写人 姚平经 大连理工大学 教授
俞裕国 大连理工大学 教授

1 概论	27-2	2.4 化工过程的数学模型	27-18
1.1 过程系统工程的领域	27-2	2.4.1 数学模型建立的基本原理	27-18
1.2 过程系统工程的基本概念	27-3	2.4.2 化工过程模拟对数学模型的要求	27-18
1.2.1 系统, 环境	27-3	2.4.3 化工过程模型化的进展与模型化 基本方法示例	27-19
1.2.2 过程系统	27-3	2.4.4 数学模型的简化	27-22
1.2.3 过程系统分析	27-3	2.5 化工过程系统的物料衡算与能量 衡算	27-23
1.2.4 过程系统综合	27-3	2.5.1 化工过程系统的物料衡算	27-23
1.2.5 过程系统优化	27-3	2.5.2 化工过程系统的能量衡算	27-24
1.2.6 过程系统设计	27-3	2.6 稳态流程模拟的序贯模块法	27-26
1.3 过程系统工程的研究方法与手段	27-3	2.6.1 序贯模块法的基本问题	27-26
1.3.1 数学模拟	27-4	2.6.2 系统的分隔与排序	27-27
1.3.2 数学模型的类型与建立	27-4	2.6.3 断裂	27-29
1.4 过程系统结构的表示	27-4	2.6.4 断裂流股变量的收敛	27-32
1.4.1 图形表示	27-4	2.6.5 控制模块	27-34
1.4.2 矩阵表示	27-5	2.6.6 应用实例	27-35
一般参考文献	27-6	2.7 稳态流程模拟的联立方程法	27-43
参考文献	27-6	2.7.1 基本原理与基本特点	27-43
2 化工过程系统的稳态模拟	27-6	2.7.2 稀疏线性方程组的解法	27-44
符号说明	27-6	2.7.3 决策变量的选择	27-47
2.1 稳态模拟的基本知识	27-7	2.8 稳态流程模拟的联立模块法	27-48
2.1.1 数学模型的基本类型与主要形式	27-7	2.8.1 基本策略	27-48
2.1.2 标准型问题、设计型问题与最优化问题	27-8	2.8.2 简化模型建立中问题的描述方式	27-48
2.1.3 稳态模拟的基本方法	27-8	2.8.3 Jacobi 矩阵的计算	27-49
2.1.4 流程模拟系统软件	27-9	2.8.4 分隔与断裂	27-50
2.2 物性系统	27-10	2.8.5 应用实例	27-51
2.2.1 物性系统的作用与结构	27-10	一般参考文献	27-55
2.2.2 通用模拟系统的物性数据库	27-12	参考文献	27-55
2.2.3 工程设计专用数据库	27-13	3 过程系统综合	27-57
2.3 化工单元与化工流程的自由度分析	27-14	符号说明	27-57
2.3.1 流股的自由度	27-14	3.1 过程系统综合研究的主要领域	27-58
2.3.2 化工单元的自由度分析	27-14	3.2 过程系统综合的基本方法	27-59
2.3.3 化工流程的自由度分析	27-18		

3.3	换热器网络综合	27-59
3.3.1	换热器网络综合的进展	27-59
3.3.2	换热器网络综合的目标	27-60
3.3.3	换热器网络综合的方法	27-61
3.3.4	今后的发展趋势	27-74
3.4	多组分分离序列的综合	27-75
3.4.1	分离序列综合问题	27-75
3.4.2	分离序列的能耗	27-76
3.4.3	直观推断规则	27-77
3.4.4	有序直观推断法	27-78
3.4.5	模糊直观推断法	27-79
3.5	公用工程系统的综合——结构优化法	27-80
3.6	过程系统能量集成	27-82
3.6.1	整个过程系统的设计	27-82
3.6.2	反应器和分离设备设计中的相互	

1 概 论

随着科学技术的进步,现代过程工业实现了综合生产,生产装置日趋大型化,产品品种精细化,要求实现整个装置的最优设计、最优控制和最优管理,并在安全、可靠、对环境污染最小的情况下运行。在能源紧张、竞争日益加剧的情况下,以单元操作概念为基础的传统的化学工程方法已不能适应时代的要求。60年代初,在系统工程、运筹学、化学工程学、过程控制及计算机技术等学科的基础上,产生和发展起来一门新兴的技术学科——过程系统工程。

60年代是过程系统工程产生和发展的理论准备时期,代表性的研究者有美国的 Rudd 和 Watson (1968)^[1], Himmelblau 和 Bischoff (1968)^[2], 日本的矢木荣和西村肇 (1969)^[3], 苏联的 Кафаров (1971)^[4]等,上述论著开创性地阐述了过程系统工程的研究方法和内容,并给以不同的名称,如“过程工程”、“化学过程工学”、“化工控制论”等。

70年代是过程系统工程走上实用的时期。随着计算机应用的普及,采用过程系统工程方法研制工业用化工流程通用模拟系统,对过程系统生产实现计算机控制,取得显著经济效益。

80年代是过程系统工程普及推广的时代,不仅在化工、石油、石油化工、核工业和能源等过程工业中获得广泛应用,而且向冶金、轻工、食品等工业部门推广,有力地促进了这些部门生产技术的发展,相应地,过程系统工程学科在理论、方法和内容方面也在不断发展和完善。

90年代,计算机技术的显著进步,使复杂大系统的

	关系	27-83
3.6.3	蒸馏过程与系统的热集成	27-84
3.6.4	公用工程与过程系统的能量集成	27-87
	一般参考文献	27-89
	参考文献	27-89
4	人工智能技术在化工中的应用	27-90
4.1	专家系统及其在化工中的应用	27-90
4.1.1	专家系统的定义及基本结构	27-90
4.1.2	专家系统的建造	27-93
4.1.3	化工领域中的专家系统	27-94
4.2	人工神经网络及其在化工中的应用	27-95
4.2.1	人工神经网络及其学习算法	27-95
4.2.2	人工神经网络在化工中的应用	27-96
	一般参考文献	27-97
	参考文献	27-97

分析与综合成为可能。过程系统工程学科将在国民经济各部门深入广泛地应用。

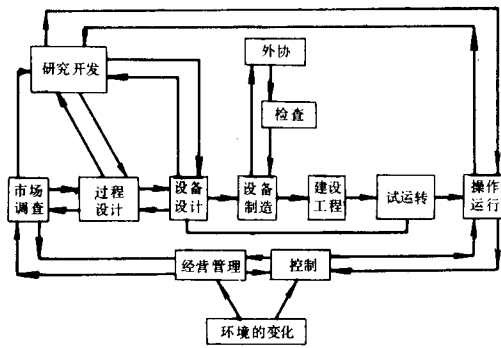
1.1 过程系统工程的领域

过程系统工程,或化工系统工程,是将系统工程学的理论和方法应用于过程工业领域的一门边缘学科,是化学工程的一个分支^[5]。

系统工程学是以系统(特别是大系统)为对象的一门跨学科的边缘科学。它是根据总体协调的需要,将自然科学和社会科学中的某些思想、理论、方法、策略和手段等从横的方面有效地组织起来应用于实践中,是应用现代数学和计算机等工具对系统的构成要素、组织机构、信息交换和自动控制等功能进行分析研究,而达到最优设计、最优控制和最优管理的目标,是为更加合理地研制和运用系统而采取的各种组织管理技术的总称。归根结底是一种工程学的方法论^[6]。

