

魏寿彭 编著

石 油 化 工 生产过程最优化

SHIYOU HUAGONG
SHENGCHAN
GUOCHENG
ZUI YOUHUA



中国石化出版社

51.7

石油化工生产过程最优化

魏寿彭 编著



(京)新登字048号

内 容 提 要

本书通过62个应用实例,介绍了化工、石油化工生产过程的建模、模拟与优化方法,同时又介绍了化工、石油化工生产装置的高线调优方法与实例。

本书的读者对象为从事化工和石油化工生产、设计、研究、过程开发、计算机应用、企业管理等方面的工程技术人员和领导干部,以及化工类大专院校的师生。

石油化工生产过程最优化

魏寿彭 编著

中国石化出版社出版发行

(北京朝阳区太阳宫路甲1号 邮政编码:100029)

海丰印刷厂排版印刷

新华书店北京发行所经销

787×1092毫米 32开本 12¹/₄印张 275千字 印1—3000

1994年5月北京第1版 1994年5月北京第1次印刷

ISBN 7-80043-460-8/TQ 264 定价:10.50元

前 言

本书作者从1979年开始,先后为本科生和研究生讲授《化工系统工程》课。这是一门知识广泛的课程,涉及了诸如化学、化学工艺、化学工程、系统工程、化工应用数学、计算机化工应用软件等学科,是一门知识交叉应用的课程。作者在授课过程中搜集了大量的中、英、俄、日文有关文献和参考资料,并将其中具有较重要参考价值的部分编入授课讲义中。

与此同时,在已故的原石油部副部长张定一的倡导下,在中国石油化工总公司和化工部有关领导与职能部门的组织领导下,特别是在中石化总公司侯芙生总工程师和生产部秦瑞岐副总工程师的关心、支持与帮助下,作者先后为化工、石油化工部门的领导干部和工程技术人员举办了30多期各类培训班,为他们讲授了《化工系统工程》、《化工应用数学》、《计算机在化工中的应用》、《石油化工生产过程最优化》等课程。在此期间,作者及其助手、研究生们与中国石油化工总公司、化工部所属企业中的工程技术人员合作开展了化工、石油化工生产装置的离线调优工作。在已完成并通过鉴定或技术验收的离线调优共有6套生产装置,可使企业每年新增效益1754万元。作者提出的“装置模拟与优化”调优法(即PSO法)已被列入国家“八五”期间重点推广新技术《化工过程调优技术》中。国家人事部和化学工业部还联合举办了《化工生产过程调优技术》高级研修班以推广此技

术。本书就是在这种情况下完成的。

本书的主要目的在于帮助具有大专文化水平的化工、石油化工部门工程技术人员，在自学或参加短期培训班的基础上，较快地掌握石油化工生产过程最优化的基本原理与方法。本书通过62个实例，深入浅出、通俗易懂地向读者介绍了石油化工生产过程数学模型的分类与建立方法、计算机应用程序的编写与使用方法、对真实生产过程进行模拟与优化的方法，以及对生产装置实施离线调优的方法。鉴于应用实例的作用是帮助读者尽快掌握建模、模拟与优化方法，所使用的单位不影响对方法的掌握，为便于阅读，某些实例保留了国外文献中仍沿用的英制单位。出自同样目的，书中只给出了有助于读者自学和深入研究时将会用到的最重要的中外文专著，其它参考文献未列入。为了使初学者能够尽快掌握计算机应用软件，本书的全部程序均用BASIC语言编写，并作了必要的说明和解释，且全部在袖珍式PC-1500计算机上运算通过。初学者只要初步掌握BASIC语言和PC-1500机的使用方法，就可按照书中介绍的实例，快速掌握一些实用价值较高的计算方法与程序。本书可为独立开展石油化工生产过程最优化研究，和进行化工、石油化工生产装置的离线调优工作打下初步基础。

本书可作为化工类大专院校师生教学参考用书。书中列出的62个应用实例，不仅有助于理论联系实际，加深对所学化工类课程的理解，而且有助于各类课程的交叉学习与应用，特别是为数学与计算机课程的教学提供了丰富的实例。

