

化工继续工程教育系列教材

化工过程分析与模拟

中国化工学会教育工作委员会组织编写

房德中 朱建业 编著



化学工业出版社

化工继续工程教育系列教材

化工过程分析与模拟

中国化工学会教育工作委员会组织编写

房德中 朱建业 编著

化学工业出版社

内 容 提 要

本书比较系统的叙述化工过程分析与模拟的基本原理、方法。其内容包括化学工程中常用的单元操作（反应器、换热器、分离器、混合器等）数学模型建立的方法、数学模型的解算法，以及有关计算机模拟程序。书中还着重介绍了大系统稳态模拟方法，其中包括大系统的序贯模块法和联立模块法的求解方法，以及应用实例。

本书还对求解大系统的“分解”，以及环路的“断裂”作了详细的论述。

本书1~7章由房德中编写，第8章由朱建业编写。

本书是为化工工程师继续教育而编写的，也可作为理工科大学化工类高年级学生教材。

化工继续工程教育系列教材

化工过程分析与模拟

中国化工学会教育工作委员会组织编写

房德中 朱建业 编著

责任编辑：陈 丽

封面设计 郑小红

*

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

巨各庄装订厂装订

新华书店北京发行所经销

*

开本 $787 \times 1092^{1/32}$ 印张 $13^{3/8}$ 字数306千字

1991年9月第1版 1991年9月北京第1次印刷

印数 1—2,250

ISBN 7-5025-0902-X/TQ·526

定 价 9.15元

前 言

《化工继续工程教育系列教材》是由中国化学工业部、中国石油化工总公司、中国化工学会共同组织国内教授、专家编写的。供化学工程技术人员大学后继续教育使用，也可以做为科技参考用书。

继续工程教育是当代科学技术迅速发展的产物，是对在职科技人员进行深化、补充和更新知识并不断提高创造能力的教育，也是他们接受新理论、新技术、新方法的重要途径。继续工程教育已成为跟踪世界新技术和高技术发展水平，提高科技人员素质，使知识转化为技术形成生产力，从而推动化学工业发展的强大动力。

大学后继续教育是学校教育的延伸、补充和扩展，具有教学要求定向性、教学对象复杂性、教学结构层次性和教学方式开放性诸多特点。因此，本系列教材包括以下四种类型内容：

一、概述型课程。这类教材力求开阔科技人员的视野，了解本学科发展现状与趋势，以便根据需要选择学习内容，同时起到触类旁通的作用。现已出版《化学工程(一)》、《化学工程(一)辅导材料》、《化学工程(二)》三本书，内容为化工热力学、反应工程、分离工程、系统工程、化工技术开发及其管理以及技术经济评价等的概括。我们认为化学工程技术人员对这些知识应有全貌的了解，然后根据工作需要，深入学习所需课程。因而，这几本书突出了“先进、概括、引路”的特色。

二、提高型课程。这类教材着重提高化学工程技术人员的

42008

知识水平，较系统地介绍基本原理、基本知识和应用思路。经过办班实践，即将出版《化工热力学》、《化学反应工程基本原理》、《化工过程分析与模拟》、《多级分离过程——蒸馏、吸收、萃取、吸附》等四本书，努力体现先进性、针对性、实用性和自学性。

三、扩展型课程。化学工程技术人员不仅要掌握本学科的知识，还需要了解和运用相近学科的知识，才能综合解决工程实际问题，比如化工自动化、化工设备、腐蚀与防护、化工技术经济等等。我们正在开发这类课程，将陆续出版。

四、技术专题课程。这类课程侧重于化工过程的开发放大，以掌握化工过程开发方法，培养化学工程技术人员的技术开发能力。比如化工节能原理与技术、化工过程优化方法等。这类课程正在开发之中。

以上是我们组织编写这套教材的构思。考虑到化工行业复杂，学习要求不一的具体情况，在组织继续教育或安排自学时，应采取多种层次、多种方式、灵活选择、联系实际的原则适当组配，使本系列教材具有较强的适应性。