过程工业是从给定的原料,通过物理和化学操作,经济地生产附加价值更高的产品。一个完整的过程工业系统从研究开发直到操作运行的全过程如图 1-1 所示^[7]。根据市场调查和过程研究开发以及经营管理的决策等资料,可以着手生产某项产品的过程设计及设备设计,然后按着图示顺序进行设备制造、安装、调试和投产运行。原料、能源、市场、技术等状况的变化,这一过程系统还需要不断改进,以达到相应的最优状态。其中大体上包含了过程系统的规划、设计、操作和控制等方面。

过程系统工程的基本内容就是从过程系统的整体目标出发,根据系统内部各个组成部分的特性及其相互关系,确定在规划、设计、操作和控制等方面的最优策略。

图 1-1 过程工业的内容^[7]

1.2 过程系统工程的基本概念

1.2.1 系统, 环境

系统是由相互关联、相互制约、相互作用的一些部分组成的具有某种功能的有机整体^[8]。或者抽象地说,系统乃是元素的综合,而元素之间存在一定的相互关系,这些关系包括因果、逻辑、随机关系,以协调进行一定活动或完成一定任务。

环境是在系统的外部,而且是与该系统相互作用的所有元素的集合。环境的变化会影响系统,反之,系统的作用会影响到环境。系统及其环境构成了问题的整体。

某系统的部分集合所组成的系统称为子系统。属于某子系统的元素可以是其他子系统的环境元素。

开系统是指环境的变化会使系统的工作受到影响。而不受任何环境元素变化影响的系统称为闭系统。

1.2.2 过程系统

过程系统是对原料进行物理的或化学的加工处理的系统,它由一些具有特定功能的过程单元按着一定的方式相互联结而组成,它的功能在于实现工业生产中的物质和能量的转换;过程单元是用于进行物质和能量的转换、输送和储存;单元间借物流、能量流和信息流相联而构成一定的关系^[9]。

1.2.3 过程系统分析

过程系统分析,或过程分析,系指:对于系统结构及其中各个子系统均已给定的现有系统进行分析,即建立各子系统的数学模型,按着给定的系统结构进行整个系统的数学模拟,预测在不同条件下系统的特性和行为,借以发现其薄弱环节并给以改进^[5]。过程系统分析的概念如图 1-2 所示,即,对于已知的过程系统,给定其输入参数,求解其输出参数。具体些说,包含三部分内容,一是过程系统的物料和热量衡算,二是确定设备的尺寸及费

用,三是对过程系统进行技术经济评价。

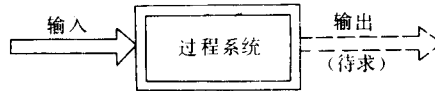


图 1-2 过程系统分析示意图

1.2.4 过程系统综合

过程系统综合,或过程综合,是过程系统工程学科的核心内容,系指:按照规定的系统特性,寻求所需的系统结构及其各子系统的性能,并使系统按规定的目标进行最优组合^[5,10]。过程系统综合的概念如图 1-3 所示,即,当给定过程系统的输入参数以及规定其输出参数后,确定出满足该性能的过程系统,包括选择所采用的特定设备及其间的联结关系,并提供某些变量的初值。

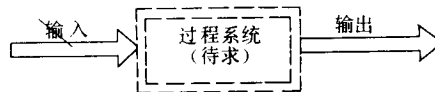


图 1-3 过程系统综合示意图

1.2.5 过程系统优化^[11]

过程系统优化或系统优化可分为参数优化和结构优化。参数优化是指:在一已确定的系统流程中对其中的操作参数(如温度、压力等)进行优选,以满足某项指标(如费用、能耗等)达到最优。如果改变过程系统中的设备类型或其相互间的联结,以优化过程系统,则称为结构优化。参数优化的理论研究及实际应用程度要比结构优化更成熟。

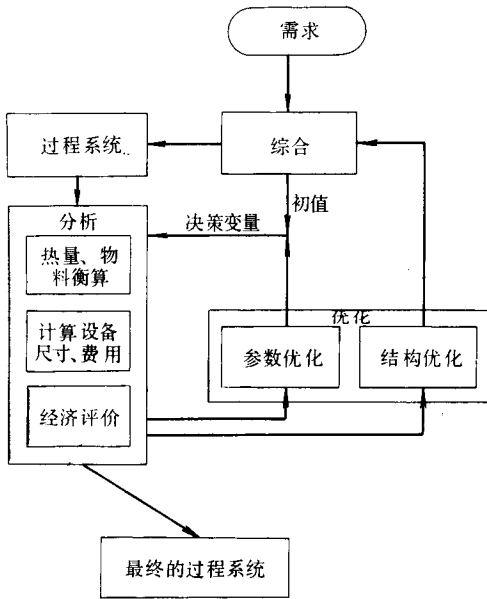
1.2.6 过程系统设计

过程系统设计或过程设计,原则上讲,是过程系统综合与过程系统分析交替过程的整体,它包括三个主要步骤,即,过程系统综合、分析与优化,其相互关系如图 1-4 所示^[11]。

1.3 过程系统工程的研究方法与手段

系统工程研究和处理问题的方法,一般称作系统方法论,它把研究的对象系统看作一个整体,同时把研究过程也看作一个整体,并自始至终贯穿着一种思想——最优化,即把系统中可调的部分调节到获得可能的最优性能。对于过程系统工程,沿用了这一系统方法论。

过程系统工程主要是采用数学模拟的方法进行研究,即建立过程系统的数学模型,描述出系统中的每一部分及总体性能,并给以评价。通常,数学模型是一组代数方程或微分方程,是实际过程系统在本质上的抽象。

图 1-4 过程系统设计示意图^[11]

过程系统模型包括两个基本部分，一是系统中各单元的数学模型，二是各单元之间相互联结，即系统结构。

由于过程系统模型的复杂性以及实现过程系统最优化的难度，计算机是研究工作的必要工具。

1.3.1 数学模拟

对数学模型进行求解的过程，称作数学模拟。进行过程系统的模拟，需要选择求解单元模型的计算方法，即在给定单元的输入参数、控制变量以及模型参数时，求出单元的输出参数；还需要确定系统中各单元的有利计算顺序，或联立求解系统方程的计算方法。

采用数学模型在计算机上进行试验比在实际过程系统上作试验要经济、灵活得多，可以减少中间放大试验，能够获得难以在实验条件下得到的性能信息，可以充分利用已有的理论成果来研究复杂过程系统的性能。

1.3.2 数学模型的类型与建立

过程系统模型是借助有关概念、变量、规则、逻辑关系、数学表达式、图形和表格等对系统的总体描述。其分类如下^[12,13]。

按建立模型的方法，可分为机理模型和经验模型。机理模型是按照化学工程学的基本原理建立的，适用范围广，但模型比较复杂。经验模型（又称黑箱模型）是依据实验数据或生产装置的实测数据，按统计理论得出过程系统输入-输出关系的数学表达式，形式比较简单，针对性强，但应用范围受到限制。

