

高等教育规划教材

化工过程 系统分析与合成

方利国 编著

HUAGONG GUOCHENG
XITONG FENXI YU HECHENG



化学工业出版社

014309217

TQ02-43
89

第二立壁壁，念翻本基的與合得行道工升远者，語善脚基跟莫向知合可
用寒已封颈腹頭用脚量者，頭由記要務地穿肉青斯刻赤叶木，容內要主毫與合

dales A 千基者并式供附素食暗大，圖博已购家滿量大音直章紙，章子或食共并全。卦
用脚利又換寒頭用脚量者，頭由記要務地穿肉青斯刻赤叶木，容內要主毫與合

dales A 千基者并式供附素食暗大，圖博已购家滿量大音直章紙，章子或食共并全。卦
用脚利又換寒頭用脚量者，頭由記要務地穿肉青斯刻赤叶木，容內要主毫與合

dales A 千基者并式供附素食暗大，圖博已购家滿量大音直章紙，章子或食共并全。卦
用脚利又換寒頭用脚量者，頭由記要務地穿肉青斯刻赤叶木，容內要主毫與合

dales A 千基者并式供附素食暗大，圖博已购家滿量大音直章紙，章子或食共并全。卦
用脚利又換寒頭用脚量者，頭由記要務地穿肉青斯刻赤叶木，容內要主毫與合

华南理工大学研究生重点课程建设项目

高等教育规划教材

化工过程系统分析与合成

方利国 编著



藏 (TQ) 目錄號存件圖
北京航空航天大學圖書館
藏書 2013.8
高教出版社
ISBN 978-7-115-18030-0
I. Q11... II. 方... III. 化工過程系統分析與合成
II. 1000
中國圖書出版社 CIP 數據核對 (2013) 條 102825 合

中華人民共和國圖書法

TQ 02-43
89

(110001) 電話號碼 13 號 13 號 地址: 北京市東城區東四南大街 1 号
說明為工系辦公室北門口單 205 室 100710
83 期 2007 年 1 月 1 日印制 100710

郵政編碼: 100710 國際標準書號: ISBN 978-7-115-18030-0



化 学 工 业 出 版 社

網上書店: www.cip.com.cn 中華書局網上書店 國際化學工業出版社

· 北京 ·

定金書面 產權財產



北航 01695588

元 00.00 : 份 家

01030315

本书是化工过程分析与合成的实用基础教程，涉及化工过程分析与合成的基本概念、模型建立、模拟求解、过程优化、系统合成等主要内容。本书兼顾课程内容的深度与广度，注重知识的理论性与实用性。全书共分为7章，每章均有大量的案例与例题，大部分案例均为作者基于Aspen Plus、Matlab、Visual Basic、Excel开发的通用程序，极大地方便了读者对课程知识的理解及实际应用。

本书可作为化学化工类本科生化工分析与合成、化工系统工程、化工设计等课程的教材或主要参考书，也可作为研究生化工计算机应用技术的主要参考书，同时也可供化学化工科技人员作为化工模拟及优化设计的参考书籍。

本书配有全套辅助学习电子课件。电子课件可免费在www.cipedu.com.cn下载。该电子课件包括1~7章例题的程序、1~7章的多媒体课件以及本书中用到的Aspen Plus、Matlab、Excel主要功能介绍及应用。读者可在此基础上进行二次开发，作为教师课件、学生试卷及实际应用时的素材和工具。

图书在版编目 (CIP) 数据

化工过程系统分析与合成/方利国编著. —北京：
化学工业出版社，2013.8

高等教育规划教材

ISBN 978-7-122-18020-9

I. ①化… II. ①方… III. ①化工过程-高等学校-
教材 IV. ①TQ02

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2013) 第 165852 号

责任编辑：廉 静 张双进

装帧设计：王晓宇

责任校对：王素芹

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：三河市延风印装厂

787mm×1092mm 1/16 印张 22 字数 563 千字 2013 年 11 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：49.00 元

