

实用



化工系统工程

● 杨友麒 编著

化学工业出版社

实用化工系统工程

杨友麒 编著

化学工业出版社

内 容 提 要

化工系统工程是一门新兴的科学分枝,是计算机在化工应用上的理论基础,七十年代以来已从理论研究进入实用的阶段。

本书在介绍必要的基本概念和基础数学方法的基础上,着重对化工系统工程的核心内容如流程模拟、分析、综合与优化方法进行讨论。在取材方面着重介绍已被工业界普遍采用的方法和实用化的最新成果,避免了繁复的理论推导。在编写中力求深入浅出,既能满足有关大学生及研究生的系统学习要求,又尽可能照顾到有关工业部门在职技术人员知识更新的需要。

全书共三篇内分16章,第一篇为过程系统的稳态模拟与分析,第二篇为最优化方法,第三篇是过程系统的综合。

本书可供有关院校高年级学生和研究生作为教学参考书,也可作为有关工业部门的科研、设计科技人员的参考书。

实用化工系统工程

杨友麒 编著

责任编辑:苗延秀

封面设计:季玉芳

★

化学工业出版社出版发行

(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经销

★

开本 $850 \times 1168^{1/32}$ 印张 $17^{7/8}$ 字数487千字

1989年11月第1版 1989年11月北京第1次印刷

印 数 1—2,000

ISBN 7-5025-0506-7/TQ·312

定 价8.90元

前 言

系统工程是在二十世纪中期才兴起的一门综合性科学，系统工程在化工中应用的核心就是化工过程系统的分析与综合。随着计算机在化工中的应用日益广泛，无论是高等学校的学生，还是广大在职化工科技人员，都需要具备一定的化工系统工程的理论知识。

本书是根据编著者几年来在北京化工学院为研究生及“化工应用软件开发班”讲课的讲义整理补充而成的。其内容是按编著者在美国、加拿大和日本等国家进修和讲学期间所搜集到的资料，结合自己的实践体会和国内的情况编写的。在取材中尽量考虑以下几个原则。

新而实用 因为化工系统工程是一门正在迅速发展的学科，新材料层出不穷。在取材上力求反映目前已被应用的最新成果，把那些在工业中已普遍采用的方法，以及在设计和科研中经常碰到的问题，作为本书的主要内容；而把那些虽然新颖但尚不成熟的问题，当成次要内容，有的只介绍一些概念，有的只提了一下，但附有文献索引，以供参考。

深入浅出 既能使读者对这个领域有较为深入的了解，又要尽量避免采用大量繁复的数学推导。这是考虑到不仅要满足高年级大学生及研究生的需要，同时还要照顾到广大在职技术人员继续教育和知识更新的要求。

与计算机应用相结合 这门学科相当于计算机在化工中应用的理论基础，所以书中介绍了各种算法和概念。但是，由于篇幅所限，不可能给出具体的计算程序。要真正理解这些方法和概念，在计算机上进行必要的实际计算是不可缺少的。

本书的内容大约可供80学时的课堂讲授使用，其起点是从大学程度开始的，所以可供高年级大学生、研究生和在职技术人员参考。

化工系统工程所涉及的知识面非常广泛，而发展又很迅速，但限于编著者的知识和经验水平，书中有不妥甚至错误之处是在所难免，诚恳欢迎广大读者批评指正。

北京化工学院麻德贤教授和清华大学彭秉樸教授对本书初稿的编写和讲义的增补曾给予大力支持与帮助，提供了宝贵意见。最后出版稿经上海工程技术大学陆震维博士精心编审，对书的出版做出了宝贵的贡献。著者在此一并表示衷心感谢。

