

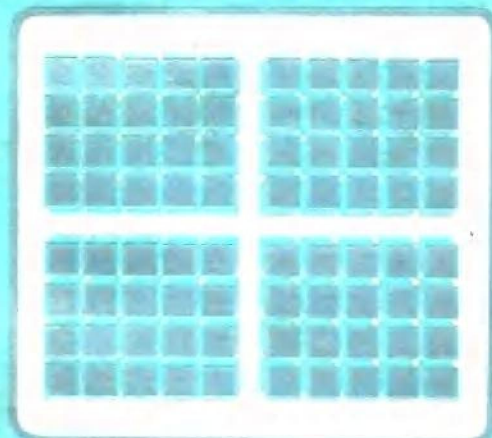
[美] W. F. 拉米雷兹 著

化工过程模拟

化工过程模拟

化工过程模拟

化工过程模拟



化学工业出版社

化工过程模拟

[美] W. F. 拉米雷兹 著

郭崇涛 虞和锡
陈力 薛履中 译

化学工业出版社

内 容 简 介

《化工过程模拟》是美国近年来出版的大学化学工程系高年级用教材。本书较全面地介绍了典型化工过程的数学模型的建立，运用模拟计算机和数字计算机进行模拟，以及运用电子计算机对各种类型的数学模型求解的方法。各章均举出较多的例题加以说明，并附有习题。

本书可用作大学化学工程系的教學参考书，也可供从事化学工业的工程技术人员参考。

本书系由天津大学化学工程系几位同志所译，参加翻译人员为：前言、导言和第一、二章，陈力；第三、四、五章，郭崇涛；第六、八章，虞和锡；第七章、附录A和B，薛履中。全书由郭崇涛和虞和锡校阅，并由张远谋教授审阅。郭崇涛负责校订和整理全部译稿。

W. F. Ramirez

Process Simulation

D. C. Heath and Company, 1976

化工过程模拟

郭崇涛 虞和锡
陈 力 薛履中 译

责任编辑：谢丰毅

封面设计：许 立

化学工业出版社出版

(北京和平里七区十六号楼)

化学工业出版社印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行

开本787×1092^{1/32}印张 9 字数204千字印数1-5,670

1985年10月北京第1版1985年10月北京第1次印刷

统一书号15063·3709 定价1.40元

前 言

本书的目的是帮助读者掌握工程师和科学家所必需的技巧，以便有效地进行化学、物理和生物等过程的模拟。本书着重介绍用数学描述过程系统的方法，以及把过程模型的各种数学关系编成计算机计算所必需的求解策略或信息流图的方法。由于大部份实际过程模拟问题都要求高速计算机计算的某种形式，故本书提出一系列习题和例题，以提高模拟和数字程序设计所必需的计算技巧。数字计算机模拟语言（如 MIMIC 和 CSMP）的可用性已使计算机程序设计工作大为简化，以致一般工程师和大学生对较大和较复杂的问题也能很快地得出数字解。

第一章推导集中参数系统仿真的宏观衡算。作者设想，学生或工程师已熟悉基本的单元操作和传递现象，本章基本上是一个复习，并通过某些简单例子首先向读者介绍信息流图的概念。

第二章讨论集中系统的稳态模拟，并提出处理庞大的线性和非线性代数方程组的计算方法。

第三章通过研究搅拌槽模型的不同方面，介绍集中系统的动态仿真。本章进一步阐述信息流图的概念，并用 MIMIC 模拟语言解几个例题。对不熟悉模拟语言的读者，附录 A 提供了 MIMIC 语言的详细说明。