由于我们对组织编写化工继续教育系列教材缺乏经验，殷切希望读者提出宝贵意见，不断改进，为提高化学工程技术人员素质做出贡献。

中国化工学会教育工作委员会

一九九〇年三月

序

化工系统工程是一门新兴学科。随着化工生产向着综合化、复杂化、大型化的发展，要求人们不能只沿用传统的化学工程方法去研究、处理化学工程中的各类问题。化工系统工程的方法正是在这样背景下发展起来的。计算机技术的发展、电子计算机的出现为研究化工大系统创造了物质基础。

化工过程分析与模拟是化工系统工程的一个重要组成部分。

该书是一本化工过程分析与模拟的入门书，作者在编写时力求由浅入深，结合实际，所以实用性较强。全书共分八章。通过第一章、第二章使读者对化工过程分析与模拟发展背景、化工系统特点、化工过程稳态模拟实质有一个比较初步了解。在第三章中主要介绍化工系统模拟中常用的计算方法，这里主要着重于这些方法的应用。在第四章、第五章中介绍化学工程中常用的单元操作数学模型，其中包括动态模型和稳态模型。在第六章、第八章中通过两个大的实例，叙述化工过程分析与模拟的稳态求解的序贯模块法和联立模块法。在第七章中主要叙述化工大系统的分解，其中主要介绍大系统环路的识别和环路的断裂。

本书是奉中国化工学会指示，作者根据多年的教学、科研实践编写的，很适用于掌握有化学工程、计算机技术等基本知识的读者阅读、参考。

本书原稿承蒙清华大学李天铎教授、佟宏伟老师审阅，特

此致谢。

由于编者水平有限，错误之处在所难免，热忱欢迎读者批评指正。

编者 一九八九年

目 录

序

第一章 概论	1
1-1 系统的概念与化工系统工程	1
一、系统的概念	1
二、系统的形态	3
三、系统工程的方法论	4
四、系统工程发展背景	6
1-2 化工系统工程的任务及其主要内容	8
一、过程系统分析	8
二、过程系统综合	9
三、过程最优控制	12
1-3 化工系统工程中常用的术语	12
1-4 化工系统的数学模型	14
一、数学模型	14
二、建立数学模型的要求和规则	14
三、数学模型分类方法	17
1-5 化工系统的数学模拟	19
1-6 数学模拟的优越性	22
1-7 过程系统分析与模拟基本任务	22
第二章 化工过程稳态模拟剖析	24
2-1 氨合成工艺流程物料平衡模拟	25
2-2 稳态流程模拟的一般实质	33
2-3 稳态模拟的数学模型解算法	36
第三章 过程分析与模拟中常用数学方法	44

3-1	矩阵的基本知识	44
一、	矩阵	44
二、	矩阵的运算	48
三、	转置矩阵, 矩阵行列式	51
四、	逆矩阵	52
3-2	代数方程数值解法	53
一、	直接迭代法	53
二、	部分迭代法	60
三、	威斯坦法(Wegstein法)	62
四、	牛顿-拉夫森(Newton-Raphson)法	65
五、	高阶隐式系统	70
六、	任意函数内插子程序	73
3-3	微分方程的数值解法	77
一、	一阶常微分方程的一般形式	77
二、	常微分方程数值解法	79
3-4	非线性代数方程组的解法	93
一、	非线性方程组的一般形式及讨论	94
二、	非线性方程组的几种常用的解法	102
第四章	基础模型	141
4-1	连续流动体系	141
一、	带有出口阀门连续流动体系模型	141
二、	带有进、出口阀门连续流动体系模型	142
三、	容器上方有气体被压缩情况	145
4-2	质量传递和能量传递同时存在的连续流动体系	154
一、	有外蒸汽夹套搅拌釜	154
二、	容器内有沸腾时流动体系	156
4-3	多组分汽-液平衡模拟系统	163
一、	物流数组和数据数组	163
二、	液相焓子程序和汽相焓子程序	165
三、	求温度子程序	168