杨友麒
1988年元月
于北京

目 录

前言

第一章 概论	1
第一节 化工系统工程学的沿革和领域	1
1. 化工系统工程学的起源	1
2. 化工系统工程学的定义及领域	3
第二节 过程系统模拟的基本概念	6
1. 定义	6
2. 系统的模拟	7
3. 数学模型的建立	8
4. 数学模型的类型	10
第三节 过程系统分析与综合的一般方法	13
1. 问题的定义	13
2. 评价体制的设计	13
3. 系统的综合	13
4. 系统的分析	13
5. 系统的最优化	15
6. 决策	15
7. 制定实施方案	15
第四节 数学模拟的手段	15
1. 数学模拟手段的发展沿革	15
2. 数字计算机的硬件和软件	16
第五节 数学模拟的优越性及限制	18
1. 数学模拟的优越性	18
2. 数学模拟方法的限制	19
第六节 本学科研究的目的和内容	21
1. 化工过程系统模拟和分析的任务	21
2. 本书的主要内容	22

参考文献	23
------------	----

第一篇 过程系统的稳态模拟分析

第二章 化工过程系统稳态模拟的概念和实质	24
第一节 反应-分离简单再循环系统的稳态模拟	24
1. 原始数据及假设	25
2. 要求的解答	26
3. 单元模块的数学模型	27
第二节 模拟问题的实质	30
1. 过程各流股的本质	31
2. 处理物料的本质	32
3. 过程单元的本质	33
4. 过程构型	34
5. 进料流股	34
第三节 序贯模块法	36
第四节 联立方程法	38
第五节 联立模块法	40
参考文献	44
第三章 非线性代数方程组的数值解法	45
第一节 非线性方程的一般解法	45
1. 数值迭代求解法的实质	46
2. 解的存在及唯一性	48
第二节 直接迭代法	52
第三节 牛顿-拉卜森迭代法	57
1. 一维情况	57
2. 多维情况	58
第四节 割线法	61
1. 一维情况	61
2. 多维情况	62
第五节 拟牛顿法	66
1. 割线法	66
2. 其它方法	69

第六节 各种方法的比较	69
参考文献	71
第四章 物性系统	73
第一节 物性系统的作用与结构	73
1. 两类物性系统	73
2. 物性系统的建立	74
3. 物性系统的结构	77
第二节 主要物性的估求方法	79
1. 状态方程式	79
2. 热焓的计算	86
3. 熵的计算	90
4. 蒸汽压的计算	91
第三节 汽-液平衡计算	92
1. 两种汽-液平衡的计算途径	92
2. 气相逸度系数 ϕ_i^v 的计算	94
3. 液体纯组分的逸度 $f_i^{\circ L}$ 的计算	95
4. 液体活度系数的计算	96
第四节 计算机物性系统的评述	107
参考文献	109
第五章 单元操作模型	111
第一节 自由度分析的概念	111
1. 自由度	111
2. 独立衡算方程	113
3. 独立流股变量	114
第二节 单元操作模型的类型及自由度分析	118
1. 混合器	120
2. 流股分割器	121
3. 闪蒸器	122
4. 压力变化器械	123
5. 换热器	124
6. 反应器	125
第三节 平衡闪蒸器模型	126

1. 闪蒸器的基本模型	127
2. 多组分等温闪蒸器模型	128
3. 绝热闪蒸器模型	133
4. 闪蒸器的双层法迭代模型	134
第四节 多组分混合物分离塔模型	143
1. 组分分割器	144
2. 多组分精馏塔的简化经验模型	145
3. 严格逐板计算模型	147
第五节 化学反应器模型	152
1. 独立化学反应	152
2. 最大反应程度	162
3. 气相平衡反应器模型	163
4. 同时达到相平衡和化学反应平衡的反应器模型	169
参考文献	173
第六章 稳态流程模拟的序贯模块法	175
第一节 系统的分隔和排序	175
1. 系统分隔的基本概念	175
2. 分隔的计算方法	178
3. 分隔的图解方法	185
第二节 断裂	191
1. 断裂的基本概念	191
2. 最优断裂准则	193
第三节 断裂流股的加速收敛	200
1. 断裂流股的收敛性质	200
2. 直接迭代法	202
3. Wegstein法	204
4. Broyden方法	211
5. 几种加速收敛方法的比较	216
第四节 控制模块	218
参考文献	223
第七章 稳态流程模拟的联立方程解法	225
第一节 联立方程法的基本特点	225
第二节 流程模拟中的自由度	228

