

“研究生教育创新工程” 化工类研究生教学用书

化工过程模拟

——原理与应用

Chemical Process Simulation
—— Principles and Applications

陆恩锡 张慧娟 著



化学工业出版社

“研究生教育创新工程” 化工类研究生教学用书

化工过程模拟 ——原理与应用

Chemical Process Simulation
——Principles and Applications

陆恩锡 张慧娟 著



化学工业出版社

· 北京 ·

本书主要介绍化工过程模拟的基本原理和应用,重点叙述热力学方法选择和主要化工单元过程的计算。对于文献资料中较少介绍的蒸馏塔计算和收敛技巧、蒸馏塔节能方法、换热器设计计算以及流程迭代收敛方法等内容,既简述原理,又结合实际模拟计算案例给予详细说明。本书内容是在化工原理和化工热力学基础上的扩充与深化,书中还介绍了国内文献中极少探讨或未能涉及的一些化学工程专题,如逆向蒸馏、逆向传热、逆向冷凝和逆向汽化现象;蒸馏塔夹点问题;多股进料蒸馏塔精馏段和提馏段划分原则;蒸馏塔塔板效率超过100%的原因;不同类型热泵蒸馏的模拟及比较等。针对缺乏有关蒸馏塔板效率实际数据的现状,搜集并给出了数量众多的各类塔、各种不同物系塔板效率的实验数据。本书内容丰富、新颖、翔实。

本书可作为高等学校研究生、本科生的专业课教材和教师参考用书,也可作为化工原理、化工热力学的补充读物。对于化工、石油化工、炼油、油气田、天然气、精细化工等相关设计院、研究院和生产企业的科研、工程技术人员也是一本既有理论论述,又注重实用性的化工过程模拟和优化的参考资料。

图书在版编目(CIP)数据

化工过程模拟——原理与应用/陆恩赐,张慧娟著. —北京:化学工业出版社,2011.3

“研究生教育创新工程”化工类研究生教学用书

ISBN 978-7-122-10575-2

I. 化… II. ①陆…②张… III. 化工过程-模拟-研究生-教材 IV. TQ02

中国版本图书馆CIP数据核字(2011)第025785号

责任编辑:徐雅妮

文字编辑:刘砚哲

责任校对:洪雅姝

装帧设计:尹琳琳

出版发行:化学工业出版社(北京市东城区青年湖南街13号 邮政编码100011)

印 装:大厂聚鑫印刷有限责任公司

787mm×1092mm 1/16 印张15¼ 字数401千字 2011年5月北京第1版第1次印刷

购书咨询:010-64518888(传真:010-64519686) 售后服务:010-64518899

网 址: <http://www.cip.com.cn>

凡购买本书,如有缺损质量问题,本社销售中心负责调换。

定 价: 68.00 元

版权所有 违者必究

“研究生教育创新工程”化工类研究生教学用书

指导委员会

主任委员 余国琮院士 (天津大学)

副主任委员 (按姓氏笔画排序)

杨锦宗院士 (大连理工大学)

时铭显院士 (中国石油大学)

欧阳平凯院士 (南京工业大学)

金涌院士 (清华大学)

胡英院士 (华东理工大学)

袁渭康院士 (华东理工大学)

徐南平院士 (南京工业大学)

委员 (按姓氏笔画排序)

马振基教授 (新竹清华大学)

王祥生教授 (大连理工大学)

元英进教授 (天津大学)

石碧教授 (四川大学)

曲景平教授 (大连理工大学)

朱家骅教授 (四川大学)

仲崇立教授 (北京化工大学)

刘昌俊教授 (天津大学)

刘洪来教授 (华东理工大学)

孙彦教授 (天津大学)

李永丹教授 (天津大学)

李伯耿教授 (浙江大学)

李笃中教授 (台湾大学)

余宝乐教授 (香港科技大学)

张丰志教授 (新竹交通大学)

陆小华教授 (南京工业大学)

陈建峰教授 (北京化工大学)

段雪教授 (北京化工大学)

姚善泾教授 (浙江大学)

钱宇教授 (华南理工大学)

徐春明教授 (中国石油大学)

谢国煌教授 (台湾大学)

谭天伟教授 (北京化工大学)

编审委员会

主任委员 王静康院士 (天津大学)

副主任委员 费维扬院士 (清华大学)

委员 (按姓氏笔画排序)

王志教授 (天津大学)

刘晓勤教授 (南京工业大学)

李忠教授 (华南理工大学)

吴乃立教授 (台湾大学)

辛忠教授 (华东理工大学)

张卫东教授 (北京化工大学)

元英进教授 (天津大学)

陈纪忠教授 (浙江大学)

陈国华教授 (香港科技大学)

赵洪教授 (清华大学)

郭绍辉教授 (中国石油大学)

郭新闻教授 (大连理工大学)

梁斌教授 (四川大学)

序

“化工类研究生创新人才培养模式、教学内容、教学方法和教学技术改革的研究”是2005年获得教育部研究生教育创新计划专项立项的研究生教育创新工程项目。该项目由天津大学牵头，清华大学、华东理工大学、浙江大学、大连理工大学、北京化工大学、南京工业大学、中国石油大学、四川大学、华南理工大学、香港科技大学和化学工业出版社等共同承担。编著系列“化工类研究生教学用书”是该项目的重要内容之一。

高质量的教学用书是培养高素质创新人才的重要基础。上述化工学科著名的高等院校发挥各自的优势，共同组织优秀的化工教育教学专家编写了本系列教学用书。我们希望本系列教学用书既有中国特色又展示国际前沿，能够为规范研究生教学、开拓研究生视野、全面提高我国化工类研究生教育水平做出贡献。