四、汽-液平衡	169
五、求露点温度	177
六、通用相变换	178
七、闪蒸气程序	180
八、蒸发操作子程序	185
九、部分冷凝子程序	187
第五章 稳态过程单元操作模型	191
5-1 单元操作模型分类	191
5-2 物理器械数学模拟	193
一、流股混合器	193
二、流股分割器SPL	201
三、蒸馏塔	203
四、分离器的物料平衡模型	204
五、换热器的模拟	207
六、废热锅炉的模拟	223
5-3 化学反应器械数学模拟	225
第六章 稳态流程模拟的序贯模块法应用实例	240
6-1 CO加压变换装置流程简介	240
6-2 CO加压变换装置流程模拟系统	242
一、模拟系统全貌	242
二、模拟系统的构成和主要模块介绍	249
三、使用说明	273
第七章 化工系统分析	279
7-1 系统分析的图论基础	279
一、信号流图的基本概念和性质	280
二、广义信号流图	292
7-2 信号流图在系统分析中应用	295
7-3 化工大规模系统的分解	311
一、系统结构的表示方法	312
二、化工大系统的分解方法	321

三、不相关子系统的识别	338
四、子系统的切割（裂解）	341
第八章 稳态流程模拟的联立模块法	369
8-1 建立线性简单模型	370
8-2 建立非线性简单模型	382
8-3 计算流程水平方程组的Jacobian矩阵，求解	
流程水平方程组	387
参考文献	395
附录一 CO变换装置流程模拟系统	396
附录二 CO变换装置流程模拟结果示例	410

第一章 概 论

“化工系统工程”作为现代化学工程的一个组成部分是近年发展起来的一门科学。将系统工程的方法应用于化工过程，即称为化工系统工程。“化工过程分析与模拟”是化工系统工程的重要组成部分。

1-1 系统的概念与化工系统工程

一、系统的概念

“系统”这一概念，来源于人类的长期社会实践，但由于受到早年科学技术发展水平的限制，一直没有受到应有的重视。美国直到二十世纪四十年代才开始在工程设计中应用系统这一概念，到了五十年代以后才把系统的这一概念逐步明确化、具体化；并在工程技术系统的研究和管理中广泛应用。这是对科学技术史方面形而上学观点的一个重大变革。

传统的分析方法，往往把一个事物分解成许多独立的部分，把问题分得很细，然后分别进行深入研究。由于这样的研究方法往往容易把事物看成是孤立的、静止的，因此得出的结论是往往限制在一个局部的条件下，如果扩大到更大的范围来考察，那么整体的结论就可能是片面的，甚至是错误的。

系统工程学认为，把所研究的对象当作一个整体来研究，也即把一个研究的对象看作一个系统，从系统整体出发去研究系统内部各组成之间的有机联系和系统外部环境的相互关系。这个就是综合研究的方法，即是系统工程研究的方法。

目前，人们对系统工程的理解不尽相同，有的人强调的是对复杂系统进行有效的最优管理和最优控制，因而就认为系统工程是现代管理科学，有的人着眼于工程设计和改造，因而认为系统工程是探求未知系统的优化综合技术。尽管人们对系统工程的理解因侧重面不同而有所差异，但从系统工程的基本思想来看，它的核心思想是“系统”的概念。因此，系统工程是处理系统的“工程技术”。

对“系统”的概念一些学者曾作过如下说明：

“系统”是具有特定功能的、相互间具有有机联系的许多要素所构成的一个整体。

在日本的JIS工业标准中，“系统”被定义为：“许多组成保持有机的秩序，向同一目的行动的组合”。

美国著名学者L. V. 贝塔朗菲把“系统”定义为“相互作用的诸要素的综合体”。

美国学者阿柯夫教授认为：“系统”是由两个或两个以上相互联系的任何种类的要素所构成的集合。因此，系统不是一个不可分解的要素，而是一个可以分成许多部分的整体。关于系统的概念，可归纳如下几点：

1. 在整体中每一个要素的性质或行为，将影响到整体的性质或行为。例如，在工厂这个系统的整体内，每一个车间或每一个设备的性质或行为将会影响工厂这个整体的性质或行为；

2. 每一个要素的性质或行为，以及它影响整体的途径依赖于其它一个或几个要素的性质或行为。因此，没有一个要素是独立地影响整体的，同时，每一个要素至少被其它一个要素所影响；