第三节 决策变量的选择	230
1. 单元设备的决策变量	230
2. 决策变量选择对流程解算的影响	232
3. 流程模拟的决策变量选择	234
第四节 稀疏代数方程组的解法	245
1. 稀疏性概念	245
2. 高斯消元法	246
3. 矩阵的因式分解法	249
4. 稀疏方程组的处理方法	254
第五节 非线性物料衡算方程组的解法	260
参考文献	268

第二篇 最优化方法

第八章 导论	270
第一节 最优化问题的数学定义	271
1. 定义	271
2. 最优化问题的基本要素	272
3. 几个基本数学概念	273
第二节 最优化问题的类型	277
1. 稳态过程设计的最优化	277
2. 动态最优化	278
3. 化工厂的管理与控制	280
4. 非线性回归和参数估值问题	285
5. 非线性代数方程组求解	286
第三节 最优化方法的分类	287
1. 无约束最优化及受约束的最优化	287
2. 单维最优化和多维最优化	287
3. 间接优化方法和直接搜索方法	288
4. 线性规划和非线性规划	288
5. 连续规划, 整数规划和混合规划	288
第四节 经典的最优化方法	289
1. 无约束最优化的经典方法	289

2. 受约束最优化的经典方法	293
参考文献	297
第九章 无约束条件的最优化方法	299
第一节 单参数最优化方法	299
1. 直接法 (搜索区间消去法)	299
2. 近似法	302
第二节 多参数最优化方法	307
1. 列表法	308
2. 沿方向矢量的搜索方法	308
3. 模式法	319
参考文献	322
第十章 约束条件下的最优化方法	323
第一节 约束条件下最优化问题的一般特点	323
1. 约束最优化的概念	323
2. 消去等式约束条件的一般化方法	324
3. 消去不等式约束条件的方法	326
第二节 罚函数法	330
1. 罚函数法的原理	330
2. 序贯无约束最小化方法 (SUMT法)	333
第三节 简约梯度法	335
1. 基本原理	335
2. 通用简约梯度法 (GRG法)	339
第四节 复合形法	345
1. 初始复合形的生成	345
2. 搜索迭代步骤	346
第五节 线性规划法	348
1. 典型的线性规划	348
2. 线性规划的基本概念	350
3. 单纯形法解线性规划问题	353
第六节 整数规划法	360
1. 整数规划模型的建立	361
2. 分支界限法	363
参考文献	367

第十一章 化工系统的最优化策略	368
第一节 概论	368
1. 基本概念	368
2. 几种策略方法的评述	371
第二节 单元模块逼近法	378
1. 一般数学表达式	378
2. 三种近似方法	381
第三节 双层法最优化策略	383
1. 双层法的本质	383
2. 双层法解合成氨回路最优化的实例	385
参考文献	387

第三篇 过程系统的综合

第十二章 过程系统综合导论	389
第一节 基本概念	389
1. 过程系统综合的实质	389
2. 综合的步骤	390
第二节 系统综合研究的几个主要领域	393
1. 反应路径的综合	393
2. 分离序列的综合	398
3. 换热网络的综合	400
4. 具有热集成的分离系统综合	402
5. 反应器网络的综合	404
6. 全流程综合	405
第三节 系统综合的基本方法	406
1. 系统综合中的三个问题	406
2. 系统综合的基本方法	407
3. 灵敏度分析的概念	409
参考文献	410
第十三章 无初始方案的系统综合方法	412
第一节 直观推断法	412
1. 分离系统综合的直观推断法	412