版权所有 违者必究

前言

自从留校任教以来，正规全程讲授的第一门课就是化工过程分析与合成（当时课程名称为化工系统工程），到现在已有 20 余年。历年的纸质教案摞起来也有几尺之高，电子文稿也有数百兆，编写该课程相应的教材的心愿已有 10 年左右。尽管在这 10 左右的时间作者已陆续出版了近 10 本各种教材和专著，也编写了该课程的讲义，但正式动笔编写该课程教材的决心迟迟未下。主要原因：一是作者尚未完全把握该课程的核心内容，国内所能见到的教材各有千秋，但总感觉有所缺陷；来自学生的反馈也似乎表明很难将课程的知识用于解决实际问题，因为涉及大量的计算机应用，如果没有优化及模拟软件，不借助于计算机计算连最简单的黄金分割优化方法也只能停留在理论的层次，因为有时一个优化问题可能多次重复调用黄金分割法，如果手工计算将耗费大量时间；二是作者的计算机应用能力尚未具备解决该课程中的所有问题，它涉及诸如 Aspen Plus、Matlab 之类的模拟软件，Excel 中的规划求解、宏计算、迭代求解，自主 VB 开发解算化工优化问题等相对较难而又要全面的计算机应用知识。直至现今，上面两个问题已基本解决；故决定完成 10 年来的心愿，编著该教材，也为该课程在国内的发展提高添上一块不起眼的基石。

经过近一年半的写作，书稿基本完成。期间有艰辛也有喜悦。为了尽量完善书稿内容，有时为了搞清楚一个概念，需要查找多本参考文献，通过互相比对，选择最完善的表述。有时通过比对也无法确定正确与否，只能通过全面计算确定最终结构。如有个别参考文献上的案例模型，国内多本教材均有引用，本书也想引用，但发现其中一个约束条件是有问题的。为了验证此问题，作者开发了此案例的计算机模拟计算软件，将约束条件改为作者的约束条件，模拟结果和国外参考文献上的一致。进一步分析模拟数据，发现该约束问题在优化过程中是非紧约束，故即使采用错误的约束方程，在目前的已知数据下，优化结果也不会变。但当已知数据改变时，原来的非紧约束就有可能变成紧约束，此时模型的错误就会影响最优解。基于这种情况，本书中所有的案例，无论是作者平时工作研究中的实际例子，还是引用文献中的案例，作者均通过自己开发的软件或应用程序，对数据进行重新计算，验证结果正确后才采用。

本教材共分 7 章，第 1 章主要介绍了化工过程分析与合成的一些基本概念及主要研究内容，其中包含了三个化工过程分析的案例及三个化工过程合成的案例；第 2 章主要介绍了化工单元模型及结构模型的建立方法，其中对基于量纲分析的方法构建模型做了深入探讨；第 3 章介绍了化工过程模拟的基本策略与方法，同时介绍了模型方程的分割与切断求解的基本思路和方法；第 4 章介绍了化工过程分析与合成中涉及的各种优化方法，着重介绍如何利用计算机来解决这些优化问题；第 5 章则通过十二个具体案例的分析，全面呈现了化工过程分析的方方面面，如模型方程的建立、模拟软件的选择、具体计算程序的编写、对计算或模拟结果的分析等；第 6 章介绍了化工过程合成的基本策略，并对反应过程合成、分离过程合成及换热过程合成中的主要内容进行了介绍，其中作者开发的关于挟点温度及公用工程计算的程序具有很好的通用性；第 7 章对化工过程节能有关的概念、方法、技术及国家政策方针展开了阐述，可作为化工节能课程的主要内容。原计划还有智能优化及模拟软件应用等内容，现将该部分内容放入电子课件，并定期完善更新，读者可凭书上的注册码，到化学工业出版

本教材由方利国编著，甘景洪、王方娴、刘婧、吴少如、苏嘉俊、王少飞等同学参加了教材的部分文本输入及电子课件开发工作；华南理工大学研究生院、华南理工大学教务处对教材的出版给予了大力支持，在此表示感谢。感谢家人在写作过程中对本人的大力支持；感谢华南理工大学化学与化工学院多年来选修该课程的同学对本课程教学的支持。

本教材在编写过程中，作者参考了大量的文献及教材，在此特表示感谢。参考文献如有遗漏之处，敬请谅解。本教材虽经作者 20 多年的资料收集，近 2 年的编写，但由于作者水平有限，不妥之处在所难免，望同行及读者予以批评指正。