第四章举出几个流体流动和反应动力系统的动态模拟例子。包含数量和时间尺度选定的完整的模拟计算机图作为例子给出。模拟计算机程序设计的基础知识列于附录 B。

第五章讨论汽-液平衡操作，其中举例范围涉及从纯流体的简单沸腾到多组份蒸馏塔。对于包含复杂逻辑解的较复杂情况，还讨论了FORTRAN程序。

第六章推导出分布参数系统模拟的微分衡算。给出初值的例题，可用本书已经介绍过的计算方法解出。

第七章讨论分离边值问题的解法。在介绍打靶法时。既应用了数字计算，也应用了周期模拟运算。提出叠加原理是为了解决线性边值问题。对于非线性问题，还讨论了拟线性化方法。

第八章为解偏微分方程介绍了有限差分法。讨论了中心差分、Crank-Nicolson 和状态变量模拟。为解非线性问题提出了拟线性化方法。

符 号

amp	安培	lb	磅
atm	大气压	lbf	磅力
Btu	英热单位	m	米
cal	(小) 卡	ma	毫安
cc	立方厘米	min	分
cm	厘米	mole	摩尔
°F	华氏度	psia	每平方英寸磅绝对压力
ft	英尺	psig	每平方英寸磅表压
g	克	°R	列氏温度
hr	小时	rad	弧度
in	英寸	sec	秒
°K	开氏 (绝对) 温标	vol.	体积
Kcal	千卡	volt	伏特
kg	公斤		
l	升		

目 录

符号	
前言	
导言	1

第一章 宏观质量、能量和动量衡算的推导

1-1 总质量守恒	7
1-2 组分 1 的守恒	10
1-3 作题的方法	10
1-4 总能量守恒	13
1-5 机械能衡算	19
1-6 动量守恒	24
习题	28

第二章 稳态集中系统

2-1 方法	31
2-2 线性方程组的解	33
2-3 非线性方程组的解	42
习题	46

第三章 不稳态集中系统

3-1 基本槽模型	49
3-2 流量为液面函数的槽	50
3-3 封闭槽容器	57
3-4 有加热夹套的搅拌槽	62
3-5 性质变化的传热问题	64

3-6 多组分进料的槽	66
习题	68

第四章 流体动力学与反应动力学系统

4-1 流体流动	72
4-2 反应动力学	80
习题	96

第五章 汽-液平衡操作

5-1 数值积分的Euler和 Runge-Kutta 算法	101
5-2 开口容器内的沸腾	107
5-3 夹套容器内的沸腾 (锅炉)	108
5-4 多组分沸腾	117
5-5 间歇蒸馏	121
5-6 二元蒸馏塔	123
5-7 多组分蒸馏塔	128
习题	140

第六章 微观衡算

6-1 总质量守恒 (连续性方程式)	142
6-2 组分 i 的守恒	144
6-3 扩散的描述	147
6-4 处理问题的方法	148
6-5 静止膜的扩散	148
6-6 动量守恒 (运动方程式)	149
6-7 扩散描述	151
6-8 牛顿型流体在管道中的流动	151
6-9 微分机械能方程式的推导及其应用	157
6-10 气体在管道中的流动	158

6-11	微分热能衡算的推导及其应用	160
6-12	通过复合圆筒形器壁的热传导	165
习题	167

第七章 分离边值问题的解法

7-1	打靶法的数字求解方法: 具有扩散作用的管式反应器	170
7-2	打靶法的模拟计算机求解方法: 牛顿型流体的切向环流 ...	174
7-3	叠加原理和线性边值问题	177
7-4	叠加原理: 环形化学反应器内的径向温度梯度	181
7-5	拟线性化	185
7-6	有扩散作用的非线性管式反应器: 拟线性化解法	188
习题	191

第八章 偏微分方程求解

8-1	对流问题的解法	194
8-2	不稳态蒸气换热器: 显式中心差分问题	196
8-3	不稳态逆流换热器: 隐式中心差分问题	198
8-4	扩散问题的解法	209
8-5	圆棒的不稳态热传导	211
8-6	同时有对流和扩散效应的问题解法: 状态变量式的列出 ...	214
8-7	可溶混表面活性剂的涌流模型	218
8-8	非线性管式反应器的不稳态响应	226
习题	241