按是否考虑时间变量，可分为稳态模型和动态模型。

稳态模型中系统变量不随时间变化，故模型不含时间变量。动态模型则相反。

按是否考虑空间变量，可分为集中参数模型和分布参数模型。集中参数模型中各种变量值与空间位置无关。分布参数模型中的变量则与空间有关，是空间位置的函数。

按过程的特征，又可分为确定模型和随机模型。确定模型是指系统中的变量在一给定的条件下具有确定的数值。随机模型是采用概率统计规律来描述随机过程。

数学模型的建立过程称作模型化。模型化的最基本要求是，数学模型与所研究的过程系统原型具有客观的一致性。根据过程系统的特征与研究工作的需要，来选择恰当模型类型。以机理模型为例，模型化中的基本要素是：过程机理的正确描述，准确的热力学、物性数据，以及有效的计算方法。现在已有商品化的过程系统模拟软件，使用该软件可以开发出用户所需要的过程系统数学模型，必要时可以修正或增补特定的过程单元模型以及有关的热力学数据等，以提高模型的准确性。

1.4 过程系统结构的表示

过程系统的模型主要由其过程单元模型和系统结构所组成。过程单元的数学模型化将在第2章中讨论，本节介绍过程系统结构的表示方法——图形表示和矩阵表示。

过程系统中各单元之间的联结关系，即系统结构，可由下式表达

$$y_i^k = x_j^l \quad (1-1)$$

式中 y_i^k ——单元 i 的第 k 个输出流股；

x_j^l ——单元 j 的第 l 个输入流股；

i, j ——单元序号；

l, k ——流股序号。

该式描述了单元 i 与单元 j 之间的联结关系。

1.4.1 图形表示

图论是数学中的一个领域，用图表达一定的逻辑关系，对于过程系统的研究具有重要意义。

图是由节点和节点间相互联结的边（或弧）所构成。在一过程系统中，过程单元可用节点表示，单元之间的流股（包括物流、能量流、信息流）用边表示，如果考虑流股的方向，则边是有方向的，此时得到的图称为有向图，否则为无向图。例如，一过程系统如图 1-5(a)所示，其中包含 11 个单元和 13 个流股，其有向图如图 1-5(b)所示。节点为 $X(x_1, x_2, \dots, x_{11})$ ，边为 $E(e_1, e_2, \dots, e_{13})$ 。该图可用下面集合形式表示

$$G = (X, E) \quad (1-2)$$

图可以分解为若干个子图，其中有两种典型的子图，一种称为路径，另一种称为回路。所谓路径是指相互顺序

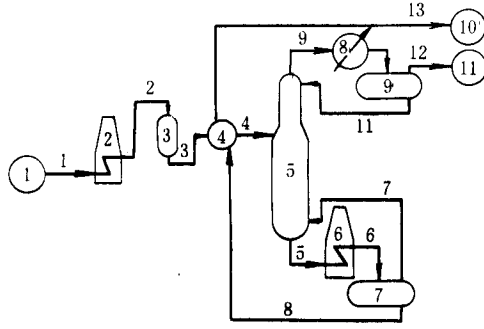


图 1-5(a) 一过程系统

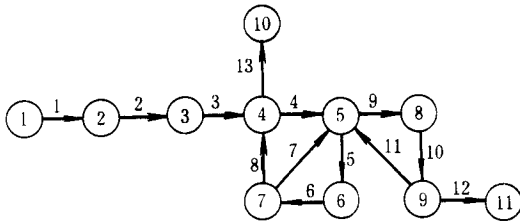


图 1-5(b) 有向图(图中标出节点与边的序号)

联结的有向边,即每个边的终节点是后续边的起始节点(路径的两个端点例外)。图 1-5 (b) 中节点 $x_1, x_2, x_3, x_4, x_{10}$ 即为一个路径。若一个路径的起始节点和终节点重叠在一起,则为一个回路。图 1-5 (b) 中节点 x_5, x_6, x_7, x_8 即构成一个回路。图中的每一个边对应一对节点,而每个节点对应一定数量的边。某一有向图相应于一定的过程系统,就可以采用图论的方法来研究处理系统结构问题。

1.4.2 矩阵表示

过程系统结构除了用有向图表示外,也可写作矩阵形式。用矩阵表达的方式有多种,这里介绍相邻矩阵和关联矩阵表示法^[9]。

相邻矩阵的元素定义如下

$$A_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{从节点 } i \text{ 到节点 } j \text{ 有边联结;} \\ 0, & \text{从节点 } i \text{ 到节点 } j \text{ 没有边联结。} \end{cases}$$

矩阵中的元素是由 1 和 0 所构成,这种矩阵属于布尔矩阵。元素中的 0 也可以不写出。

由图 1-5 (b) 所示的有向图,可写出其相邻矩阵,见图 1-6。

相邻矩阵具有如下特点:

- ①若有向图中有 n 个节点,则该矩阵为 n 行 n 列的方阵;
- ②空的列(元素都为零的列)表示其对应着系统的起始节点,即没有输入边的节点。如图 1-6 中的第一列为空

的列,对应着图 1-5 (b) 中的起始节点 1;

		到节点										
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
A =	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	2	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
	3	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0
	4	0	0	0	0	1	0	0	0	0	1	0
	5	0	0	0	0	0	1	0	1	0	0	0
	6	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0
	7	0	0	0	1	1	0	0	0	0	0	0
	8	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0
	9	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	1
	10	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

图 1-6 相邻矩阵

③空的行(元素都为零的行)表示其对应着系统的终节点,即没有输出边的节点。如图 1-6 中的第 10、11 行为空的行,对应着图 1-5 (b) 中的终节点 10 及 11。

相邻矩阵表达了系统中各单元之间的联结关系,通过矩阵的运算,还可以识别出系统中所包含的回路,具体内容参阅第二章。

关联矩阵的元素是这样规定的:

$$S_{ij} = \begin{cases} -1, & \text{当边 } j \text{ 为节点 } i \text{ 的输出;} \\ 1, & \text{当边 } j \text{ 为节点 } i \text{ 的输入;} \\ 0, & \text{当边 } j \text{ 与节点 } i \text{ 不相联。} \end{cases}$$

图 1-5(b)的有向图可用关联矩阵来表达,见图 1-7。

		边												
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
S =	1	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	2	1	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	3	0	1	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	4	0	0	1	-1	0	0	0	1	0	0	0	0	-1
	5	0	0	0	1	-1	0	1	0	-1	0	1	0	0
	6	0	0	0	0	1	-1	0	0	0	0	0	0	0
	7	0	0	0	0	0	1	-1	-1	0	0	0	0	0
	8	0	0	0	0	0	0	0	0	1	-1	0	0	0
	9	0	0	0	0	1	0	0	0	0	1	-1	-1	0
	10	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
	11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0

图 1-7 关联矩阵

关联矩阵中亦可不写出其中的零元素。它具有下列性质:

- ①若有向图中有 n 个节点, m 个边,则为 n 行 m 列矩阵;
- ②每一流股(边)在矩阵中标出两次,即为前一节点的输出边及后续节点的输入边;
- ③列的总和为零。

用矩阵表示过程系统结构是灵活、方便的,但对于含有大量单元的过程系统,其矩阵的维数很高,用计算机处理时占用大量存贮单元,计算量很大。但该矩阵具有明显的稀疏性,根据这一特点,可采取一定算法提高计算效率^[14]。