鉴于作者的水平与能力有限，书中的错误和不妥之处在所难免，敬请广大读者批评指正。

目 录

第一章 导论	1
第一节 化学工业与化学工程	1
一、化学工业的发展与化学工程	1
二、化学工程的形成与发展	4
第二节 化学工程与化工系统工程	7
一、今日化学工程	7
二、今日系统工程	10
三、今日化工系统工程	15
第三节 化工系统工程与石油化工生产过程最优化	19
第二章 石油化工生产过程的建模	22
第一节 石油化工生产过程的数学模型	22
第二节 石油化工生产过程的机理模型	31
一、用代数方程表示的机理模型	31
二、用微分方程表示的机理模型	35
三、用差分 and 差分-微分方程表示的机理模型	61
第三节 石油化工生产过程的经验模型与 半经验半理论模型	76
一、回归分析与经验模型的建立	76
二、石油化工数据的插值与平滑	142
第三章 石油化工生产过程的数学模拟与化工流程模拟系统	162
第一节 石油化工生产过程的数学模拟	162
一、装置能耗标定方法与程序	163
二、工艺加热炉标定方法与程序	166
三、冷换设备的快速模拟计算	173

四、生产计划的编制	184
五、空分装置的物料衡算	192
六、蒸气压的计算	195
七、平衡汽化率的计算	200
八、多组分分馏塔的简捷计算	201
九、简单化学反应过程的数学模拟	209
第二节 化工艺流程模拟系统	218
第四章 石油化工生产过程优化	224
第一节 石油化工生产过程优化方法及应用实例	233
一、求解简单优化问题的解析解法	235
二、求解简单优化问题的数值解法	248
三、线性规划及其应用实例	260
四、非线性规划及其应用实例	271
五、几何规划及其应用实例	293
六、动态规划法及其应用实例	298
七、极小值原理及其应用实例	304
第二节 石油化工生产过程的离线调优	313
一、离线调优的一般原理与方法	313
二、对二甲苯、对甲基苯甲酸甲酯合并氧化装置的生产调优(实例1)	324
三、环己醇、环己酮硝酸氧化装置的生产调优(实例2)	339
四、IV型催化裂化生产过程模拟与优化(实例3)	346
第五章 石油化工生产过程优化前景展望	353
第一节 人工智能在石油化工生产过程优化中的应用	354
一、专家系统及其在石油化工生产过程优化中的应用	354
二、人工神经网络及其在石油化工生产过程优化中的应用	364
第二节 从石油化工生产过程优化到石油化工企业管理控制一体化	369

一、从石油化工生产过程的离线调优到在线	
闭环优化控制.....	369
二、从优化控制到管理控制一体化.....	373
例题索引.....	377
参考文献.....	380

第一章 导 论

第一节 化学工业与化学工程

一、化学工业的发展与化学工程

众所周知，化学工业是用化学变化的方法将生产原料转化成产品的工业。

近代化学工业始于18世纪初的法国，后来传入了英国。18世纪中叶，英国在伯明翰建立了世界上第一个铅室法制硫酸的工厂，稍后，法国则在巴黎附近建成了世界上第一个用吕布兰法制碱的工厂，奠定了今日无机化工产品生产的基础。

19世纪初，德国开始发展以煤为原料的有机化学工业，到了19世纪下半叶，已能从煤焦油中提取芳烃，促进了医药、农药、染料工业的发展。

19世纪上半叶，俄国建立了世界上第一座炼油厂。19世纪下半叶，汽车发动机和柴油发动机相继问世，进一步促进了炼油工业的发展，为今日石油化学工业之发展奠定了基础。

随着近代化学工业发展，主要是无机化学工业和有机化学工业发展，人们开始把注意力集中在化学工业生产规律的研究和探讨方面，这就促进了做为化工生产过程理论基础和依据的化学工程学科的出现和发展。

1888年美国麻省理工学院(MIT)的L. M. Norton教授开设了化学工程选修课, 主要讲授工业化学与化工机械, 从此, 一门新的学科——化学工程出现了。

1901年美国化学顾问G. E. Davis撰写了世界上第一部化学工程教科书, 即A Handbook of Chemical Engineering。

1908年6月22日在美国费城成立了美国化学工程师学会(AIChE), 该学会的成立进一步促进了化学工程学科的发展。

1915年美国麻省理工学院的A. D. Little教授提出了单元操作(Unit Operation)的概念, 研究物理变化过程的规律, 如粉碎、混合、加热、焙烧、吸收、冷凝、浸滤、沉降、结晶、过滤、溶解和电解等。