附 录

附录 A	MIMIC——一种数字模拟语言	244
附录 B	模拟计算机程序设计	256
参考文献	279

导 言

过程模拟已被确认为一种用于物理、化学和生物过程设计和优化的非常成功的工程工具。近十年来，由于有了大型、高速的计算机—数字机、模拟机和混合机，模拟的应用得到迅速的发展。在化学加工工业中，大型的、实际的非线性问题，通过模拟现已能常规地解决。

模拟方法的广泛应用使得从科学通向工程的道路变得更加宽阔。工程师要在过程仿真领域内发挥自己的能力和掌握下列的技巧：

1. 对工程的基础知识要有充分的了解：工程师必须熟悉物理系统及其机理以便灵巧地模拟一个实际过程并能对此模拟作出评价。不能把工艺过程看成一个“黑箱”。

2. 模型化技巧：工程师应能建立一组适当描述工艺过程重要特点的数学关系式。

3. 计算技巧：对于模拟问题，必须快速而又经济地取得解答。工程师必须会选用适当的计算工具。对于实际问题，重要的工具通常是数字、模拟和混合计算机。

解决工程问题，模拟立足于科学而不是经验，因此，它刺激了一些跨学科领域（如生物工程、环境工程）的发展。工程师们发现，通过对生物和环境系统成功的模拟，他们能对社会作出重大贡献。建立政治和社会系统的模型，将是未来很有发展前途的领域。

化学过程模拟从化学系统的稳态和动态行为两方面进行研

究。注意动态行为方面的研究导致不稳态加工的概念，这是未来很有发展前途的操作方法之一（可参考Walles and Platt, I&EC59, no. 6, (1967): 41）。从数学和实验两方面的充分研究表明，把重复的不连续性施加于一个本是连续的操作是有利的。不稳态加工能把连续操作在经济上的优点和间歇操作在技术上可能具有的优点结合起来。连续操作在技术上的主要缺点是反应产率低，需要循环操作，这样就不得不采用某些本来可以避免的分离过程。

模拟之所以对化学加工工业影响如此之大，是由于它带来下列种种好处：

1. 经济上合算：为了设计的目的，用模拟技术将基本的实验室数据组合成数学模型较之建立中间工厂通常更为便宜。

2. 研究系统参数和过程干扰对操作的影响，仿真是一种方便的方法。通常，用数学模型来制定各种备选的操作方案和评价这些方案较之采用实验方法容易得多。为了验证模拟结果，通常也进行一些实验，但是只有少数真正关键性的实验才是必需的。

3. 模拟是特性外推和过程放大的一种合理的方法。

4. 理解重要的过程行为和机理：为了保证数学模型的精确性，工程师要对他所模拟的过程钻研得很深。要想取得成功的模拟，必须对重要的过程机理作定量的描述。通过解出模型，过程和设备变量间的有用关系将一目了然地展示出来。

复杂过程模拟的一般策略，是沿着一条非常明确的路线进行的。它所包含的惯用步骤如下面方块图所示。应该指出，图中信息沿两个方向传递，表明了任何一个有成效的仿真方法的开发过程的灵活性。



过程模拟的一般策略

问题的定义

对于一个成功的模拟来说，问题的定义是一个非常重要的方面。但是，很遗憾，这方面没有多少精确的一般法则可循。定义问题的真正关键在于一个有想象力的工程师。真正需要的是立足于坚实工程训练基础上的创造性思想。工程师着手工作前，必须在问题定义方面花费足够多的时间。一个正确的问题定义来自回答下列问题：我真正想要查明什么？什么是研究的真正重要的结果？为什么应该做这个工作？需要多少人力？这工作需要多长时间完成？

建立过程的数学模型

作出问题定义以后，工程师就可以着手写出适当的衡算方程和过程机理的各种关系式。为了确定未知机理，还必须设计和进行最低限度的实验室试验。必须决定哪些影响是真正重要的，哪些影响可以忽略。在建立数学模型过程中，工程师务必作出各种假设。