还有一种表示过程系统结构的方法——表格形式,如联结表,顺序表等^[9],具有占用计算机内存少、计算量小等优点,也广泛地被应用。

一般参考文献

1. Westerberg A. W., Hutchison H. P., Motard R. L. and Winter P., "Process Flowsheeting", Cambridge University Press, England, 1979.
2. 高松武一郎等编,张能力、沈静珠译,《化工过程系统工程》,北京:化学工业出版社,1981。
3. 杨友麒,《实用化工系统工程》,北京:化学工业出版社,1989。
4. 杨冀宏、麻德贤,《过程系统工程导论》,北京:烃加工出版社,1989。
5. 姚平经,《化工过程系统工程》,大连:大连理工大学出版社,1992。

参考文献

- [1] Rudd D. F., Watson C. C., "Strategy of Process Engineering", John Wiley and Sons, 1968.
- [2] Himmelblau D. M., Bischoff K. B., "Process Analysis and Simulation", John Wiley and Sons, 1968.
- [3] 矢木荣,西村肇,“化学プロセス工学”,丸善株式会社,1969.
- [4] Кафаров В. В., “Методы Кибернетики В Химии и Химической Технозии”, Издательство «Химия», 1971.
- [5] 《中国大百科全书》,“化工”,北京:中国大百科全书出版社,1989。
- [6] 郑春瑞,《系统工程学概述》(第二版),北京:科学技术文献出版社,1985。
- [7] 高松武一郎等编,张能力,沈静珠译,《化工过程系统工程》,北京:化学工业出版社,1981。
- [8] 《中国大百科全书》,“自动控制与系统工程”,北京:中国大百科全书出版社,1991。
- [9] 格隆等著,陆震维译,《过程系统工程》,上册,北京:化学工业出版社,1983。
- [10] 姚平经,《化工过程系统工程》,大连:大连理工大学出版社,1992。
- [11] Westerberg A. W., Hutchison H. P., Motard R. L. and Winter P., "Process Flowsheeting", Cambridge University Press, England, 1979.
- [12] 杨友麒,《实用化工系统工程》,北京:化学工业出版社,1989。
- [13] 杨冀宏,麻德贤,《过程系统工程导论》,北京:烃加工出版社,1989。

- [14] 张建设、许锡恩,《化工过程分析与计算机模拟》,北京:化学工业出版社,1989。

2 化工过程系统的稳态模拟

符号说明

API	美国石油学会制订的表示石油密度的一种量度,即 API 度,其标准温度为 15.6℃(60 F)
<i>a</i>	活度
CPIG	理想气体热容关联式参数
<i>c</i>	组分数
DELTA	25℃时的溶解度参数
DHFORM	25℃下理想气体标准生成焓, kJ/kmol
DHVLB	标准沸点下汽化热, kJ/kmol
DHYLWT	Watson 方程参数
DGFORM	25℃下理想气体标准生成自由焓; kJ/kmol
<i>d</i>	自由度
<i>F</i>	流率, kmol/h, kg/h
<i>f</i>	逸度, kPa
<i>G</i>	增益系数
GMOQQ	UNIQUAC 模型参数
GMUQR	UNIQUAC 模型参数
<i>H</i>	焓, kJ/h, kJ/kmol, kJ/kg
ΔH	焓变, kJ/h, kJ/kmol, kJ/kg
<i>I</i>	单位矩阵
<i>J</i>	Jacobi 矩阵
<i>K</i>	平衡常数、动能, 无量纲, kJ/kg
<i>k</i>	导热系数, 反应速率, kJ/(m·h·℃), 1/h
<i>L</i>	物流流率, kmol/h, kg/h
LFRAC	液相分率, 分率
<i>M</i>	分子量
<i>M_w</i>	分子量
<i>m</i>	独立方程数, 分配系数
MULAND	Andrade 粘度模型参数
MUP	分子偶极矩
NATOM	包括 C, H, O, N, S, F, Cl, BR, I, Ar, HE 原子数的矢量
NTHA	Nothnagel 模型参数
<i>n</i>	未知变量数、组分浓度, 无量纲、kg/m ³ , kmol/m ³
OMEGA	Pitzer 偏心因子
<i>p</i>	压力, 相数, kPa, 无量纲

Δp	压力差, kPa
P_c	临界压力, kPa
PLCAVT	Carett 综合关联式参数
PLXANT	Antoine 蒸汽压关联式参数
P_r	对比压力
Q	热负荷, kJ/h
q	松弛因子或阻尼因子
R	流率, m^3/h
RGYR	回转半径, m
RKTZRA	Rackett 液体容积方程参数
r	半径, m
S	流股数、流率, 无量纲, kmol/h, kg/h
SFRAC	固相分率, 分率
SG	标准比重 (60 F, 15.56°C)
T	温度, °C
T_c	临界温度, K
T_{FP}	标准凝固点, K
T_r	对比温度
U	内能, kJ/kg
U	控制变量
UFGRP	UNIFAC 模型参数
V	容积, m^3
VFRAC	气相分率, 分率
VLCVTI	Scatchard-Hildebrand 模型参数
WATSOL	水在有机组分中的溶解度模型参数
w	单元的设计变量
x	状态变量向量
x	液相组分浓度、反应转化率, kmol/ m^3 , kg/ m^3 , 摩尔分率, 分率
y	气相组分浓度, kmol/ m^3 , 摩尔分率
z	组分浓度, kmol/ m^3 , 摩尔分率
Z_c	临界压缩因子
α	分流比, 分率
δ	节点度
ξ	反应程度, kmol/h
η	效率, 分率
λ	矩阵主特征值的绝对值
ν	化学计量数
ρ	密度, kg/ m^3
Φ	稀疏比, 位能, 分率, kJ/kg
ω	节点权

2.1 稳态模拟的基础知识

2.1.1 数学模型的基本类型与主要形式

数学模型是流程模拟的基本依据, 模拟结果的可靠性与准确程度和数学模型有极大的关系。数学模型的类

型主要由过程的本质决定, 但也与数学模型建立中对所研究过程的本质如何进行分析与处理有关。数学模型的数学表达形式主要由模型的类型决定。不同类型的模型有不同的求解方法。

(1) 稳态模型与动态模型

稳态(定常态)模型中, 系统变量不随时间而变化, 故系统不含时间变量。连续生产装置在正常条件下的运行可用稳态模型描述。对于间歇操作, 装置的开、停车过程或在外界干扰下的运行, 则用动态模型描述。动态模型中, 输入变量向量、状态变量向量与输出变量向量都是时间的函数。

(2) 集中参数模型与分布参数模型

在数学模型中, 当过程变量随空间位置不同的变化可以忽略, 即过程的有关性质在所研究的范围内可以看作是均一时为集中参数模型, 如连续搅拌槽式反应器(CSTR)。集中参数模型在稳态时可以用代数方程描述, 而在动态时可以用常微分方程描述。

在数学模型中, 当过程变量随空间位置的不同而变化时为分布参数模型。数学模型中的过程变量在 X 与 Y 的方向上可以看成是不变而在 Z 的方向上是变化时, 为一维分布参数模型, 例如平推流式反应器, 其数学模型的形式在稳态时为常微分方程, 在动态时为偏微分方程, 如果在以 Z 轴为中心的半径方向上过程变量也是变化的, 则为二维分布参数模型, 其数学模型的形式为偏微分方程或差分-微分方程, 例如, 固定床催化反应器内部催化剂床层中轴向与径向的温度分布都要加以描述的反应器模型。