中国工程院院士、天津大学教授

王静康

2005年9月

前 言

国内化工过程模拟始于20世纪70年代初，迄今已有40年的历史。当前化工过程模拟已取得长足的进步和发展，计算机计算已基本取代手算，化工过程模拟软件也已普及。然而国内相关的化工过程模拟参考资料却为数不多，尤其缺乏从基本原理和实际应用相结合的角度来叙述化工过程模拟的专著。大多数从事化工过程模拟的技术人员只能自己在实践中摸索，在摸索中前进，在前进中思考，在思考中提高。能有一部理论结合实际的资料来指导模拟工作的开展，相信是大家的期望。

作者从20世纪70年代初就开始从事化工过程模拟的开发工作，在设计院工作期间，深感化工过程模拟的参考资料少之又少，很希望能够将自己工作中积累的过程模拟经验总结出来。1996年调至华南理工大学从事教学和科研工作后，更感到要在高等学校讲解化工过程模拟，几乎找不到一本合适的教材，于是坚定了写一本关于化工过程模拟参考书籍的决心。作者在设计院时亲自参加了大量的装置模拟和工程设计；到高校后又为许多石化、炼油、油田和精细化工生产装置进行过模拟和优化改造。书中融汇了作者40余年的化工过程模拟和工程设计经验，希望能够对读者有所裨益。

化工热力学和单元过程计算是过程模拟的基础，本书主要内容集中在这两方面。虽然从事软件开发需要对数学模型和方程处理非常熟悉，但本书目的主要针对应用，并不拟对此做过多的详细介绍，而是从应用的角度出发进行阐述。所有章节的论述重点都紧紧围绕着基本原理和应用，作者始终认为化工过程模拟的根本在于对化工基本概念的认识和掌握。缺乏基本概念等于无源之水，无本之木。

在工业上，多进料蒸馏塔比比皆是，如何划分它们的精馏段和提馏段？对于同一烃类混合物在恒压下可能存在两个泡点温度，蒸馏塔的板效率可以大于100%？热泵蒸馏是蒸馏节能手段之一，如何设计、选择热泵流程？哪些是关键工艺参数，如何确定它们？对于传热过程，传统的对数平均温差计算公式在许多场合并不适合，计算结果是错误的，绝对不能应用于换热器计算。此外，诸如逆向蒸馏、逆向传热、逆向冷凝、逆向汽化、蒸馏夹点等化学工程专题，凡此种种，本书均一一详细给予解答并辅以模拟实例。希望能够使读者的视野更加宽阔，学识更加广博，知识进一步更新。

本书系作者一孔之见，疏漏之处在所难免。殷切期盼读者和同行不吝赐教，并预致谢忱。

作 者

2010年10月 于广州

目 录

第 1 章 绪论	1
1.1 概述	1
1.2 化工过程模拟分类	2
1.3 化工过程模拟发展简史	2
1.4 化工过程模拟的功能	3
1.4.1 新装置设计	3
1.4.2 旧装置改造	3
1.4.3 新工艺、新流程的开发研究	4
1.4.4 生产调优、疑难问题诊断	4
1.4.5 科学研究	4
1.4.6 工业生产的科学管理	4
1.4.7 动态模拟、实时优化的基础	5
1.5 化工过程稳态模拟系统的构成	5
1.5.1 模拟系统的主要组成部分	5
1.5.2 模拟软件的基本输入数据—— 五大输入部分	6
参考文献	7
第 2 章 化工过程模拟及相关高新技术	8
2.1 化工过程动态模拟	8
2.1.1 动态模拟的主要功能和应用 领域	8
2.1.2 国外动态模拟的发展	10
2.1.3 稳态模拟和动态模拟的异同	11
2.2 化工过程先进控制	12
2.2.1 概述	12
2.2.2 先进控制和 DCS 控制的主要 区别	13
2.2.3 先进控制的特点	14
2.2.4 多变量预估控制的执行步骤	15
2.2.5 先进控制的经济效益	15
2.2.6 国外发展概况	15
2.3 化工过程实时优化	16
2.3.1 概述	16
2.3.2 实时优化的应用范围和功能	17
2.3.3 实时优化系统主要结构框图	17
2.3.4 实时优化的方程组集形式	18
2.3.5 实时优化的目标函数	20
2.4 四项高新技术之间的关系和效益	20
参考文献	21
第 3 章 石油馏分	23
3.1 石油油品的相关性质	23
3.1.1 密度和 API 重度	23
3.1.2 特性因子	24
3.1.3 雷氏蒸气压	24
3.1.4 实沸点蒸馏	24
3.1.5 恩氏蒸馏 (ASTM D86)	25
3.1.6 ASTM D1160 蒸馏	25
3.1.7 ASTM D2887、D3710、HTSD 蒸馏	25
3.1.8 不同蒸馏曲线的相互转换	25
3.1.9 闪点	26
3.1.10 倾点	26
3.1.11 辛烷值	26
3.1.12 十六烷值	27
3.2 石油馏分在模拟中的处理方法	27
3.2.1 逐一定义石油组分	27
3.2.2 通过油品蒸馏曲线产生石油 组分	27
3.3 石油馏分的混合	30
参考文献	31
第 4 章 热力学方法	32
4.1 前言	32
4.2 若干基本概念	32
4.2.1 气液相平衡	32
4.2.2 理想气体	34
4.2.3 理想溶液	34
4.2.4 轻、重关键组分	34