作 者

2013 仲夏年于广州

目 录

第1章 化工系统分析与合成导论	001
【本章导读】	001
1.1 系统与化工系统	001
1.1.1 系统	001
1.1.2 化工系统	002
1.1.3 系统的特性	004
1.2 化工系统分析	010
1.2.1 基本定义	010
1.2.2 化工系统分析含义	011
1.2.3 化工系统分析具体案例	011
1.3 化工系统合成	020
1.3.1 化工系统合成定义	020
1.3.2 化工系统合成多重同心圆概念	021
第2章 化工过程系统模型化	040
【本章导读】	040
2.1 化工单元模型分类及简化	040
2.1.1 模型分类	040
2.1.2 模型的简化	049
2.1.3 模型参数	051
2.1.4 模型建立的步骤	051
2.2 常见化工单元数学模型	056
2.2.1 混合过程建模	056
2.2.2 气体压缩过程建模	059
2.2.3 气体膨胀过程建模	062
2.2.4 液体加压过程建模	064
2.2.5 分割过程建模	064
2.2.6 管路压降过程建模	065
第3章 化工系统模拟方法及策略	085
【本章导读】	085
3.1 化工单元模拟	085
3.1.1 基本物性计算	085
3.1.2 线性方程组计算	094
3.1.3 非线性方程计算	096
3.1.4 常微分方程计算	104
3.1.5 偏微分方程计算	110
3.2 序贯模块法	113
3.2.1 无循环物流系统	114
3.2.2 有循环物流系统	115
3.2.3 三种类型的流程模拟	116
3.3 联立方程法	118
3.4 联立模块法	119
3.5 化工系统的分解	122
3.5.1 系统分隔	123
3.5.2 系统的切断	126
3.6 设计（独立）变量的选择	130
3.6.1 问题的提出	130

3.6.2 拓扑双层图	131
3.7 大型方程组的分解策略	133
3.7.1 指定方程组每一方程的输出 变量	135
3.7.2 利用方程组输出变量集, 绘制方程 组信息有向图	135

100

第4章 化工过程系统优化基础

【本章导读】	140
4.1 化工过程系统优化概述	140
4.1.1 优化问题的性质	140
4.1.2 常见的化工优化问题	141
4.1.3 化工优化问题的一般数学模型	142
4.1.4 化工优化问题的基本方法	144
4.2 优化的数学基础	144
4.2.1 凸集	145
4.2.2 凸函数	145
4.2.3 单变量函数的极值情况	145
4.2.4 多变量函数的极值情况	147
4.2.5 函数最优解的最后确定	149
4.3 无约束函数优化	150
4.3.1 单变量函数优化	150
4.3.2 多变量函数优化	157
4.4 线性及混合整数规划	165
4.4.1 线性规划	165
4.4.2 混合整数规划	177

【本章导读】	199
5.1 换热过程模拟及优化	199
5.1.1 套管式换热器动态模拟	199
5.1.2 单个换热器面积优化	203
5.1.3 串联换热器优化	208
5.2 流体输送管径优化	211
5.2.1 问题的提出	211
5.2.2 优化模型的建立	212
5.2.3 优化求解	213
5.3 保温层优化	215
5.4 多效蒸发优化	217
5.4.1 问题的提出	217
5.4.2 优化模型的建立	217
5.4.3 优化分析	218
5.5 反应精馏塔双回流比优化	219
5.5.1 问题的提出	219
5.5.2 优化模型建立	220
5.5.3 结果分析	223
5.6 石油产品运输调度优化	224
5.6.1 问题的提出	224
5.6.2 模型的建立	224
5.6.3 实例求解	225
5.7 生产过程最优选择	226
5.7.1 问题的提出	226
5.7.2 模型的建立	227
5.7.3 优化求解及灵敏度分析	227
5.8 生产配置优化	228
5.8.1 问题的提出	228
5.8.2 模型的建立	229
5.8.3 优化求解及分析	229
5.9 锅炉发电系统优化	231
5.9.1 问题的提出	231
5.9.2 模型的建立	232
5.9.3 模型求解	233