(3) 确定性模型与随机模型

当数学模型中输入变量与输出变量之间存在有确定的关系时, 为确定性模型, 其过程状态变量的变化不是偶然的, 而是由输入变量本身确定的, 例如物质的 PVT 状态方程。当同一个输入变量不能产生一个确定的同一个输出变量, 即输出变量的值是不确定的, 而是根据一个具体的概率分布的期望值而求得时, 则为随机模型。随机模型中时间是一个独立变量, 如果时间不作为变量, 则称为统计数学模型。

(4) 机理模型与“黑箱”模型

当数学模型的建立是以过程的物理与化学变化的本质为基础, 根据化学工程学的学科与其他有关学科的理论与方法, 对过程的机理进行分析而形成的模型为机理模型, 例如, 根据化学反应的反应机理、反应动力学和传递过程原理而建立起来的反应过程模型。当缺乏合适的或足够的理论根据, 因而不能对过程进行充分地描述, 或者为了要进行简化而不对过程的机理进行分析, 此时, 可把对象当作“黑箱”来处理, 根据输出变量与输入变量测定值之间的关系, 采用回归分析的方法, 建立“黑箱”模型, 即经验模型。这种模型的适用性受所采集数据的覆盖

范围限制，不宜将这种模型的应用范围推广到测定范围之外。“黑箱”模型的形式一般为代数方程。

2.1.2 标准型问题、设计型问题与最优化问题

稳态模拟所要研究的问题基本上有三类，即：标准型问题、设计型问题与最优化问题。以单元设备为例，标准型问题(图 2-1)中，给定输入流股向量与设备参数向量可求输出流股向量。这一类问题适用于研究现有装置在不同操作条件下的操作性能。设计型问题中(图 2-2)，给定一部分输入流股向量与设备参数向量，给定输出流股

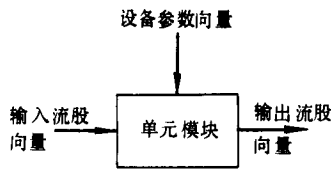


图 2-1 标准型问题

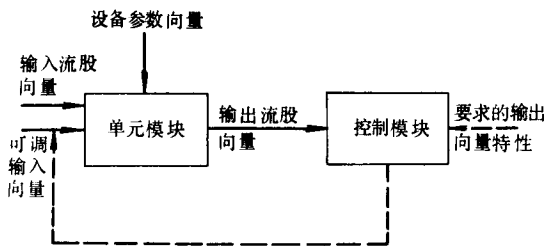


图 2-2 设计型问题

中产品的特性要求，调整另一部分的输入流股条件与设备参数使输出产品达到规定的特性指标，调整输入流股条件与设备参数的功能可以由控制模块实现。最优化问题(图 2-3)与设计型问题类型相似，不断调整有关的控制变量，即有关的可调的输入流股条件与设备参数，使目标函数值在规定的约束条件下达到最优，调整控制变量的功能由最优化程序实现，当涉及到经济指标时，在最优化问题的描述中还应包括经济模型。

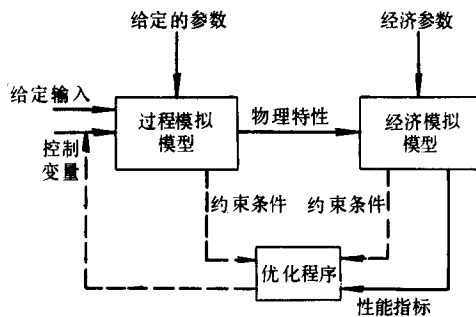


图 2-3 最优化问题

所谓模块，就是指流程模拟中的一个基本计算单元。它是为实现一定的计算任务而设置的，可以包括一个设备单元，也可以包括若干个设备单元，还可以是单纯的计算单元而无具体的设备作为背景，如上述的控制模块。模块中包括有数学模型与各模型按顺序的解算方法。给定输入条件，即可以算出输出流股向量。

流程模拟的一般步骤如图 2-4^[1]所示，给定流程信息与输入流股条件，完成物料衡算与能量衡算，衡算中得出各物流的信息、各单元设备的基本性能、公用工程及原料需要量，设备尺寸的计算为设备投资和成本估算提供基础，然后再进一步进行经济评价。各个阶段计算中需要的有关数据，如设备尺寸计算中换热器的污垢系数，经济评价中的通货膨胀率等，一般由用户提供。工程项目开发的不同阶段，对各个部分计算的详尽程度有不同的要求。

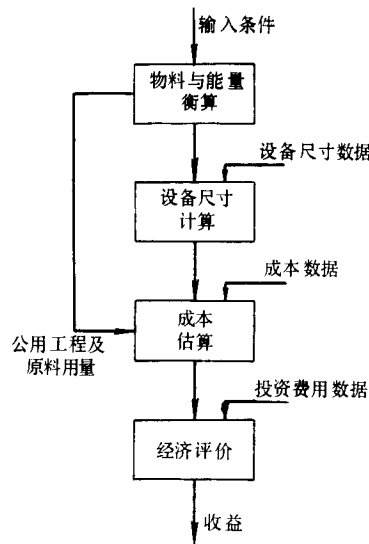


图 2-4 流程模拟的一般步骤

2.1.3 稳态模拟的基本方法

(1) 序贯模块法

这是发展比较成熟、目前应用最普遍的一种流程模拟方法。先对模拟的对象作出信息流程图，明确各单元模块与各物流流股的联结关系，识别回路。如果存在回路，则还要确定断裂的流股集与计算顺序。然后给定输入流股向量与有关的设备参数向量，给定断裂流股向量的初值，按顺序逐个单元进行模拟计算，各单元的输出流股向量就作为下一个单元模块的输入，逐个单元计算并迭代使各断裂流股收敛。

(2) 联立方程法

将整个过程中涉及到的各个单元模块的方程以

及模块间的联接方程,连同设计规定方程等联立成大型的非线性方程组,再按一定的方法分隔成若干较小的方程组,按一定的顺序联立求解。或将非线性方程线性化,与原线性方程一起形成大型稀疏线性方程组,再联立求解、迭代使收敛。

(3) 联立模块法

用各个模块的严格模型计算出来的结果,根据输出的信息与输入信息间的关系产生简化模型,例如线性模型,再对简化模型以及联结方程联立求解,求解过程中可以包括设计规定方程,对断裂流股要设定初值,求解后得出各流股的新值,再迭代使收敛。根据简化模型与 Jacobi 矩阵产生的方法以及迭代变量选定方法的不同,具体的算法有不同。

2.1.4 流程模拟系统软件

(1) 流程模拟系统软件的基本结构^[2]

流程模拟系统软件的基本结构如图 2-5 所示。输入系统输入模拟计算中所需要的有关信息,包括流程的拓扑结构。所有输入物流的信息、单元模块的设备参数及收敛准则。输入可以是批处理形式,也可以是用户人机对话形式,必要时,用户还可进行输入数据的检查、核对与修正。单元模块库是模拟软件的重要组成部分,为了解各种类型模块的有关方程,需有计算方法库、物性数据库与热力学性质库相配合,提供热力学性质的推算程序、数值