4.2.5	相对挥发度	34	公式	50	
4.2.6	相律	35	4.7	逸度、焓及熵公式的验证	51
4.2.7	干基和湿基	35	4.8	相平衡常数及焓的偏导数	51
4.3	相平衡常数计算	35	4.8.1	焓对温度偏导数 $\partial(\Delta H/\partial T)$ 的 推导及计算公式	52
4.3.1	理想气体和理想溶液体系相平衡 常数的计算	35	4.8.2	逸度系数对温度偏导数 $\partial\phi/\partial T$ 的 推导及计算公式	53
4.3.2	状态方程法——非极性体系相平衡 常数计算	36	4.8.3	逸度系数对组成偏导数 $\partial\phi/\partial x$ 的 推导及计算公式	53
4.3.3	活度系数方程法——极性体系相 平衡常数计算	41	4.8.4	相平衡常数对温度和组成偏导数 $\partial K/\partial T, \partial K/\partial x$ 的计算 公式	54
4.3.4	通用关联式法	44	4.9	含水烃类体系相平衡计算	55
4.4	混合物焓值计算	46	4.9.1	简化烃水分层计算法	55
4.5	混合物熵值计算	47	4.9.2	严格三相平衡计算法	56
4.6	从状态方程导出逸度系数、焓及熵 计算公式	47	4.10	亨利定律在过程模拟中的应用	56
4.6.1	由状态方程导出 Z 方程	47	4.11	传递性质计算	57
4.6.2	由状态方程导出逸度系数计算 公式	48	4.11.1	黏度计算	58
4.6.3	由状态方程导出焓差计算 公式	49	4.11.2	各种商业软件中传递性质的 计算	63
4.6.4	由状态方程导出焓差计算		参考文献	63	
第5章 化工单元过程计算 65					
5.1	化工模拟软件的主要模块	65	5.3.9	双泡点温度的取舍	75
5.2	模型和算法	65	5.4	物流混合/物流分支	75
5.3	闪蒸过程	66	5.5	阀门	76
5.3.1	主要计算功能	66	5.6	泵	76
5.3.2	泡点温度计算	67	5.7	压缩机/膨胀机	76
5.3.3	露点温度计算	68	5.8	反馈控制	77
5.3.4	泡、露点温度计算的判据	68	5.9	优化器	77
5.3.5	一类无泡点温度的特殊现象	69	5.9.1	优化器的输入要求	77
5.3.6	绝热闪蒸过程计算	70	5.9.2	优化器的输入条件的确定 原则	78
5.3.7	逆向冷凝和逆向汽化	72	参考文献	79	
5.3.8	无逆向冷凝的双泡点现象	74			
第6章 蒸馏过程计算 80					
6.1	前言	80	6.4.2	全回流	84
6.2	蒸馏过程严格计算方法的沿革	80	6.4.3	最小回流比	84
6.3	蒸馏塔类型	82	6.4.4	最少理论板数	84
6.3.1	常规蒸馏塔	82	6.4.5	优惠回流比	84
6.3.2	复杂蒸馏塔	83	6.4.6	最佳进料板位置	85
6.3.3	吸收塔	83	6.4.7	蒸馏夹点	85
6.3.4	解吸塔	84	6.4.8	切线夹点	86
6.3.5	吸收蒸出塔	84	6.4.9	恒浓区	87
6.4	蒸馏过程若干基本概念	84	6.5	蒸馏塔严格计算数学模型	87
6.4.1	理想平衡级(理论板)	84	6.5.1	理想平衡级	87

6.5.2	蒸馏塔严格算法的输入参数	89	关系	100	
6.5.3	蒸馏塔计算中的设计规定	90	6.7.5	影响塔板效率的主要因素	101
6.5.4	蒸馏塔工艺参数的相互影响	91	6.7.6	各类物系塔板效率参考数据	102
6.5.5	蒸馏塔设计规定的重要性	91	6.7.7	蒸馏塔特殊板相应的理论板数	106
6.5.6	影响蒸馏过程收敛的其它因素	97	6.8	最小回流比和最小理论板数的严格计算	110
6.6	多股进料蒸馏塔精馏段和提馏段的划分	98	6.8.1	最小回流比和理论板数的严格法计算	111
6.7	塔板效率计算	99	6.8.2	求取最小回流比和理论板数的案例	112
6.7.1	默弗里效率	99	参考文献	113	
6.7.2	全塔效率	100			
6.7.3	全塔效率的经验公式	100			
6.7.4	默弗里效率和全塔效率的				
第7章 蒸馏过程节能和优化 114					
7.1	前言	114	7.4.2	釜液节流开式热泵	129
7.2	蒸馏塔进料状态优化	115	7.4.3	塔顶气相压缩开式热泵	134
7.2.1	塔顶产品占主要比例	115	7.4.4	闭式热泵	136
7.2.2	塔釜产品占主要比例	117	7.4.5	三种类型热泵比较	137
7.2.3	进料状态优化的方法	117	7.4.6	结论	139
7.2.4	工业应用案例	118	7.5	中间再沸器和中间冷凝器	139
7.2.5	结论	119	7.5.1	中间换热器节能原理	140
7.3	蒸馏塔进料位置优化	119	7.5.2	采用中间换热器的条件	140
7.3.1	最佳进料板位置	119	7.5.3	中间换热器的物料进出口位置	141
7.3.2	蒸馏塔最佳进料位置早期计算方法	119	7.5.4	中间换热器出口物料的汽化率和冷凝率	142
7.3.3	逆向蒸馏	120	7.5.5	中间换热器的物料流量	142
7.3.4	逆向蒸馏产生的原因	121	7.5.6	中间换热器和进料状态的关系	143
7.3.5	蒸馏夹点	122	参考文献	143	
7.3.6	最佳进料板位置确定	123			
7.4	蒸馏塔热泵节能	125			
7.4.1	热泵工作基本原理	125			
第8章 换热器计算 145					
8.1	换热器简化计算	145	8.4.1	池沸腾传热	165
8.2	换热器严格计算	146	8.4.2	再沸器汽化率及循环比	166
8.2.1	换热器的 TEMA 型号	146	8.4.3	再沸器系统设计计算步骤	167
8.2.2	换热器选型	148	8.5	热虹吸式再沸器压力平衡计算	167
8.2.3	换热器设计中其它问题	152	8.5.1	再沸器物料的推动力计算	168
8.2.4	换热器基本传热公式	158	8.5.2	再沸器系统的阻力计算	168
8.2.5	对数平均温差常规计算方法	158	8.5.3	再沸器系统的压力平衡计算	168
8.2.6	对数平均温差分区计算方法	159	8.5.4	再沸器系统阻力降手算方法	168
8.3	换热器温度交叉和逆向传热	161	8.5.5	再沸器系统压力平衡的计算机计算	169
8.3.1	温度交叉和逆向传热现象	161	8.5.6	再沸器系统管线阻力计算公式的选择	172
8.3.2	逆向传热的解决方案	164			
8.4	再沸器设计计算	165			