5.9.4 灵敏度分析	235	5.11.3 模型的求解	242
5.10 管式反应器最优温度分布	236	5.12 平行理想催化反应模拟及优化	
5.10.1 问题的提出	236	分析	243
5.10.2 模型的建立	236	5.12.1 问题的提出	243
5.10.3 优化求解	237	5.12.2 模型的建立	244
5.10.4 结果分析	239	5.12.3 模型的计算	245
5.11 串联反应器最佳空时分析	241	本章小结及提点	246
5.11.1 问题的提出	241	习题	246
5.11.2 模型的建立	241		
第6章 化工过程合成技术及优化	249		
【本章导读】	249		
6.1 合成策略	249	6.3.3 精馏分离的几个基本概念	268
6.2 反应过程合成	253	6.3.4 精馏分离的经验规则及应用	270
6.2.1 原料的选择	253	6.3.5 最小总气相负荷确定法	272
6.2.2 反应路径的选择	255	6.4 换热网络合成	277
6.2.3 反应器类型的选择	256	6.4.1 换热网络合成几个基本概念	277
6.2.4 反应器系统结构的选择	258	6.4.2 TH(温焓)图和组合曲线	279
6.2.5 反应操作及化学组分分配试探		6.4.3 挤点的确定	280
规则	260	6.4.4 无挤点“门槛”问题	284
6.2.6 独立反应数确定	260	6.4.5 换热网络设计	284
6.3 分离序列合成	262	6.4.6 节能与投资的优化	288
6.3.1 分离方法简介	262	本章小结及提点	289
6.3.2 分离方法选择	266	习题	289
第7章 化工过程节能技术分析与评价	291		
【本章导读】	291		
7.1 化工节能概述	291	7.3.3 泵和风机节能技术	317
7.1.1 能源概述	291	7.3.4 热泵节能技术	322
7.1.2 节能定义	293	7.3.5 热管节能技术	323
7.1.3 化工节能方法与准则	295	7.4 强化传热节能技术	326
7.1.4 化工节能工作中的几个基本		7.5 精馏过程节能技术	332
概念	298	7.5.1 热泵精馏技术	332
7.2 化工节能技术经济评价	302	7.5.2 内部热集成节能技术	334
7.2.1 节能技术经济评价	303	7.6 能源管理体系简介	339
7.2.2 化工节能技术生命周期评价	308	7.7 能源审计简介	340
7.3 化工通用节能设备与技术分析	311	7.8 固定资产投资节能评估简介	340
7.3.1 锅炉节能技术	311	本章小结及提点	341
7.3.2 换热器节能技术	315	习题	341
参考文献			
			342

第1章

化工系统分析与合成导论

【本章导读】

化工系统分析与合成 (Analysis and Synthesis of Chemical Process System, ASCPS) 课程是一门交叉的综合学科，它涉及化学工程、计算机技术、运筹学、工程经济学、最优化理论、自动控制等多门学科。它不像通常的化工原理、化工热力学等课程有较长的历史和相对比较固定的教学内容及教材，本课程的历史相对较短，也没有相对固定的教学内容和教材。ASCPs 课程国外大约在 20 世纪 60~70 年代开始有相关课程，当时出版的有关教材或专著主要还是以系统优化和系统工程的知识为主，如麦格劳-希尔公司 (McGraw-Hill Inc) 在 1970 年出版的《优化：理论和实践》(Optimization: Theory and Practice)，日本学者秋山镰和西川智登在 1977 年共著的《系统工程》。国内最早开设相关课程大约在 20 世纪 70 年代末，当时课程的名称为化工系统工程或化工过程系统工程，课程采用讲义的形式，系统优化理论方面的内容占了较大的篇幅。80 年代初，清华大学和天津大学合著出版了《化工系统工程》，华东理工大学也在 90 年代初出版了《化工系统工程基础》。从 20 世纪 80 年代末到本世纪初，该课程的有关研究及教材的出版似乎出现了一定程度上的停顿。到了本世纪初，和该课程有关的各种教材或专著又多了起来，国内有麻德贤主编的《化工过程分析与合成》、都健主编的《化工过程分析与综合》，何小荣主编的《化工过程优化》；国外有邓肯等著的《化工过程分析与设计导论》，埃德加等著的《化工过程优化》，Warren D. Seider 等著的《产品与过程设计原理-合成、分析与评价》。国内的教材所涵盖的内容相对集中在化工过程，而国外的有些教材所涵盖的内容非常广泛，过程模拟与优化大量采用计算机软件计算，并提供相应案例的计算机程序，便于读者研习。随着大型化工专用软件 Aspen Plus、Pro/II、CHEMCAD、HYSYS. Plant 及通用计算工具 MATLAB、FEMLAB、Excel 等的广泛使用，化工系统分析与合成课程将步入计算机软件应用主导的计算机时代。