2. 有序直观推断法	421
3. 利用“禁用分割”合成分离流程	424
4. 换热网络综合中的直观推断法	426
第二节 分支界限法	433
1. 分支界限法原理	483
2. 换热器网络的综合	484
第三节 系统综合中的分解法	447
参考文献	481
第十四章 有初始方案的系统综合方法	452
第一节 调优方法	452
1. 判别准则	452
2. 调优规则	456
第二节 结构参数法	464
1. 结构参数法解分离序列问题	464
2. 系统综合的解析算法	466
第三节 一个全流程综合的计算例题	480
1. 过程描述	480
2. 流程方案研究的策略	482
3. ASPEN模拟程序的特点	485
4. 在有限的过程流程方案中调优搜索	487
参考文献	491
第十五章 系统综合中的热力学分析方法	493
第一节 热力学分析的动因	493
第二节 热力学第二定律分析的理论基础	496
1. 有效能分析的概念	496
2. 损耗功分析的概念	500
3. 两种分析方法的比较	502
4. 热力学效率	503
第三节 减少损耗功的一些直观推断方法	505
1. 减少机械过程损耗功的方法	506
2. 减少传热过程损耗功的方法	507
3. 减少传质过程损耗功的方法	510
4. 减少化学反应过程损耗功的方法	511

5. 热力学分析中的几点注意	512
第四节 全流程综合的热力学分析方法	516
1. 一般综合步骤	516
2. 过程描述和定义	516
3. 过程的ASPEN模拟	518
4. 过程的热力学分析及改进	521
第五节 反应路线综合中的热力学分析方法	527
1. 反应路线的热力学评价	527
2. 石油化工反应路线的选择	529
参考文献	530
第十六章 能量回收网络的综合	532
第一节 TH图与组合曲线	532
第二节 挟点及最小公用工程消耗	534
第三节 最大能量回收网络的设计	538
1. 在挟点处的系统分解	538
2. 挟点之上子系统设计	539
3. 挟点之下子系统设计	540
4. 节能与投资的权衡	542
5. 流股的分支	545
第四节 能量回收网络中热与功的集成	549
1. 热机与热泵原理	549
2. 热机对挟点的位置	551
3. 提高热效率的极限工况	552
4. 热泵对挟点的位置	554
5. 实际应用举例	556
参考文献	557

第一章 概 论

系统工程方法在化工中的应用促进了化工系统工程学的诞生与发展，而其核心内容是系统的模拟、分析、综合和优化等技术。在学习各项具体的方法技术之前，首先应对化工系统工程的学科发展史、系统模拟的基本概念、系统分析与合成的一般方法、数学模拟方法的优越性及限制等等基本概念有一个总括的了解。

第一节 化工系统工程学的沿革和领域

1. 化工系统工程学的起源

人们对化工类型生产过程的认识在不断深化，从20年代至今已发生三次认识上的飞跃：第一次飞跃发生在20年代，从各种各样化学工艺中找出了组成它们的共同的基本单元，抽象出“单元操作”的概念，从而奠定了化学工程的基础；第二次飞跃是在50年代，从单元操作中又进一步归纳出其中共同的基本规律，进而提出了“传递过程”的概念。这两次认识上的飞跃均属于解析方向的认识深化。50年代以后，科学朝着综合化方向发展的趋势愈来愈明显，一些新兴的综合性或横断性学科陆续出现。反映在化工方面的第三次飞跃，是将各种单元操作所组成的化工系统作为一个整体，用系统工程方法进行“系统的模拟与分析”，研究其整体特性，例如系统的最优化设计或最优化操作等。这一飞跃是认识朝综合方向的深化。然而这种综合方向的深化除了要靠化学工程学本身的知识外，还要依靠其它学科的发展。

在第二次世界大战中，英国和美国开始应用运筹学方法调度军事及后勤支援，使效率大为提高。二次大战后，这种方法又普遍应用于各种工业部门，当然也包括化工部门。

在40年代美国贝尔电话公司研究所在研制大规模通讯网络时，

已深感有发展新的系统工程方法的必要，但苦于缺乏分析大规模系统的手段，50年代电子计算机的发展及运筹学方法的应用，才使得系统工程作为一门新的学科分枝而正式建立起来。1950年美国麻省理工学院在设计中继系统中就发展了系统方法，1954年正式开设了系统工程课程，1957年出版了第一本“系统工程”书^[1]。