8.5.7 再沸器总推动力小于总阻力时之 结果	172	结果	172
8.5.8 再沸器总推动力大于总阻力时之 结果	172	参考文献	173
第9章 化工流程迭代技术	174		
9.1 前言	174	9.3.2 Wegstein 方法	177
9.2 流程排序与收敛	175	9.3.3 Broyden 方法	178
9.2.1 流程排序	175	9.4 影响流程迭代收敛的主要因素	178
9.2.2 流程收敛判据	176	9.5 一类永不收敛的流程	179
9.3 流程迭代及加速收敛方法	176	参考文献	181
9.3.1 直接迭代法	176		
第10章 化工流程模拟算例	182		
10.1 相平衡算例	182	10.3 简单化工流程算例	215
【例 10-1】 计算丙烯在 3.033atm 下的饱和 温度	182	【例 10-14】 反馈控制	215
【例 10-2】 计算氟里昂-22(R-22) 在 2.402atm 下的饱和温度	182	【例 10-15】 某乙烯装置脱甲烷系统	216
【例 10-3】 计算三元烃类混合物露点 温度	183	【例 10-16】 天然气脱硫流程	218
【例 10-4】 计算六元烃类混合物露点 温度	184	【例 10-17】 膨胀机回收高压气体 能量	223
10.2 化工单元过程算例	184	【例 10-18】 分凝分馏器模拟	225
【例 10-5】 液化气罐爆炸温度计算	184	【例 10-19】 不同品位冷剂价格计算—— 丙烯机模拟	228
【例 10-6】 涡流管计算	185	10.4 大型化工工业装置算例——催化裂化 装置吸收稳定系统计算	232
【例 10-7】 绝热闪蒸与膨胀过程	189	10.4.1 流程简述	232
【例 10-8】 空气从储罐泄漏过程模拟	190	10.4.2 工艺特点	233
【例 10-9】 蒸馏塔设计算例	191	10.4.3 解决收敛问题	234
【例 10-10】 原油蒸馏常压塔计算	195	10.4.4 流程分析	235
【例 10-11】 乙酸-水分离塔算例	202	10.4.5 局部优化和总体优化	236
【例 10-12】 内部热集成塔——无冷凝器和 再沸器的新型蒸馏塔	204	10.4.6 吸收稳定系统蒸馏塔板数 优化	237
【例 10-13】 油吸收脱甲烷塔	209	参考文献	239

第 1 章 绪 论

1.1 概述

化工过程稳态模拟又称静态模拟或离线模拟^[1~11] (steady state simulation, off-line simulation), 通常所说的化工过程模拟或流程模拟多指稳态模拟, 这也是本书所讨论的主要内容。化工过程稳态模拟是根据化工过程的稳态数据, 诸如物料的压力、温度、流量、组成和有关的工艺操作条件、工艺规定、产品规格以及一定的设备参数, 如蒸馏塔的板数、进料位置等, 采用适当的模拟软件, 用计算机模拟实际的稳态生产过程, 得出所计算的整个流程或单元过程详细的物料平衡和热量平衡数据。其中包括人们最为关心的原材料消耗、公用工程消耗, 产品、副产品的产量、组成和质量等重要参数。简言之, 化工过程模拟是一种高科技手段, 它根据化工单元过程和热力学的基本方程, 应用现代数学方法, 编制成计算机软件, 使之能够模拟实际的化工生产过程。也即在计算机上准确地“再现”实际生产过程, 得到详细、完整的物料平衡和热量平衡数据。与此同时, 全部物料的相关性质, 如相对分子质量、密度、比热容、热导率、黏度、表面张力、焓值、熵值等参数也会同时获得。

化工过程稳态模拟的一个特点是模拟结果与时间无关, 即认为被模拟过程的所有参数, 包括所有物料的压力、温度、流量及组成等参数均不随时间而改变。这也是绝大多数化工生产过程的实际情况, 实际生产过程总是在相对长的一段时期内, 生产和工艺指标维持相对稳定, 直至原料、公用工程或设备状况发生较大的变化, 此时会对相关参数进行一定调整, 再达到一个新的稳态。

化工过程模拟在计算机上“再现”了实际的生产过程。由于这一“再现”过程并不涉及实际装置的任何管线、设备以及能源的变动, 仅仅是在计算机上对流程、工艺条件、公用工程条件、原料条件和某些设备条件(如蒸馏塔板数、进料位置)等参数进行设置, 便可对流程进行计算并得到与实际工况相符的结果。因而给了化工模拟人员最大的自由度, 可以在计算机上“为所欲为”地进行不同方案和工艺条件的计算、探讨、分析。并且化工过程模拟所需的成本较低, 完成一定研究任务所需的时间也较短, 这是任何实验研究所无法比拟的, 因而化工过程稳态模拟已成为研究、开发、设计、挖潜改造、节能增效、生产指导乃至企业管理等工作必不可少的工具, 并且在科研和实际生产中发挥着愈来愈大的作用。