信息流

有了各种数学关系式之后，就可以把这些关系编成求解的策略，也就是说，要决定每个关系中哪个变量要解出来。对于小问题，不必过多考虑，通常可以按惯例完成这个任务。可是遇到大型问题就必须慎重。在这种情况下，建议把各方程按信

息流图来排列。这种方块图的方法有利于组织问题和图示方程变量之间的相互关系。各方程的排列应使得求解的策略与物理系统的逻辑因果关系相适应。这种方程的“自然排序”（参考 Franks, *Mathematical Modeling in Chemical Engineering*, Wiley, 1967）通常能得出稳定的、有效的求解策略。

计 算

为了得到模拟问题的解，工程师可使用直观解、分析解和高速计算机解等几种计算级别。由于化工过程仿真的复杂性和非线性关系，大多数问题需用高速计算机来解。可供使用的计算机有：数字计算机、模拟计算机和混合计算机。模拟计算机的并行程序设计原理是过程仿真特别重要的概念，因为它强调了这一点，即实际过程的机理是并行、同时地发生而不是序贯进行的。数字计算机最能多方面适用，是使用最广泛的高速计算机。这种机器特别适用于求解含有代数运算问题。FORTRAN 语言是为科学用途而设计的，它具有优良的逻辑性能，因而被有经验的过程模拟者大量使用。在解初值常微分方程组时，为了易于编程序，已研制出如MIMIC和CSMP等连续模拟语言。这些语言提供并行的语言格式，能在一台串行分立的计算机上解决并行、连续系统。用户本身不必考虑数字计算的内在特性，也不必掌握表达连续现象的序贯算法，它力求向用户提供明白清楚的解。因此，连续模拟程序使得大量模拟问题在数字计算机上编程序的工作大为简化。混合计算机是介于数字计算机和模拟计算机之间取两者特性之所长的一种较新的工具。对于解偏微分方程组和实时计算，这种计算机是有前途的。一般说来，恰当地使用混合计算机，要求较使用数字计算机和模拟计算机更高的计算技巧。

结果的解释

化学过程模拟的真正效益在于工程师对结果作出聪明的解释。在这方面，必须搞清楚模型是否已经恰当地表达了实际过程，还是有必要修改和更新。工程师必须确保所得结果是合理的，并衡量一下仿真过程是否已达到问题定义所要求的各项目标。为了改善过程特性，还需致力于研究各种合理的备选方案。

过程模拟的局限性

工程师必须了解过程模拟存在一定的局限性，如：

1. 缺乏良好的数据和过程机理的知识：过程模拟的成败在很大程度上取决于工程师可获得的基本信息。
2. 计算工具的特性：仍有某些类型的方程组，如某些非线性代数方程组及某些非线性偏微分方程组，工程师难以解决。
3. 建立过程模型时所作的假定，有被遗忘的危险。这样会使模型的结果含义过多。

习 题

在化学加工工业中，计算机模拟的重要性不断增加。为了加深对这门新生学科的了解，读者可以查阅近两年来的文献，并从杂志中找出两篇有关应用计算机（数字机或模拟机）计算和模拟去分析和解决化学工程问题的文章。对每篇文章作一个简明扼要的综述，并提供下列信息：

1. 正确地写出每篇文章的出处。
2. 作者姓名、地址和职位。
3. 研究问题的性质。
4. 研究结果的价值。
5. 计算方法（FORTRAN MIMIC、模拟、混合）和问题规模（放

★器、穿孔卡片、微分方程数目等)

下面几份杂志是很好的文献来源: Simulation, I&EC Process Design and Development, AIChE Journal, I&EC Fundamentals, and Chemical Engineering Science.