1935年美国Purdue大学的R. N. Shreve教授提出了单元过程(Unit Process)的概念, 研究化学变化过程的规律, 如烷基化、氧化、硝化和磺化等。

可以认为, 到第二次世界大战结束时, 整个化学工程处于一个单元操作与单元过程时代。在这一时代, 人们普遍认为只要有了化学知识、机械知识和工艺知识就可以进行化工产品的生产, 其整个化学工业处于较低科技水平上。

20世纪上半叶, 随着人类社会的发展, 人们对化工产品的需求, 无论从数量上, 还是从品种上, 都有了新的突破。

第一次世界大战后, 苏联为了对付帝国主义的武装干涉和经济封锁, 苏联开始了合成橡胶的研究工作。苏联科学院院士列别捷夫用酒精做原料生产出了丁二烯, 用金属钠做催化剂, 采用本体聚合的方法生产出了丁钠橡胶, 并于1931年建立了万吨级生产装置。第二次世界大战期间, 日本占据了东南亚, 断绝了美国天然橡胶的来源, 为了尽快地生产出橡

胶这一战略物资，美国于1943年建立了大型丁烯脱氢制丁二烯生产装置。

在此期间，英国于1928年生产了脲醛树脂，美国于1931年生产了有机玻璃——甲基丙烯酸甲酯的聚合物，德国于1931年生产了聚氯乙烯，1939年美国开始了聚酰胺-66纤维的工业化生产，英国则于1941年生产出了聚酯纤维。20世纪上半叶，合成橡胶、合成树脂、合成纤维工业的出现和发展，为第二次世界大战后高分子合成材料工业的发展奠定了基础。

1928年HOUDRY公司酸性活性白土催化剂的出现，导致了世界上第一套固定床催化裂化装置的投产，即1936年4月6日在Paulsboro炼油厂投产的日加工能力为320立方米的催化裂化装置。此后，为了使催化裂化生产过程连续化，1941年在该厂建立了日加工能力为80立方米的移动床催化裂化装置。1942年美国Standard Oil公司建立了世界上第一套日加工能力为2100立方米的流化催化裂化装置(FCCU)。FCCU的出现，不仅是世界范围内炼油工业发展的里程碑，也是世界范围内化学工业发展的里程碑。

石油炼制工业向深度加工方向发展，不仅促进了炼油工业的发展，而且为化学工业的发展提供了必要的原料。以石油天然气为原料，生产合成氨、尿素、烯烃、芳烃、塑料、纤维、橡胶的石油化学工业，在第二次世界大战后在世界范围内取得了突飞猛进的发展，成了化学工业的中坚和骨干。

此外，1928年英国细菌学家弗莱明发现了青霉素，1943年开始在发酵缸里进行批量生产，奠定了今日生物化工之基础。1945年美国实现了制造原子弹的曼哈顿计划，奠定了今日核化工之基础。

总之，20世纪上半叶，化学工业的几个重大分支，如无机化学工业、有机化学工业、高分子化学工业、石油化学工业、生物化工与核化工均得到了重大发展。化学工业的发展要求现代化的科学技术能够从理论上给予支持和指导，这就促进了化学工业的理论基础与支柱——化学工程的进一步发展。

二、化学工程的形成与发展

众所周知，化工产品生产过程是一个由化学变化和物理变化组成的过程。将化工原料转化成化工产品是一个化学变化过程。化工原料转化成化工产品是由化工原料和化工产品的性质所决定的。化学热力学可以帮助我们确定其转化方向和平衡转化率。但是，可能性并不等于现实性，为了实现原料到产品的转化，还必须借助化学动力学，研究其化学反应的速率。例如，通过选用合适的催化剂，创造一定的温度、压力、配比、空速、反应时间、pH值、溶剂等条件，加速原料向产品方向的转化速度（确切地说应为反应速率）。由于多数或大多数化工生产过程中需要使用催化剂，因此我们还需要借助催化化学或工业催化，研究催化剂的组成、结构与性质，研究催化作用机理，研究工业催化剂的转化率、选择性、收率（即转化率与选择性的乘积），寿命等性能指标。在绝大多数化工生产过程中，原料的转化率不可能达到百分之百（即反应结束后，反应产物中含有未反应之原料），转化了的原料的选择性不可能达到百分之百（即转化了的原料只有一部分变成了目的产物，而另一部分则变成了副产物），或者说，目的产物的收率不可能达到百分之百（即反应结束后，反应产物为目的产物、副产物和未反应原料之混合物）。