当前化工过程稳态模拟主要应用于炼油、石油化工和化工领域, 如常减压、加氢、催化裂化、气体分馏、芳烃分离、乙烯、环氧乙烷、天然气、油田气分离及合成氨等装置, 在精细化工、医药、农药、造纸和环保等行业也有一定应用。随着科学技术的进步, 目前对于大量石油化工、炼油、天然气和烃类分离装置以及精细化工装置的计算已经相当准确、可靠和成熟, 达到了无需小试、中试, 模拟结果可直接用于工业装置设计的程度。

1.2 化工过程模拟分类

化工过程模拟可分为稳态模拟和动态模拟 (dynamic simulation) 两类。动态模拟发展至今已有 20 多年的历史, 它是计算装置的某个或数个参数发生变动时, 其它所有参数如何随时间而发生变化。因而它的计算永远不会终结, 对于任何一个参数的变动, 计算结果都是系统中所有工艺参数及相应的性质随时间变化的关系曲线。

动态模拟主要用于过程动态特性的分析、控制方案的制订、开停车方案的优化以及操作工培训软件的开发等方面。随着计算机和模拟技术的发展, 动态模拟的应用也愈来愈多。但因受其应用领域的限制以及输入量巨大、计算复杂等因素的影响, 目前使用还远比不上稳态模拟广泛。

1.3 化工过程模拟发展简史

国外化工过程稳态模拟始于 20 世纪 50 年代中后期。1958 年美国 M. W. Kellogg 公司推出了世界上第一个化工模拟程序——Flexible Flowsheeting。整个 60 年代, 可称为化工过程模拟的初始发展期。国外各有关大学、研究机构和炼油、石化公司纷纷开始研制自己的模拟系统。美国 Chevron 公司的 CHEVRON, Houston 大学的 CHESS^[9] 和 Purdue 大学的 PACER 等软件都在这一时期推出。这一时期的模拟软件, 由于刚刚开始发展, 功能比较简单, 计算范围较窄, 计算能力较差, 收敛能力存在较多问题。从 70 年代起, 过程模拟逐渐进入了它的成长壮大期, 化工过程模拟技术得到了工业界的普遍承认, 美国 Monsanto 公司的 FLOWTRAN^[6,7] 和 Simulation Sciences 公司的 PROCESS 都是这一时期比较优秀的软件。进入 80 年代后, 化工过程模拟走向了它的成熟期。模拟软件的开发、研制走向专业化、商品化。从过去的分散在大学和各个炼油、石化公司转向主要由专门的化工软件公司进行。模拟计算的准确性、可靠性大大加强, 应用范围不断拓宽, 功能日益丰富, 使用越来越方便。并且涌现了一批著名的、影响广泛的商业化软件, 如美国 Aspen Tech 公司的 ASPEN PLUS^[12], Simulation Sciences 公司的 PRO/II^[13], 加拿大 HyproTech 公司的 HYSIM 等。从 90 年代开始, 是化工模拟的深入发展期。最主要的特点是从“离线”走向“在线”, 从稳态模拟发展到动态模拟和实时优化, 从单纯的稳态计算发展到和工业装置紧密相联。此外, 更提出了“生命周期模拟” (lifecycle modeling) 的概念, 即在装置的研究开发、设计、生产等各个阶段, 从它的起始到终结 (装置退役) 都始终贯穿着化工过程模拟技术这一主线。这一时期, 化工过程模拟获得了大范围的推广应用, 不仅在设计、研究部门是必备的工具, 在各炼油、石油化工企业中也广为应用。国外不少企业已将著名的软件如 ASPEN PLUS 或 PRO/II 等列入企业标准。可见过程模拟在工业界影响之巨大。同时, 新的模拟软件不断问世, 如模拟聚合物系统的 Polymer Plus 软件, 基于速率方程的复杂塔严格计算法等。80 年代末 Aspen Tech 公司率先推出了动态模拟软件 Speed Up。90 年代各有关公司竞相推出动态模拟软件, 如 HYSIS 等。化工过程模拟呈现一片欣欣向荣的新景象。上述 80 年代称雄的三家化工软件公司, 在 90 年代仍然居化工模拟界的领导地位。尤其值得一提的是 Aspen Tech 公司, 自从 1996 年以来收购了美国著名的过程控制公司 Setpoint 公司和 DMC (Dynamic Matrix Control) 公司、Bachtel 公司的计划调度软件部 PIMS 等十余家公司后, 其业

务范围已涵盖了从过程模拟到过程控制及企业管理，成为过程工业最大的软件及工程服务供应商。

国内化工过程模拟约起始于60年代末。整个70年代是国内自行开发模拟软件的兴旺期和大发展时期。当时的化工部第四、第五、第六、第八、第九设计院，化工部设计公司，燕山石化设计院，上海医药工业设计院等许多单位均投入相当的人力、物力进行模拟系统的开发研究。1977年化工部第五设计院在国内率先推出了烃类分离模拟系统，并成功地用于大型30万吨乙烯装置的计算。当时化工部以此模拟系统为样本，源程序无偿在部内各单位发放，开展化工流程模拟攻关工作。此后各有关设计院所均纷纷建立了自己的模拟系统，当时主要用于乙烯和合成氨装置的计算。至70年代末80年代初，国内模拟软件的水平已相当接近国外的先进水平。然而由于国内计算机硬件条件的落后且一时难以解决，人力资源的组合等软件条件又受到种种限制，使得化工模拟软件的进一步发展受到严重制约。随着80年代引进风的兴起，国外的先进软件如ASPEN PLUS、PROCESS、HYSIM、CHEMCAD、DESIGN II等纷纷落户国内，此后国内模拟软件开发工作基本趋于停顿，各个单位原有的计算机模拟中坚力量也纷纷，各奔东西。70年代的兴旺，有如美丽的昙花一现。所幸青岛化工学院（现青岛科技大学）在原化工部第九设计院的模拟软件基础上进一步开发，于1987年推出了“工程化学模拟系统”ECSS^[14,15]，可谓“一枝独秀”，成为迄今为止国内唯一的独立开发的商品化化工模拟软件。但国内各方面条件无法和国外相比，ECSS难以和国外软件竞争，只能处于“无可奈何花落去”的境地。