1.1 系统与化工系统

1.1.1 系统

“系统”是在人类的长期实践中形成的概念。由于人们的实践目的、思维方式、认识角度和专业学科的不同，对于系统概念有着不同的理解。早在古希腊时代人们已使用系统这个词，但将它用于科学领域并使之具有特殊含义的还是近代的事情。最先把“系统”这个词以

及它的观点和方法引进科学领域并赋予特殊意义的人是 F. W. 泰罗 (F. W. Taylor)，他在 1911 年出版的《科学管理》一书中提出了“系统”一词并首次赋予其科学含义。被后人称作泰罗系统的管理技术就是以《科学管理》一书为起点发展起来的。

系统的拉丁语 Systema 由接头词“共同地”和动词“使他于”结合而成，是表示群、集合等意义的抽象名词。系统的英文 system 一词在牛津词典中有三种含义，分别是以一定规律所构成的协同工作的部件或事情的集合；制度、方式、方法及体制；秩序及规律。可见英文中的 system 一词不仅含有实体的系统含义，也包含了方式、方法等务虚系统的含义。

系统作为一个科学概念，不同的学者尽管有不同的表述，但其核心内容是一致的。如钱学森主张：把极其复杂的研究对象称为系统，即相互作用和相互依赖的若干组成部分合成的具有特定功能的有机整体，而且这个系统本身又是它所从属的一个更大系统的组成部分。许国发等给出了系统的一个简明定义：系统是由两个以上可以相互区别的要素构成的集合体；各个要素之间存在着一定的联系和相互作用，形成特定的整体结构和适应环境的特定功能，它从属于更大的系统。贝塔朗菲把系统定义为：处于一定的相互关系中并与环境发生关系的各组成部分（要素）的总体（集）。

一般来说，系统是相互联系、相互影响的若干组成部分，按一定的规律所组成的具有特殊功能的有机整体。根据以上定义，系统构成有两个基本要素：一是构成系统的单元，二是构成系统的这些单元之间的连接方式或相互关系。由此可见，即使两个系统的单元完全相同，但单元和单元之间的连接方式或相互关系不同，这两个系统也不相同。例如中国古代有名的田忌赛马就是一个很好的例子。齐国的大将田忌，很喜欢赛马。有一回，他和齐王约定，要进行一场比赛。他们商量好，把各自的马分成上、中、下三等。比赛的时候，要上马对上马，中马对中马，下马对下马。由于齐王每个等级的马都比田忌的马强一些，所以比赛了几次，田忌都失败了。但是还是同样的马，田忌改变了出马的次序，改为下马、上马、中马的顺序和齐王的上、中、下马分别比赛，结果田忌以 2 : 1 获胜。这里上、中、下马是构成系统的单元或要素，而出马次序就是单元的连接方式或相互关系。

1.1.2 化工系统

(1) 化工过程

将原料进行一系列的化学及物理处理，生产出预期的产品，并获得新的附加值的过程称为化工过程。这里需要注意的是化工过程必须获得新的附加值，否则将好好的铁制品人为进行氧化处理，使有用的铁制品变成铁锈制品也可能认为是一个化工过程。真正的化工过程如图 1-1 所示的硫酸生产过程。图 1-1 中将硫铁矿通过高温燃烧、催化氧化及吸收制取硫酸，硫酸的价值及其剩下的矿渣总价值之和已大于原硫铁矿的价值，使这个化工过程产生了新的附加值。如果更加细致分析的话，还必须考虑加工过程的费用。