计算方法、收敛方法以及用户提供的特殊算法。管理系统执行程序是模拟软件的核心,用以控制计算顺序及整个模拟过程。输出系统可以按用户要求输出中间结果与产品物流信息,有的软件还包括灵敏度分析、优化、成本估算与经济分析的功能。

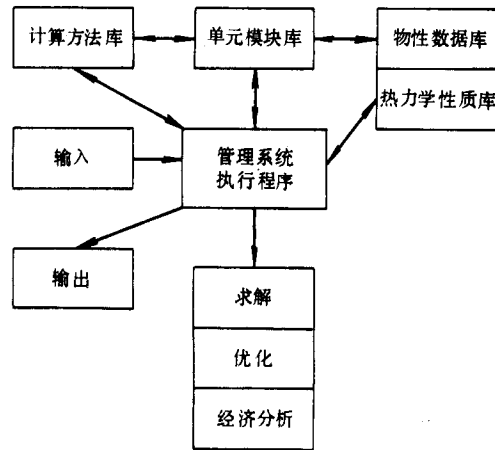


图 2-5 流程模拟系统的基本结构

(2) 流程模拟系统软件示例

国内外目前使用较普遍的商品模拟系统软件如表 2-1 所示。

表 2-1 流程模拟系统软件示例

模拟系统	开发者	结构	特点	参考文献
ASCEND	美国 Carnegie-Mellon 大学	联立方程法	模拟与优化	Lock M. H. and A. W. Westerberg ^[3]
ASPEN PLUS	美国 ASPEN TECHNOLOGY	序贯模块法	丛状数据结构 POL 有经济评价	Evans, L. B. et al. ^[4]
CAPES	日本 Chiyoda chem. Eng. constr. Co.	序贯模块法	用户编写主程序有优化、费用和尺寸计算	Maejima, T. et al. ^[5,6]
CHESS	美国 Washington 大学			Motard R. L. ^[7]
CONCEPT II	英国 CAD 中心	序贯模块法	交互作用方式	Comput. Aided Design Center ^[8]
DESING 2000	美国 Chem Share	序贯模块法		Chem Share ^[9]
FLOWPACK I	英国-德国 ICI-LINDE A-G	序贯模块法 联立模块法	批处理和交互作用 POL	Berger and Perris ^[10] Liles ^[11]
FLOWSIM	美国 Connecticut 大学	联立方程法	图形输入选择稀疏矩阵技术	Shacham et al. ^[12]

模拟系统	开发者	结构	特点	参考文献
FLOWTRAN	美国 Monsanto Co.	序贯模块法	连续修正的 POL 有费用和尺寸计算	Rosen, E. M. et al. [13]
GMB	美国 Badger Co.	序贯模块法	交互作用方式	Russell, et al. [14]
HYSIM	加拿大 HYPROTECH Co.	序贯模块法	交互作用方式	
PRO/I	美国 Simulation Sciences	序贯模块法	批运算 交互作用方式	Brannock, N. F., et al. [15]
QUASILIN	英国 CAD 中心	联立方程法	模拟与优化	Gorczynski, F. W., et al. [16,17]
SIMMOD	美国 Illinois 大学	序贯模块法 联立模块法	模拟与优化	Chen and Stadtherr [18]
SPEEDUP	英国 Imperial 大学	联立方程法	用 PASCAL 编程 FORTRAN 程序执行	Perkins and Sargent [19] Sargent [20]
SYMBOL	英国 Cambridge 大学	联立方程法	线性化法	Hutchison, H. P. [21]
ECSS	青岛化工学院	序贯模块法		
Micro SAPROSS	兰州石油化工设计院 大连理工大学 华东理工大学	序贯模块法	合成氨专用系统	

2.2 物性系统

2.2.1 物性系统的作用与结构

物性系统的作用主要有^[22]：

①根据模拟计算的进程与要求向模拟程序提供所需要的各种物性数据。

②允许用户输入自己的数据并使其转换成模拟系统所要求的形式。

③当缺少某一化合物的物性时，可以为用户提供物性推算的模型。

④当用户自己准备有实验数据时，可以按要求的模型形式进行回归，给出回归模型的参数。

物性系统既可以专门为用户提供物性数据，供用户单独使用，也可以直接与模拟系统连接为模拟计算提供数据。为了使物性系统便于使用，需要有数据库的管理系统，管理系统应具有以下基本功能^[23]：

①可以将全部数据存档，并便于扩充或删除。数据的存储要紧凑以节省空间，数据存取的时间要尽量短，用户查找与使用要方便。

②要有数据文档生成的程序。对用户来说，数据的输入要简单并易于补充，例如，只要输入组分的名称，物性

推算的方法，模型参数以及温度的上下限，数据库扩充时只要增加若干数据行，数据删除时也只要除去有关的数据行。生成的程序应能进行数据的分类，形成压缩的文件并能把装配好的数据项恢复到原来未装配前的数据形式。

③要有从数据文档读取数据并生成数据的程序。应有数据项地址指示系统的译码功能，按用户要求恢复数据项，例如，需要用到某混合物的物性，由于文档中只存储模型参数，所以程序应能给出纯组分的物性，并有相应的混合规则，而且计算出该混合物的物性。

④要有交互式用户程序，例如，程序向用户提问：需要何种组分，在什么温度、压力与组成下的何种物性？用户回答后，程序即给出结果，必要时可以给出一定的温度与组成范围内有关的物性数据表。

⑤当某一组分的某种物性漏缺时，应有处理的措施。例如，采用推算的办法或由用户自己提供数据输入。

物性数据库与热力学性质推算方法库是物性系统中的两个重要组成部分。前者存储的是纯物质的基础物性，主要是为后者在计算混合物热力学性质中使用。混合物的热力学性质主要包括以下方面，即：与 $P-V-T$ 状态方程有关的物性，如摩尔体积或密度；与能量平衡有关的物性，如焓、熵、自由焓等；与化学平衡、气液平衡有关

的物性,如逸度系数、活度系数、气液平衡常数 K 等;以及与传递性质有关的物性,如粘度、导热系数、扩散系数等。

物性数据库中包括的纯组分数目与物性类别视数据库的规模不同而异。根据物性数据提供的方式不同,物性数据库可以分成两种类型。一种是只存储原始的实验测定值,包括实验测定值的来源,如德国的 DECHEMA Retrieval 数据库^[23],另一种较普遍的是只存储模型参数,即在实验测定的基础上,经过选择、关联与检验,形成计算模型,数据库只存储这类模型的参数,包括模型的适用范围,但不包括实验测定的原始数据本身。

物性数据的基础是数据源,许多国家都建立了数据源的研究和服务机构,为了促进国际交流与合作,也成立了不少国际科技数据联合组织,如 CODATA (Committee on Data for Science and Technology, International Council of Scientific Unions)。

工程设计手工计算中,有以下数据来源可供查找:最方便的方法是从各类手册^[24~37]或百科全书^[38~40]中查找;当手册中缺少时,可借助于美国《化学文摘》(C. A.),及有关期刊中查找,使用中应注意数据更新,即可能时采用较新的数据。

当有关的物性数据,包括纯物质的基础数据未查到,或根本无实验测定值时,要采用推算的方法。物性推算方法的研究是热力学中的一个专门领域,文献[34]中系统介绍了各种物性的推算方法与各种方法的评价以及推荐意见,文献[41, 42]中介绍了有关物性推算的具体算法与计算机程序。物性的推算基本上可分为两个层次,其总体结构如图 2-6 所示^[43]。基础物性的来源包括实验测定值、基团贡献法推算值与关联式计算值。