与此同时，控制论作为一门研究感受、存储、传送和加工以控制为目的的信息的各种系统的学问，二次大战后也迅速发展并且运用于化工过程的控制。开始只能以局部装置的压力，温度的自动控制为对象，逐步发展到研究如何使工厂整体的操作运行费用为最低的最优化控制。这就必然要求把整个工厂当作一个系统来研究。换句话说，也就是从过程控制的角度，运用系统工程方法来研究整体控制性能，以及如何达到最优化。

计算技术是另一门相关的学科，因为系统工程以组成单元的数目庞大及相互联系的复杂为特点，要解算这种问题就必须运用电子计算机，而化工系统问题更有高度非线性特点，出现了许多稀疏矩阵、刚性常微分方程组、偏微分方程组问题。这些问题的顺利解决与计算技术密切相关。

如果说上述邻近学科的发展为本学科的产生提供了可能性的话，那么生产发展的需要为这门新学科分支的诞生指出了必要性。这种生产背景是：

(1) 现代化的化工企业朝着综合化方向发展，流程结构日益复杂。为了原料的有效利用，采用再循环方式；为了副产品有效利用，采用联合企业的方式；形成了“大厂套小厂，厂厂通管道”的局面。这种综合企业的合理计划 and 设计，就不能把单个装置或车间孤立起来考虑，而必须当成整体系统来研究。

(2) 装置规模日趋大型化。对设计的要求更高了，因为是否最优化，不仅投资相差可观，而且使将来生产操作费和成本费的出入也很大。因此，要求整体合理化设计，以便将来可以便于实现最优化控制。

(3) 产品的新品种迅速发展与工业放大技术落后间的矛盾尖

锐化 这样就要求把过去的相似模拟、逐级放大的方法改为用数学模拟方法来指导放大和设计。

(4) 现代化的化工类型生产, 设备内部过程速度加快。此外, 由于能源危机, 为了节能, 装置的积成度大为提高, 设备的操作条件也愈来愈苛刻。这一切都对过程自动化控制提出了更高的要求。过去只对个别回路进行PID调节的方法不能适应, 必须把整个控制对象当做一个整体来进行研究, 采用电子计算机根据数学模型, 进行系统优化控制。

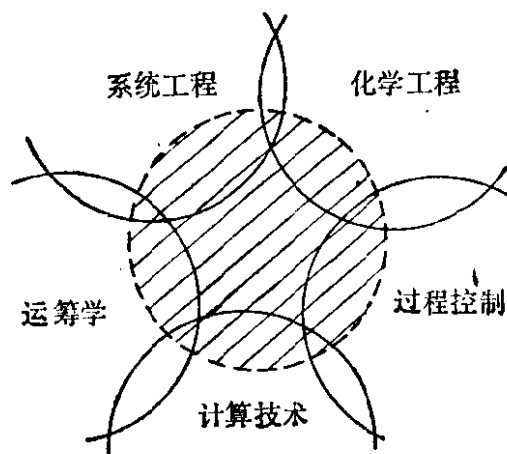


图 1-1 化工系统工程与各学科关系

这些生产发展的需要产生强大的动力, 在化学工程学、运筹学、控制论和计算技术等学科的边缘产生了这门新的学科, 如图1-1所示。

这门学科在六十年代初步形成, 但在不同的国家, 由于先驱者来自不同的学科领域, 因而强调和侧重部分也不同, 甚至名称也各异。在美国有“化工系统的模拟与分析”(Process System Simulation and Analysis)^[2,6,7], 在日本有“过程系统工程学”(プロセスシステム工学)^[4,5,8], 在苏联则视为化学与控制论之间的边缘学科, 称之为“化学控制论”(Химическая Кибернетика)^[3], 在欧洲则有“系统工程在化工中应用”^[10,11]。

2. 化工系统工程学的定义及领域^[12,13,14]

化工生产系统是将原料进行物理-化学的加工处理, 使之性质发生变化, 从而由低价值的原料得到高价值的产品。为了完成这样一个生产目的, 往往需要由许多车间组成一个工厂, 乃至数个工厂组合成一个公司来进行这种工作。从系统工程学角度来看, 也就是由许多“次级系统”组合而成高级系统。如图1-2所示, 工厂对于公司而言是“次级系统”, 但公司又是社会的次级系统, 因为社会