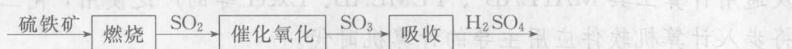


图 1-1 硫酸生产过程

图 1-2 是醋酸生产过程。乙醇通过一系列的催化氧化及精馏分离制取醋酸。



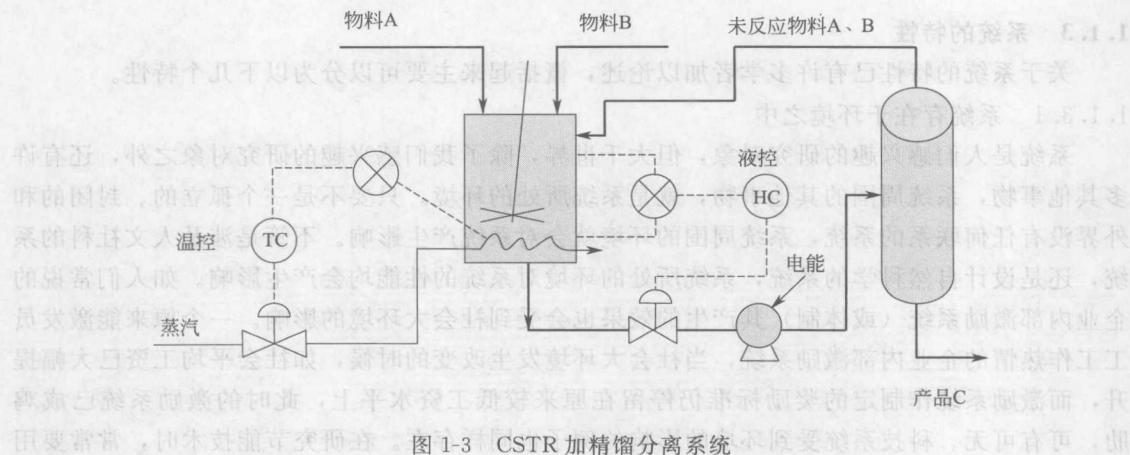
图 1-2 醋酸生产过程

以上两个化工过程实例中，第一个是无机物生产过程，产品是在化工生产中最常用的的基础原料硫酸，根据市场需求，可生产出不同规格的硫酸产品，如稀硫酸、浓硫酸、发烟硫酸等。而第二个实例是有机物的生产过程，原料酒精经过两次催化反应及一系列的精馏分离，得到产品醋酸。

(2) 化工系统

化工系统又称化工过程系统，是按一定的目的组织起来的化工单元过程所构成的化工生产过程整体。用化工系统来代替化工过程，主要是为了突出化工过程的系统特性，以便用系统的观点来分析和合成化工过程。

一套化工生产装置，用一定的原料生产出一定的产品，构成这套装置的所有设备及其处理的物料和外部提供的公用工程（动力、热能、冷能，合称能量流）组成了一个化工系统。一个化工厂包括有好几套生产装置，投进一种或几种原料，生产出多种产品，各套装置之间具有物料和能量的联系，这个化工厂也组成了一个化工系统。一套生产装置或一个化工系统，内部之间除了物料和能量的联系外，还有信息的联系，如各种温度、压力、成分通过各种仪表测量及传输。因此，可以说一个化工系统是由物料流、能量流、信息流、设备流四个子系统组成，这四个子系统相互联系又相互影响，决定着化工系统的整体性能。图 1-3 是一个典型的连续搅拌槽式反应器 (CSTR) 加精馏分离系统，该系统中包括了物料流、能量流、信息流、设备流四个子系统。图中的黑粗线是物料流系统，虚线是信息流，黑细线是能量流系统，带有灰色的图形是设备流。



初始物料 A、B 及未反应的物料 A、B 混合物进入 CSTR 进行反应，通过搅拌器的搅拌使物料混合均匀，通过蒸汽提供热量，使反应保持在较高温度，有利于提高反应速度。在此阶段，共有四股物流，分别是前已提及的三股进料物料及一股反应后离开的含有生成物 C 的物流；此阶段能量流就是蒸汽，需要注意的是蒸汽所提供的能量大小除了与蒸汽流量大小有关外，还与进入蒸汽的压力、温度以及离开时的状态有关。蒸汽在有些化工系统中可能是物料流，如水蒸气和煤反应时水蒸气就是物料流；此阶段的设备流就是连续搅拌槽式反应器（包括搅拌器和盘管式蒸汽换热器）；此阶段的信息流是反应器内温度及液位信息，当然也包括为了控制反应器内温度和液位有关的整个控制仪表，如温度传感器、液位传感器、温度控制仪、液位控制仪以及对应的控制阀，有关控制系统的详细内容，感兴趣的读者请参看相关参考文献。离开反应器的物料通过泵输送进入精馏塔，泵这个设备需要外界能量流的提供才能工作，这个能量流就是电能。也就是说，如果没有电能的提供，反应后的物料必须具有足够

的压力，克服管道的阻力让其自流进入精馏塔。精馏塔这个设备在图 1-3 上作了大大的简化，其实根据实际需要会有不同的控制系统及外部能量的提供如图 1-4（包括冷能），在详细分析精馏塔性能时不能简化。