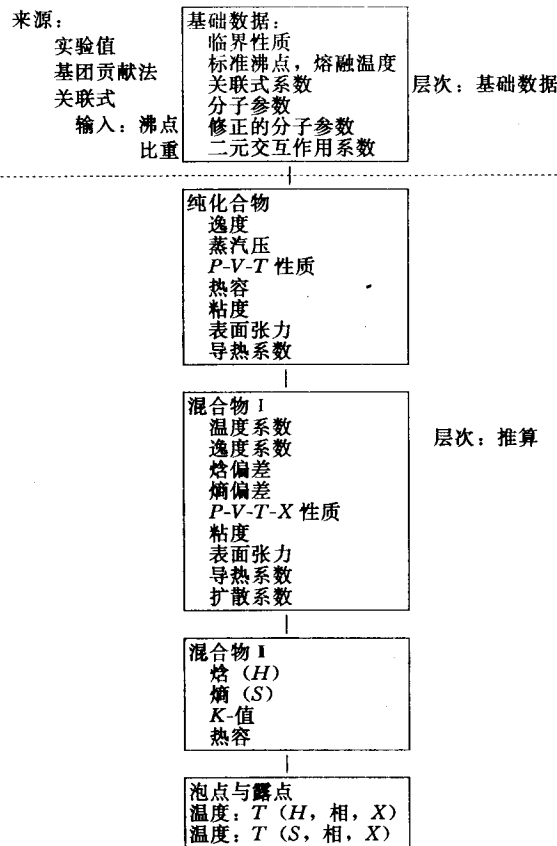


图 2-6 物性推算总体结构

物性数据的另一个重要来源即数据库。国内外若干典型的物性数据库示例如表 2-2 所示^[2]。

表 2-2 物性数据库示例^[2, 22, 23]

数据库名称	开发者	要点	参考文献
PPDS	英国化学工程师学会	1200 种化合物, 32 种性质扩展数据库	Edmonds ^[44]
ASPEN PLUS	Aspen Technology	大型库	
SDC, SDR	德国 DECHEMA		
DDB(VLE)	德国 Dortmund 大学		
CHEMTRAN	美国 Chem Share 公司	有限库	Liles ^[45]
DATA BANK	英国 ICI Mond 分部	500 种以上化合物 40 种性质	Liles ^[45]
CBM	比利时 Solvey 公司	有限库	

续表

数据库名称	开发者	要点	参考文献
Uhde Stoffdaten Compiler	德国 Uhde 公司	几千种物质大型库但无 DATABANK 许多性质	
FPRI	英国流体性质研究公司	2000 种以上纯物质 200 种混合物	Chase ^[46]
JUSE-AESOP	日本科技联合会	3000 种化合物	
DIPPR	美国 AIChE 物性数据设计研究所		Danner 与 Daubert ^[47]
TRC	美国 Texas AdM 大学热力学研究中心	有机化合物和混合物	Wilhoit ^[48]
Thermodynamic Databank	美国国家标准局	3700 种无机化合物与 C ₁ , C ₂ 化合物, 主要是热化学数据	Garvin 等 ^[49] White, Jr ^[50]
IVTAN Thermodynamic Databank	莫斯科, 科学院高温研究所	1000 种以上物质	Garvin 等 ^[49]
ECDIN	意大利 Ispra Joint 研究中心	环境化学数据	ECDIN ^[51]
Data on Hybridomass and mono-clonal ant; bodies	美国 CODATA (科学技术数据委员会)		CODATA ^[52]
PES-121	中国化工设计公司	150 种以上化合物	
CEPPDS	北京化工学院	3400 种以上化合物	
CPPDS	南京化学工业公司研究院	3800 种以上化合物	
PPCS	大连理工大学	300 种以上化合物	

2.2.2 通用模拟系统的物性数据库

以 ASPEN PLUS 通用模拟系统为例, 介绍其物性数据库的基本特点如下:

(1) ASPEN PLUS 数据库包括几百种纯组分的物性数据, 其基础物性参数包括以下若干种, 如表 2-3 所示^[53]。

表 2-3 ASPEN PLUS 数据库基础物性参数^[53]

参数名	说明	数目
M_w	分子量	1
T_c	临界温度	1
P_c	临界压力	1
V_c	临界体积	1
Z_c	临界压缩因子	1
OMEGA	Pitzer 偏心因子	1
PLXANT	Antoine 蒸汽压关联式参数	9

续表

参数名	说明	数目
CPIG	理想气体热容关联式参数	11
DHFORM	25°C 下理想气体标准生成焓	1
DGFORM	25°C 下理想气体标准生成自由焓	1
DHVLWT	Watson 方程参数	5
RKTZRA	Rackett 液体容积方程参数	1
PLCAVT	Cavett 综合关联式参数	4
DHLCVT	Cavett 关联式参数	1
VLCVTI	Scatchard-Hildebrand 模型参数	1
T_B	标准沸点	1
V_B	标准沸点下液态摩尔体积	1
DHVLB	标准沸点下汽化热	1
TFP	标准凝固点	1
SG	标准比重(60 F)(15.56°C)	1
API	标准 API 度(60 F)(15.56°C)	1

续表

参数名	说明	数目
VLSTD	标准液体容积(60 F)(15.56℃)	1
DELTA	25℃时的溶解度参数	1
MUP	分子偶极矩	1
MULAND	Andrade 粘度模型参数	5
RGYR	回转半径	1
UFGRP	UNIFAC 模型参数	4
WATSOL	水在有机组分中的溶解度模型参数	5
NTHA	Nothnagel 模型参数	8
NATOM	包含 C、H、O、N、S、F、Cl、Br、I、Ar、 HE 原子数的矢量	
GMUQR	UNIQUAC 模型参数	1
GMUQQ	UNIQUAC 模型参数	1

(2) 热力学性质与传递性质推算的模型共有 43 种选择集,每一选择集中有不同的模型可供选择,例如,以 Chao-Seader 和 Grayson-Streed 模型为基础的选择集(SYSOP 1 和 SYSOP 2),主要用于烃类和烃类混合物中有气体的物性,其温度和压力的适用范围如下:

	SYSOP 1 (Chao-Seader)	SYSOP 2 (Grayson-Streed)
温度	$200\text{K} < T < 533\text{K}$	$200\text{K} < T < 700\text{K}$
	$0.5 < T_{r,i} < 1.3$ $T_{r,m} < 0.93$	$0.5 < T_{r,i}$
压力	$p < 140\text{atm}$	$p < 210\text{atm}$

式中 $T_{r,i}$ ——组分 i 的对比温度;

$T_{r,m}$ ——混合物的对比温度。

不同模型所计算的热力学性质以及计算中所需要的参数,在文献[53]中均有介绍。任何一个选择集可用于整个流程,也可用于某一流程区段或某一单元模块。

(3) 可以允许用户修改物性选择集,例如,可以用 R-K-S 方程替换 R-K 方程。

(4) 允许用户使用自己的数据库,用自己的参数值代替 ASPEN PLUS 数据库中的参数。

(5) ASPEN PLUS 数据库还包括有燃烧物数据库,即计算高温气体的专用数据库,包括有燃烧过程中常见的 59 种组分(包括自由基)的参数。

(6) 据文献[53]介绍,ASPEN PLUS 物性数据库中具有可以处理非极性、极性和缔合组分体系的

Redlich-Kwong-UNIFAC 状态方程,它是将 UNIFAC 基团贡献值应用于状态方程的一种新的方法。ASPEN PLUS 提供有各种官能团的范德华面积和体积参数以及基团交互作用参数。