因此，反应结束后，必须对反应产物进行后处理，主要是分离，如使用精馏塔、吸收塔、萃取塔实现分离目的。与此同时，为了加速反应的进行，通常需要对反应器进行加热处理，而对反应产物则需进行冷却处理。为了保证化工生产过程顺利进行，同时也为了合理回收热量实现节能降耗之目的，化工生产过程通常均需辅之以换热过程，如热交换、加热、蒸发、冷凝、冷却等。此外，为了保证化工生产的连续进行，还必须配置流体输送过程，即使用泵和压缩机输送气体和液体。因此，化工生产过程是一个由化学反应、分离、换热、流体输送等环节构成的生产过程。

为了加深对化工生产过程规律的认识，为了研究分离、换热、流体输送、化学反应这些物理变化与化学变化的规律，人们开始借助数学，主要是化工应用数学这一工具。数学与化学工程的结合，使化学工程发生了一次质的飞跃。

输送流体（气体与液体混合物、气体或液体）的压缩机或泵中所进行的过程为动量传递过程，一般被传流过程的有关规律所制约。在各类换热设备（热交换器、汽化器、重沸器、冷凝器、冷凝冷却器、空冷器、水冷器、蒸汽发生器等）中，所进行的过程是动量传递与能量传递的过程，它们被传流与传热过程的有关规律所制约。在各类塔器（精馏塔、吸收塔、萃取塔等）中，所进行的过程是动量传递、能量传递与质量传递的过程，它们被传流、传热与传质过程的有关规律所制约。在各类化学反应器（氧化、加氢、重整和催化裂化等）中，所进行的过程是化学反应过程，同时还伴随着催化剂床层中的动量传递、能量传递与质量传递过程。

可以这样说，整个化工生产过程均受动量传递、能量传递与质量传递，以及化学反应过程规律的制约。或者说，受

“三传一反”规律的制约。不难看出，从单元操作与单元过程的研究到“三传一反”的研究是一次突破，这次突破的关键是数学在化学工程中得到了广泛的应用。

正是数学的深入应用导致了今日化学工程的一个重要分支——化学反应工程学的出现。众所周知，1956年欧洲第二届化学工程会议上正式提出了化学反应工程学的概念，1962年O. Levenspiel教授写出了第一本关于化学反应工程学的书。化学反应工程学把对化学反应微观动力学（本征动力学）的研究提高到了宏观动力学（过程动力学）的水平，为工业反应器的设计提供了理论依据，奠定了对工业反应过程进行数学模拟的理论基础。

数学的深入应用还同时导致了今日化学工程另一个重要分支——传递过程原理的出现。1960年著名的R. B. Bird教授及其同事们写出了《传递现象》一书。该书被认为是今日化学工程的一个重要理论发展，用微分方程描述动量传递、能量传递、质量传递过程的规律，使人们对化工生产过程规律的认识提高到了一个新的水平。

尤其值得一提的是，第二次世界大战以后出现了电子计算机，并逐步被各行各业的人们所认识和采用。特别是70年代出现的微机革命，使电子计算机在各个领域中均得到了迅速推广和广泛应用。电子计算机正在改造着传统的工业生产，乃至整个人类社会。

电子计算机被引入化学工程并开始化工生产过程中得到广泛应用，使化学工业、石油化学工业的面貌发生了深刻变化，也使化学工程的发展进入了一个崭新的阶段。

第二节 化学工程与化工系统工程

一、今日化学工程

如前所述，第二次世界大战以后，随着化学工业的发展，特别是石油化学工业的发展，要求人们对化工生产过程的规律必须有深入的了解和认识。

数学，特别是应用数学，尤其是化工应用数学的发展，使化学工程由单元操作与单元过程时代进入了“三传一反”时代，进入了以化学反应工程和传递过程原理为依据，以数学为工具研究动量传递、能量传递、质量传递和宏观动力学规律的时代。