当前国内的化工模拟软件和模拟力量主要集中在有关的化工设计院、大型炼油石化企业和大专院校中。

1.4 化工过程模拟的功能

1.4.1 新装置设计

化工稳态模拟的主要应用之一是新装置的设计。当前炼油、石化和化工装置的设计都要采用过程模拟来求得整个装置的物料平衡和能量平衡。如前所述，随着科学技术的进步，在石油化工和炼油领域，绝大多数过程模拟的结果已经可以直接用于工业装置的设计，而无需小试或中试。尤其是对于乙烯装置、炼油工业中的常减压、催化裂化、气体分馏等装置，过程模拟已经可以提供十分准确的数据，以至于达到了可以用模拟结果作为标准，反过来检验现场的生产操作和仪表是否存在问题。

国外从20世纪60年代末开始，已开始在工程设计中应用过程模拟技术。国内则相对较晚，70年代仅有少量应用，大量应用出现在80年代，而90年代已达到较为普及的程度，进入21世纪以来，不仅相关设计单位大量使用化工模拟软件，高等院校也纷纷引进国外著名模拟软件，用于科学研究工作和教学，过程模拟应用得到进一步的发展。

1.4.2 旧装置改造

化工稳态过程模拟已成为旧装置改造必不可少的工具。由于旧装置的改造既涉及已有设备的利用，又可能增添必需的新设备，其设计计算往往比新装置设计还要繁复。中石化石油科学研究院于20世纪80年代末开发出多产液化气 and 汽油的MGG催化裂化新工艺。中石化总公司决定在兰州炼油厂原60万吨催化裂化装置上直接进行工业化试验，试验规模为年处理量40万吨。中石化总公司为此项目投入了800万元的风险基金，如改造不成功，该笔基金作为赔偿支付给兰州炼油厂。由于产品分布和处理量的改变，要求对装置中的分馏系统、

吸收稳定系统进行改造。原有的塔、换热器、气压机、泵以及管线等是否仍旧适应，还是必须更新？这些问题都必须在过程模拟的基础上才能得到解决。该催化裂化装置的流程模拟工作交由中石化兰州设计院进行，通过模拟得到了分馏和吸收稳定系统的全部物料平衡和热量平衡数据，作为这两个系统改造的依据。最后该改造工程一次开车成功，并获中石化总公司优秀设计奖。又如燕山石化公司 30 万吨乙烯改造为 45 万吨规模，采用“两头一尾”方案，热区增加一条裂解炉生产线，分离部分在原基础上进行改造，也完全依靠了过程模拟的严格计算，使改造一次成功，成为大型乙烯装置改造的典范。

1.4.3 新工艺、新流程的开发研究

20 世纪 60~70 年代以前，炼油、石化工业新工艺新流程的开发研究，需要依靠各种不同规模的小试、中试。随着过程模拟技术的不断进展，已逐渐转变为完全或部分利用模拟技术，仅在某些必要环节辅以个别的试验研究和验证。对于炼油和石油化工工业的各种分离系统更是如此。华南理工大学于 2002 年 6 月至 2005 年 1 月和中石化广州分公司合作完成了“催化装置和气体分馏装置联合优化”项目工业化试验，该项目完全通过这两套装置的流程模拟，开发出气体分馏装置新工艺流程，取消了原有的脱乙烷塔，使得气体分馏装置的丙烯回收率从原来的 94% 提高到 98.8% 以上。中石化广州分公司的两套催化装置和两套气体分馏装置的联合优化共进行了两次历时 5 个月的工业化运行，取得了完全的成功。据工业化运行的数据，实施联合优化后两套共计 32 万吨的气体分馏装置年经济效益净增达 1914 万元。该项目于 2005 年 10 月通过了中石化总公司的鉴定，并获得国家发明专利^[16]。

1.4.4 生产调优、疑难问题诊断

在生产装置调优、疑难问题诊断上，过程模拟更是起着不可替代的作用。通过流程模拟，寻求最佳工艺条件，从而达到节能、降耗、增效。更有通过全系统的总体调优，以经济效益为目标函数，求得关键工艺参数的最佳匹配，并革新了传统的观念。如文献 [17] 介绍，通过对催化裂化装置吸收稳定系统的总体调优，发现了解吸塔的釜温对总体经济效益影响巨大。该釜温若较最佳釜温高 1℃，则对 120 万吨装置年效益损失达 250 万元。若低于最佳釜温，则后续产品液化气质量不合格。因而该温度既低不得，又高不得。而过去从未认识到该釜温有如此显著的影响，也无最佳釜温的概念，更没有对该釜温的控制给予足够的重视。

在应用过程模拟进行过程模拟诊断上，也有不少实际例子。如 80 年代兰化公司乙烯装置由砂子炉改造为毫秒炉后，分离部分乙烯的回收率下降近 10% 左右。乙烯究竟从何处跑掉，车间、厂方均百思不得其解。后经计算机模拟分析，真正找到了乙烯损失的原因，并在此基础上提出了改进方案^[18]。

1.4.5 科学研究

随着计算机软、硬件的飞速发展和科学技术的进步。过程模拟在科研工作中也发挥着愈来愈重要的作用。过程模拟在一定程度上取代了实验室实验。如 20 世纪 90 年代初，美国 Stone & Webster 公司推出了乙烯新技术——ARS 技术 (Advanced Recovery System)。国内即有学者应用模拟技术证实了该技术的可行性，并首次在国内提出了其专利设备分馏分凝器 (Dephlegmator) 的计算方法^[19]。美国乙烯专利商 Lummus 公司，推出低压脱甲烷取代原有的高压脱甲烷工艺后，有学者应用蒸馏塔模拟和有效能分析，证实低压脱甲烷的能耗确实较高压脱甲烷低^[20]。进入 21 世纪，更有学者利用过程模拟提出了催化装置和气体分馏装置的联合优化新工艺，并在中石化广州分公司进行工业实施，取得了成功。