(7) ASPEN PLUS 数据库可以与 Barin 数据库和 CSIRO 数据库接口,用于冶金、陶瓷矿产工业及其他含有固体处理过程的模拟,这也是目前其他模拟系统尚未解决的问题。ASPEN PLUS 还与 DECHEMA 数据库接口,该数据库收集了 25 万多套气液平衡和液液平衡的数据。

(8) 具有数据回归系统,可以根据实验数据回归各种模型,给出模型参数。

(9) ASPEN PLUS 数据库可以专门为用户提供物性数据,供用户单独使用,也可以直接与模拟计算联接。

2.2.3 工程设计专用数据库^[23]

工程设计上用的专用数据库具有以下特点,即:能适应工程设计中不同设计阶段的不同设计任务的要求,能够用计算机将上一设计阶段中有关程序的计算结果自动地传递给下一阶段有关的程序系统,作为输入,自动实现不同的程序系统间的联结以执行下一阶段的设计任务,包括计算、制图、工程进度安排、投资成本估算及报告生成等。这样的任务所需存储与传递的信息不仅量大而且要求也高,例如,对图形系统的要求就包括:流程图、设备图、平面布置图等,图中对线条的粗细、走向、起点与终点的坐标等等都有严格的要求。由于工程设计数据库所处理的信息的这种复杂性,即与一般商化的数据管理系统有很大的不同,因此,工程设计用的数据库一般难以通用化而必须单独开发。工程设计专用数据库与不同设计阶段不同设计任务间的关系以及所处理的各种信息间的相互联系,如图 2-7 所示。

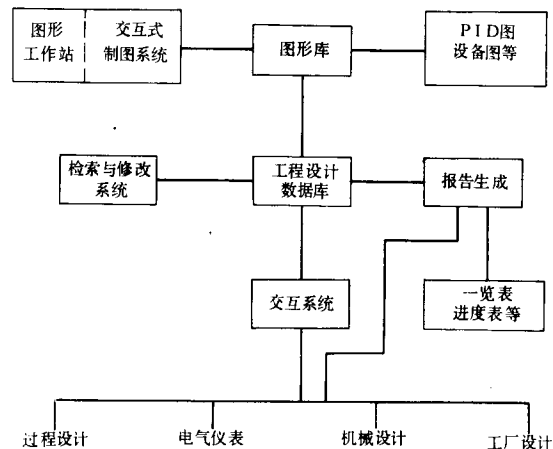


图 2-7 工程设计专用数据库系统

2.3 化工单元与化工流程的自由度分析

2.3.1 流股的自由度

化工流程模拟从本质上讲就是用不同的方法求解不同类型、不同规模的方程组以求得有关未知变量的问题,因此,一个基本问题就是要先确定未知变量数(m)与独立方程数(n)之间的关系。有以下几种情况:

(1) 当 $m=n$, 即独立方程数与未知变量数正好相等时, 方程组有唯一解。

(2) 当 $m<n$, 即独立方程的数目比未知变量数多时, 方程组有多余的方程, 不同方程之间会出现矛盾, 方程组无解。

(3) 当 $m>n$, 即未知变量的数目比独立方程的数目多时, 则多余的 $(m-n)$ 个未知变量的值必须先给定, 方程组才能有唯一解, 否则, 就会有无穷多个解。

自由度 d 的定义为:

$$d=m-n \quad (2-1)$$

由相律知, 对于一多组分、多相的平衡系统来说, 自由度

$$d=c-p+2 \quad (2-2)$$

式中 d —— 自由度;

c —— 组分数;

p —— 相数。

即 d 个数目的独立变量确定后, 系统即完全确定, 但相律只是对强度变量而言的。对于流程模拟中要涉及到流率与体积等广度变量的情况, 根据 Duhem 定律, 可以证明^[54]流股的独立变量数为 $(c+2)$, 即

$$\text{一个 } c \text{ 组分流股的独立变量数} = c+2 \quad (2-3)$$

式中 c —— 流股的组分数;

此 $c+2$ 个独立变量一般指: 温度 T (或焓 H , 特别是在有二相共存的情况), 压力 p , 各独立组分分流率, 如 kmol/h (或总流率, 如 kmol/h , 再加上 $(c-1)$ 个组分的组成, 如摩尔分率)。

2.3.2 化工单元的自由度分析

化工单元自由度分析的基本步骤是: 求出该单元所有输入与输出流股独立变量数与设备参数的总和 m , 及该单元的独立方程数 n , 则自由度 d 即为 $(m-n)$, 如 (2-1) 式。

独立方程的类型主要有: 物料衡算、焓衡算、相平衡、温度与压力平衡及其他有关的独立方程。物性参数的计算式, 例如求相对焓值及求气液平衡常数的关联式等不作为独立方程。

典型单元的自由度分析如下。

(1) 混合器

设混合器的进出流股如图 2-8 所示。

独立变量总数: $m=3(c+2)$

独立方程的类型与独立方程数:

方程名称	方程数
组分物料衡算	
$F_1 z_{i1} + F_2 z_{i2} = F_3 z_{i3}, i=1, 2, \dots, c$	c
焓衡算	
$H_1 F_1 + H_2 F_2 = H_3 F_3$	1
压力平衡	
$P_3 = \min(P_1, P_2)$	1

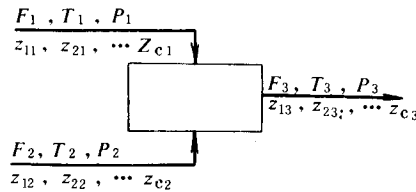


图 2-8 混合器模型简图

式中 F_1, F_2, F_3 —— 输入与输出流股的流率, kmol/h ;
 z_{i1}, z_{i2}, z_{i3} —— 输入与输出流股的组成, 摩尔分率;
 H_1, H_2, H_3 —— 输入与输出流股摩尔焓, kJ/kmol ;
 P_1, P_2, P_3 —— 输入与输出流股的压力, kPa 。

独立方程总数 $n=c+2$

自由度 $d=m-n=2c+4$

自由度分析图如图 2-9 所示。给定输入的二股物流的独立变量 $2(c+2)$, 根据独立方程 $n=c+2$, 可求出输出流股的 $c+2$ 个独立变量。

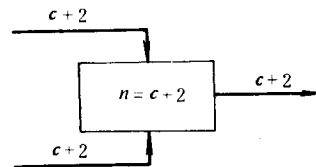


图 2-9 混合器自由度分析

(2) 流股分割器

流股分割器示意图及其自由度分析如图 2-10 所示。输入一股物流, 分成 s 股物流输出, 过程中无热交换, 无反应。

方程名称	方程数
物料衡算	
$F_j = a_j F, j=1, 2, \dots, s-1$	$s-1$
分流比约束方程	
$\sum_{j=1}^s a_j = 1$	1
各组分组成相同	