第一章 宏观质量、能量和动量 衡算的推导

为了建立物理过程的数学模型，工程师必须对过程写出恰当的衡算方程式，然后把各种机械速率和平衡关系列入这些方程组之中。宏观衡算方程围绕一个有限的控制体作出，并根据质量守恒、能量守恒和动量守恒的基本原理，导出积分表达式。由于宏观衡算方程是从整个有限控制体写出的，在守恒关系中，不会出现因变量的空间梯度。所以，温度、浓度等因变量不是控制体内空间独立变量的微分函数，只代表整个控制体的平均值。唯一的微分独立变量是时间。因此，应用宏观守恒原则，非稳态过程的数学模型是常微分方程组，而稳态过程模型是代数方程组。本章将推导宏观质量、能量及动量衡算方程，并通过某些经典问题说明它们的应用。用信息流程图把这些例子的数学关系排列成解题策略。对于这些小问题，本来可以按一般常用的方法求解，不必作过多的考虑，但是，在本章内，我们仍使用信息流图或方块图的方法，以便学生在真正需要用它来仿真较复杂问题之前，提高运用这种方法的能力。

1-1 总质量守恒

质量既不能创生亦不能消灭。总质量守恒原理是：

$$\text{质量累积速率} = \text{质量流入速率} - \text{质量流出速率}$$

亦可以写成：

$$\text{质量累积率} = -\text{净质量流出率}$$

除包含核反应的系统外，上述表达式对所有系统都适用^[1]。

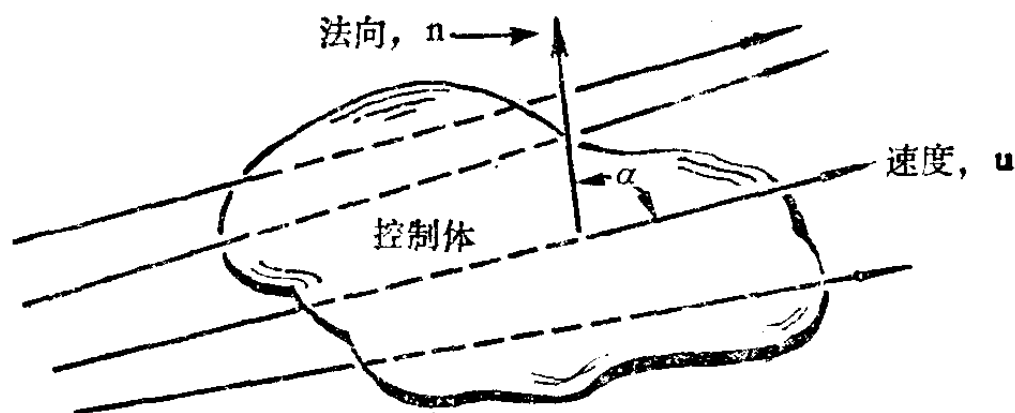


图 1-1 守恒衡算的控制体

此守恒原理应用于图 1-1 所示的一般控制体。控制体位于流体流动场内，其表面上任何一点的速度数值用 u 表示，与表面垂直的向量用 \mathbf{n} 表示。速度向量 \mathbf{u} 和法线向量 \mathbf{n} 间的夹角为 α ，质量守恒原理可表示为：

$$\frac{d}{d\theta} \iiint_V \rho dV + \text{净质量流出率} = 0 \quad (1.1.1)$$

将质量流率的点值对控制体的整个表面积分，就得出净质量流出率：

$$\text{净质量流出率} = \iint_A \rho u \cos \alpha dA \quad (1.1.2)$$

$\cos \alpha$ 项是用来计算垂直于速度方向的面积。因此，总质量衡算为：

$$\frac{d}{d\theta} \iiint_V \rho dV + \iint_A \rho u \cos \alpha dA = 0 \quad (1.1.3)$$

用向量符号表示：

$$\frac{d}{d\theta} \iiint_V \rho dV + \iint_A \rho (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) dA = 0 \quad (1.1.4)$$

式中 \mathbf{n} 是从表面向外的单位法线向量， \mathbf{u} 是速度向量。