随着数学工具的广泛应用，仅仅应用解析方法求解方程的做法，限制了数学在化学工程中的应用。而电子计算机的出现与应用，特别是数值解法的出现与应用，使化学工程中遇到的方程求解的难题迎刃而解，从而使化学工程的发展进入了一个新的时代。

数学和电子计算机，获得了深入而广泛的应用是今日化学工程的最突出的特点，并使化学工程的面貌发生了深刻的变化。前已述及，由于数学的深入应用，促进了化学反应工程学和传递过程原理的出现，其后由于电子计算机的应用，特别有数值解法的应用，使得这两门新的学科在实际应用方面前进了一大步。同时使得人们对反应、分离、换热、流体输送的描述有了理论依据，应用电子计算机对这些过程进行数学模拟有了可能，并为建立化工流程模拟系统的程序库奠定了理论基础。

目前，由于计算机的应用，使得化学工程热力学至少在

二个方面得到了卓有成效的应用。

其一，在物性数据关联方面，在状态方程、相平衡、焓值计算方面，化学工程热力学发挥着越来越重要的作用。现今，在商品化的化工流程模拟软件中，几乎没有一个不含有物性估算数据库，而数据库建立的理论依据恰恰是化学工程热力学。

其二，在焓平衡计算方面，在焓分析的应用方面，化学工程热力学把节能工作提高到了一个新的水平上。

众所周知，热力学第一定律提出了内能的概念，而真正获得工业应用的是焓。我们进行的热量衡算实质上是焓平衡的计算。热力学第二定律提出了熵的概念，而真正获得工业应用的是焓。我们把系统可逆变化与环境呈热力学平衡状态时，所能做的最大的有用功，定义为系统的焓。焓是描述热量做功能力大小的物理量。我们知道，热量不但有数量的大小，而且有质量的高低。应用热力学第一定律研究节能，只注意到了热量的数量方面，例如通过消灭跑冒滴漏实现节能，这是低水平的节能。应用热力学第二定律研究节能，则把注意力集中在热量的质量方面，研究如何合理用能。我们知道，电能可以百分之百地做功，而热能却不可能百分之百地做功，热能只能部分做功，另一部分则做为废热散发到环境中去。为了合理地利用能量必须对系统进行焓分析，找出减少系统焓损失的途径。在今日的化学工业中，一般采用降低过剩空气系数（改造炉子的燃烧喷嘴）、降低排烟温度（在炉子的对流段加设空气预热器，或锅炉软水预热器，或物料换热器），以提高加热炉的热效率；在塔的精馏段设置中间冷却器，在塔的提馏段设置中间再沸器以便合理回收能量，减少系统的焓损失；在换热网络节能改造中使用夹点匹

配方法，均是以焓分析做为其理论依据的。然而，欲实现上述各项节能措施，没有计算机的参与和应用是不可思议的。可以毫不夸张地说，焓分析把节能工作提高到了一个新的水平上，即高水平的节能。

电子计算机在化学工程中应用的最大成就是使化学工程和系统工程相结合，形成了化工系统工程这一新的学科。1968年美国威斯康辛大学的D. F. Rudd教授写出了《过程工程策略》一书，被视为化工系统工程的奠基之作。关于今日之系统工程和今日之化工系统工程，我们将在下文中讨论。

综上所述，可以看出，化学工程一百年的发展过程大体上经历了三个时期。

第一个时期为单元操作与单元过程时期，人们着重研究了物理变化过程和化学变化过程的规律。至今，单元操作与单元过程的概念并没有过时，只是在研究方法上加强了数学和计算机的应用。

第二个时期为“三传一反”时期，在这一阶段人们注重了数学工具的应用，人们借助微分方程研究动量传递、能量传递、质量传递和化学反应过程的规律。50年代出现的化学反应工程学和传递过程原理把人们对“三传一反”的认识提高到了一个新的水平。

第三个时期为今日化学工程阶段，电子计算机的应用已深入到化学工程的每一个分支。从学科角度看，人们对今日化学工程的理解，主要包含四大分支，即

化学工程热力学
化学反应工程学
传递过程原理
化工系统工程