3. 每一个要素对于整体都不具有独立的影响，所以整体

不能分解成独立的要素，一个系统不能分解成独立的子系统。

因此，一个形成系统的诸要素的集合永远具有一定的特性，或者表现一定的行为，而这些特性或行为不是它的任何一个部分所能具有的。

一个系统是一个可以分成许多要素所构成的整体，但从系统工程的观点来看，它又是一个不可分的整体，因为把系统分开，那么它将失去其原来的性质。

在物质世界中，一个系统中的任何部分可以被看成为一个系统，而每一个系统又可被看成为一个大规模系统的一个部分。这是一种对事物的综合分析方法。

二、系统的形态

在自然界中存在着各种各样系统，例如，太阳系是由某些行星和卫星等组成的。在人类社会生活中存在着生产系统（生产工艺流程）、消费系统（商业系统）、交通管理系统等等。为了研究系统，必须对系统存在的各种形态进行研究。系统形态可分为：

1. 自然系统与人造系统

自然系统，就是说它的组成部分是自然的，不是人为的，例如海洋系统、气象系统、生态系统等。

人造系统，是由人工造成的各种要素所组成的系统，例如人工制造的各种设备所构成的各种系统，以及各种经济系统、科学技术系统、交通系统等。

值得一提的是有些系统是由自然系统与人造系统组合成的复合系统。

2. 实体系统和概念系统

凡是以矿物、机械设备、能量和人等实体为构成要素组成的系统都是实体系统，例如工厂的工艺流程就是实体系统。凡

是由概念、原理、原则、方法、制度等非物质实体所构成的系统称概念系统，例如科学技术系统、管理系统、教育系统等。

但是，在实际生活中，大多数情况下实体系统和概念系统是结合的，实体系统是概念系统的基础，而概念系统为实体系统提供指导和充实作用。

3. 动态系统和稳态系统

动态系统就是系统的状态变量是时间的函数，即系统的状态变量随时间变化。反之，稳态系统的状态变量不是时间的函数，即在描述稳态系统的数学模型中不含有时间因素，它是动态系统的一个某种极限状态——稳定状态。

4. 控制系统和行为系统

控制就是为了一定的目的给对象系统附加某种必要的动作。也就是说控制系统的任务是控制对象系统某些物理量按照指定规律变化。因此为了进行控制而构成的系统叫做控制系统。

行为系统是以完成目的的行为作为构成要素而形成的系统。这里的行为是为了达到某种目的而执行某特定功能的一种作用。

三、系统工程的方法论

系统工程是研究大系统的科学，它是应用数学方法和电子计算机重要手段，对系统构成的要素、组织结构，信息交换和反馈控制等功能进行分析、设计服务，从而达到最优设计、最优控制和最优管理目标以实现系统的综合最优化。

系统工程具有自己特点的方法论，它的基础是运用各种数学方法、计算机技术和控制理论来实现系统的模型化和最优化，并进行系统分析和系统设计。

系统工程方法论的特点可归纳如下几点：

1. 研究方法上的整体性

系统是由若干个要素结合成的具有特定功能的总体。构成系统的要素虽然各自具有不同的性能，但它们都是为了完成系统的总的目标而完成各自的功能。因此系统工程把研究的对象看作一个系统整体，同时，把研究过程也看作一个整体。这个过程即是对象系统的整个物理过程。

2. 研究方法上的相关性

构成系统的各要素之间是有机联系的、有相互作用的，即是说它们之间存在着某种依赖的特定关系。通常人们把系统作为若干个子系统（要素）有机结合成的整体设计来考虑，任何一个子系统都影响它相关的子系统。

3. 研究方法上的等级性

现代化工企业（联合企业或大工厂）作为一个大系统，是由许多相互联系的子系统构成的。子系统间有着相互依赖、相互从属关系，以化工企业为例，任何化工生产都是连贯的三种基本操作：原料准备，化学变化本身和目标产品分离。化工企业等级结构中的最低