1.4.6 工业生产的科学管理

国内化工生产企业的生产管理，基本上仍停留在经验型的基础上，即在制订生产计划和

消耗指标时往往主要根据以往的生产统计数据。

通过过程模拟，可以比较准确地计算出化工生产装置的产品产量和公用工程消耗量。这样就为装置的生产管理提供了比较准确可靠的理论依据。因而过程模拟是企业生产管理从经验型走向科学型的有力工具。

1.4.7 动态模拟、实时优化的基础

过程模拟技术当前已发展到动态模拟和实时优化，而这两者的基础均是稳态过程模拟。只有在稳态模拟的数值解基础上，才能运行动态模拟和实时优化，尤其对于复杂的装置更是如此。

化工过程稳态模拟历经 40 余年的发展历史，在化工领域已广泛应用于工业装置的研究、设计、改造等，并带来明显的经济效益。稳态模拟软件的应用也已成为一股不可抗拒的浪潮，影响着化学工业的发展。

1.5 化工过程稳态模拟系统的构成

1.5.1 模拟系统的主要组成部分

本书主要介绍化工过程稳态模拟，这也是迄今为止最重要、使用最多的化工计算机模拟。现今的化工过程模拟商品化软件数量众多，任何一个通用化工模拟系统，无论其开发商是谁，也无论其软件规模和功能如何，它们的基本结构都是类似的。所谓通用化工模拟系统指的是该模拟软件适用于任何化工流程。而早期推出的模拟软件多是专用的，即仅适用于某一确定的化工流程，要计算其它流程必须由程序员专门编写一段与该流程相应的计算程序。专用模拟软件适用范围很小，使用不便，早已淘汰。欲实现软件的通用化，必须要有如图 1-1 所示的模拟系统结构简图。

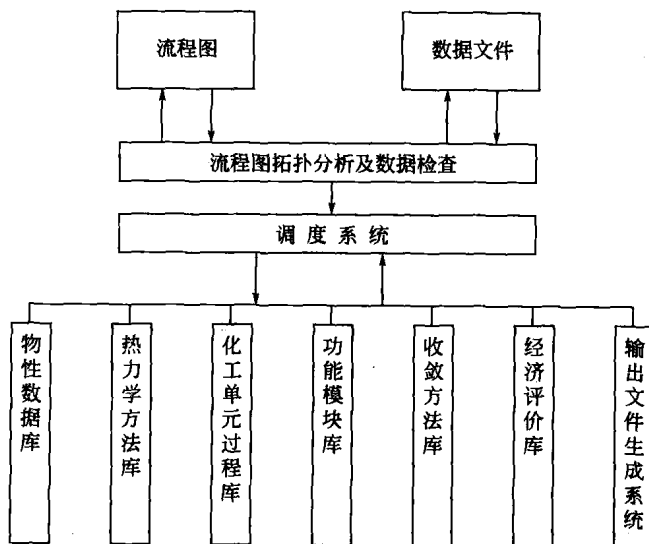


图 1-1 稳态模拟系统的结构

现代的模拟系统既可以用图形界面，也可采用数据文件的方式输入，且这两种方式之间可以相互转换。图形输入简单直观，需先将所需计算的模拟流程图作出，然后再输入相关数据。由于无须记忆输入格式和关键字，方便使用，已成为主要的输入方式。数据文件输入方

式需要用户根据流程及单元过程采用关键字进行输入，较为繁复，目前已较少使用，但其优点是便于保存输入文件的文本，供日后查阅。故通常作法是采用图形界面输入后，再保存一份关键字输入文件。

数据输入完毕之后，便由模拟系统进行流程拓扑分析和数据检查。拓扑分析检查物流和单元过程匹配是否合理，同时还需对流程进行分割和撕裂，确定是否需要作流程迭代并鉴别出返回物流，求出返回物流最少的流程最佳计算顺序；数据检查则分析所输入的相关参数是否恰当。这一阶段的检查只分析数据的合理性，而并不涉及正确性。如发现错误或数据输入不完整，即返回输入系统，提示用户进行修改，直至数据填写完全，无不合理输入为止。

数据检查之后则进入调度系统。调度系统是程序中所有模块调用及程序运行的指挥中心，作用极其重要，调度系统的主要功能有以下几点：

- ① 单位制的匹配；
- ② 热力学方法的调用；
- ③ 物流和单元过程的动态组合；
- ④ 动态地组织流程、调用相关单元过程，指挥计算机按照拓扑分析确定的流程顺序进行计算；
- ⑤ 在给定的迭代次数内给出流程计算是否收敛的信息。

模拟系统实现通用化的关键是必须通过调度系统动态组织流程，因而调度系统考虑的是否周全、完善，编制的是否灵活机动，是否为用户提供了最大的方便，对于模拟软件的性能是至关重要的。可以说调度系统是程序逻辑性、完善性、灵活性、使用性最重要的体现。对其组织、编制和逻辑处理的技巧要求是最高的。

模拟系统中有着众多的模块库，如组分物性数据库、热力学方法库、化工单元过程库、公用模块库、收敛方法库、经济评价库等。其中最为重要的是热力学方法库和化工单元过程库。有无适当的化工单元模块，决定了该化工过程是否能够进行计算。而有无适当的热力学方法，又决定了计算结果是否准确可靠。两者相互配合，缺一不可。当前，通过长期深入研究，大多数单元过程都有了准确、严格的算法。而热力学方法的研究，相对来说还不能完全满足实际计算的需要。尤其在处理极性物质方面，相当大的程度上还取决于是否有相关体系足够的、准确的实验数据，以便用来回归相平衡计算所必需的二元相互作用参数。因而在进行化工过程模拟时，首先必须考虑的是应选择适合所计算物系的、准确的、热力学方法。目前，热力学方法已成为化工流程模拟是否成功的决定性因素。