等级是由一定设备结构中的典型化工过程

（机械过程，流体力学过程，传热过程，扩散过程和化学反应过程等）以及控制这些过程的局部系统构成的。

每个典型过程

或相互有关的典型过程的组合，可以看作具有某种输入和输出的一个系统或子系统（图1-1）。

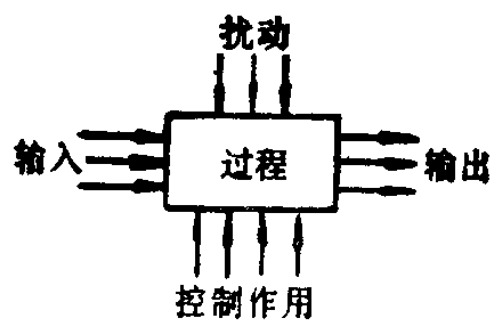


图 1-1 系统最简单的结构

生产车间和车间自动控制系统是化工企业的第二等级。车间是互相有联系的各典型工艺过程和设备的组合。

化工企业等级结构的最高级，即第三级（图 1-2）是车间组合运行管理系统，生产、原料储备、计划和成品销售的组织系统。

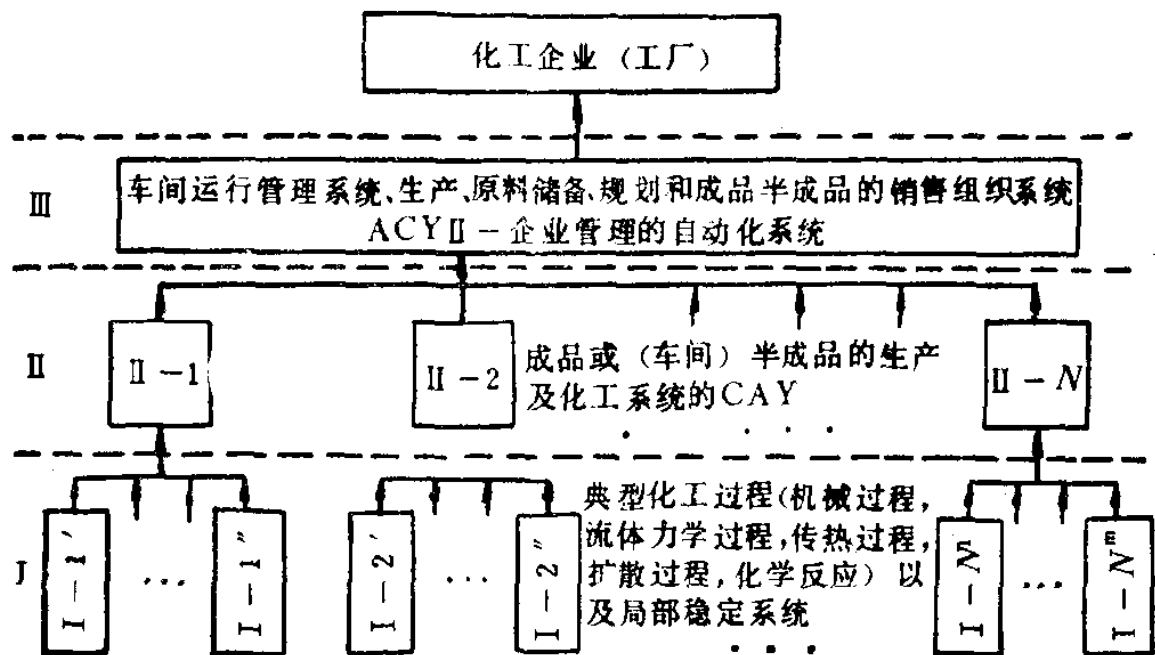


图 1-2 化工生产的等级

四、系统工程发展背景

社会实践的需要是科学技术发展的动因。作为系统工程学科的形成是在本世纪五十年代。

1. 本世纪四十年代开始，美国等国家为完成规模巨大的复杂工程和科研生产任务，开始运用系统观点和方法处理问题。社会实践的结果为系统工程的理论体系形成创造了条件，四十年代末期出现了控制论，以及自动控制技术无论在深度或广度上都得到了很大的发展。人们对研究系统的重要性逐步加深了认识，产生了大系统理论。

2. 由于军事上的需要，陆军、海军和空军多兵种联合作