任何模拟软件均会内置一个或多个纯组分物性数据库，其中存放了纯组分的大量物性，如相对分子质量、沸点、相对密度、临界温度、临界压力、临界压缩因子、偏心因子、液相摩尔体积、理想气体焓、饱和液体焓、燃烧热、汽化热等。这些物性大多系模拟计算所必需的，有了物性数据库就无须用户再去一个个查找相关的物性，极大地方便了使用。

模块库中，除了化工单元过程模块库外还有功能模块库，该库中放置了一些十分有用的、提高计算性能的特殊模块，如反馈控制、优化器、计算器、灵敏度分析、工况研究等模块。它们并非具体的单元操作过程，但对加速计算，实现用户的特定计算要求起着重要作用。若能灵活应用，能够加速计算、提高流程模拟的效率，有时还能取得意想不到的效果。

经济评价库可以帮助用户进行设备费用和操作费用计算，但这些费用强烈取决于地区和时期，开发商只能根据所在国一定时期的价格进行编制，故使用时应当注意。

1.5.2 模拟软件的基本输入数据——五大输入部分

任何模拟软件，除了需输入模拟计算流程图之外，还必须由用户输入五部分数据，它们是：计算总说明、组分数据、热力学方法、物流数据、单元过程数据。

尽管模拟软件可由不同的开发商提供、不同的人员编制，但这五部分数据均是缺一不可，多一无用。故只要掌握了一个模拟软件的使用，其它任何开发商的模拟软件均可快速学会。

计算总说明主要输入计算的单位制，一般商品化的软件均提供英制、公制和国际单位制三种单位制，并且可由用户自行指定、调整所愿意采用的任何量的单位。此外用户还可在总说明中指定输出报告所拟采用的单位制、输出的格式、项目名称、计算日期和计算者等信息。

组分数据需要输入所计算流程的组分数目和名称，一般来说，可分成以下三类组分：

- ① 库组分，按照软件内置的组分数据库的规定，定义所需的组分；
- ② 石油馏分，提供蒸馏曲线及密度，进行定义；
- ③ 用户定义的组分，用户提供相对分子质量、沸点和密度三个量中的两个，定义一个虚拟组分。

热力学方法要求用户根据组分的性质定义计算所采用的热力学方法，热力学方法选取的正确与否对计算的准确性起决定性的作用，故必须认真对待。

物流数据需要用户输入物流的温度、压力、流量和组成四项数据，该数据输入唯一的定义了系统的进料物流。

单元过程数据需要根据不同的流程，分别定义各化工单元过程的工艺条件及可能的约束条件。

这五大部分数据均需由用户认真准备并输入，输入数据是否正确、合理决定了模拟计算能否收敛。错误或不合理的数据必然会引起计算失败，千万不能掉以轻心。

参 考 文 献

- [1] Briddell E T. Process Design by Computer, Part 1. Chem Eng, 1974, 81 (3): 60.
- [2] Briddell E T. Process Design by Computer, Part 2. IBID, 1974, 81 (5), 113.
- [3] Flower J R, Whitehead B D. Computer Aided Design: A Survey of Flowsheeting Programs, Part 1, Chem Eng (London), 1973, 272: 208.
- [4] Flower J R, Whitehead B D. Computer Aided Design: A Survey of Flowsheeting Programs, Part 2, Chem Eng (London), 1973, 273: 271.
- [5] Kehat E, M Shacham. Chemical Process simulation Programs. Process Technology, 1973, 18 (1/2): 35.
- [6] Edward M Rosen, Allen C Pauls. Computer aided Chemical process design: the flowtran system. Computer & Chemical Engineering, 1977, 1 (1): 11-21.
- [7] Seader J D, Seider W D, Pauls A C. Flowtran simulation an introduction CACHE committee. Ann Arbor, Mich: ulrich's bookstore, 1974.
- [8] Motard R L, Shachem M, Rosen E M. Steady State Chemical Process Simulation. AIChE, 1975, 21 (3): 417.
- [9] Motard R L, Lee H M. CHESS—Chemical Engineering User's Guide [R]. 3rd edition. Texas: University Houston, 1971.
- [10] 杨友麒. 化工过程模拟. 化工进展, 1996 (3): 1.
- [11] 经文魁. 化工过程模拟技术的现状和发展趋势. 现代化工, 1995 (2): 17.
- [12] Aspen Technology Inc, Aspen Plus User Guide, Version 10.2. Chambridge, MA. USA, 2000.
- [13] Simulation Sciences Inc. Pro/II Process Simulator. Los Angeles, CA, USA, 1994.
- [14] 胡仰栋等. ECSS 工程化学模拟系统及其在化工过程中的应用. 化工进展, 1996 (3).
- [15] 韩方煜. 工程化学模拟系统软件 ECSS. 化学工程. 1986 (4): 78-80.
- [16] 华南理工大学, 中国石油化工股份有限公司, 双塔气体分馏装置及分馏方法. CN 200510033178. 2005-10-19.
- [17] 陆恩锡等. 催化裂化装置解吸塔最佳釜温的确定. 炼油设计, 1998 (5).
- [18] 陆恩锡等. 乙烯装置计算机模拟分析. 化学工程, 1991, 19 (1).
- [19] 陆恩锡等. ARS 技术剖析, 化学工程, 1993 (1).
- [20] 雷行之等. 脱甲烷塔有效能分析. 化学工程, 1981 (1).