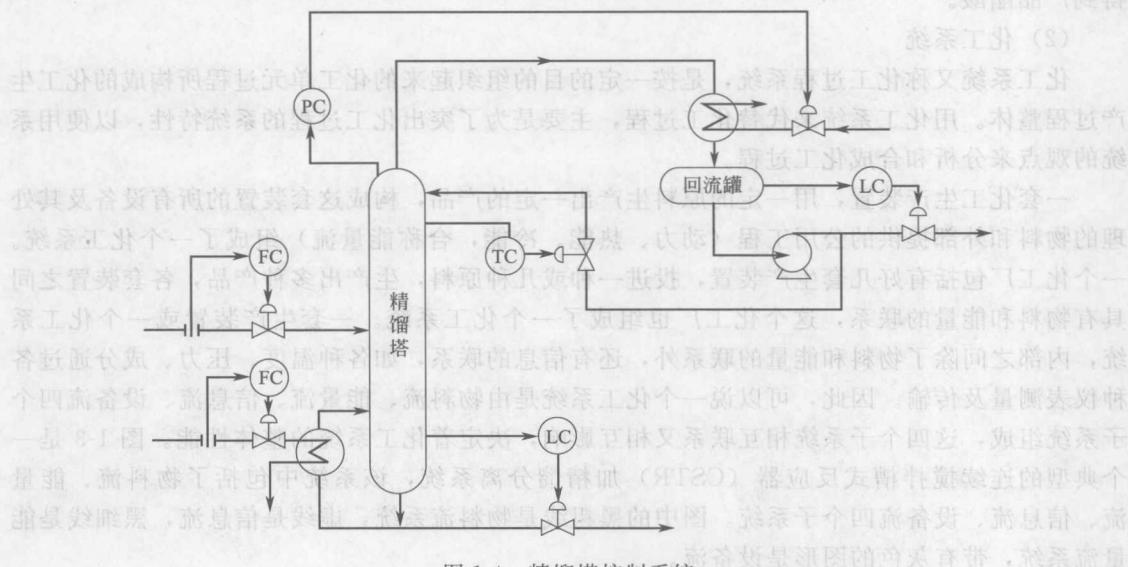


图 1-4 精馏塔控制系统

1.1.3 系统的特性

关于系统的特性已有许多学者加以论述，概括起来主要可以分为以下几个特性。

1.1.3.1 系统存在于环境之中

系统是人们感兴趣的研究对象，但大千世界，除了我们感兴趣的研究对象之外，还有许多其他事物，系统周围的其他事物，就是系统所处的环境。只要不是一个孤立的、封闭的和外界没有任何联系的系统，系统周围的环境就会对系统产生影响。不管是涉及人文社科的系统，还是设计自然科学的系统，系统所处的环境对系统的性能均会产生影响。如人们常说的企业内部激励系统（或体制）其产生的效果也会受到社会大环境的影响。一个原来能激发员工工作热情的企业内部激励系统，当社会大环境发生改变的时候，如社会平均工资已大幅提升，而激励系统所制定的奖励标准仍停留在原来较低工资水平上，此时的激励系统已成鸡肋，可有可无。科技系统受到环境的影响的例子也同样存在。在研究节能技术时，常常要用到能量守恒定律，该定律是一个普适规律，但具体运用该定律时，必须将研究的节能系统和该系统所处的环境同时加以考虑，否则就会发生能量不守恒的现象。

例如以某锅炉燃烧产生蒸汽的能量守恒为例，其具体情况如图 1-5。如果以锅炉燃烧过程作为研究的系统，那么对燃烧系统而言，燃料所能提供的能量没有完全传递给我们所研究系统的蒸汽，有相当一部分能量以烟道气及不完全燃烧的燃料输出到环境中去了。尽管进入系统的总能量等于系统输出的总能量，但系统（指燃烧过程）没有将所有的输入能量转移到人们感兴趣的蒸汽体系中去，蒸汽所带走的能量只有总输入能量的 73.2%，那么还有 26.8% 的输入能量去了哪里呢？通过包括环境的能量守恒分析，就可以发现原来输入能量的 17.2% 由锅炉的烟气带走，不完全燃烧也损失热量 9.1%，锅炉散热损失热量 0.5%。这样将环境和所研究的系统一起来考虑，总能量就守恒了。可见存在与环境中的系统，无论是涉及人文的还是自然的，在研究其性能时均必须考虑环境对系统的影

响。环境改变了，原来性能良好的系统，就可能变得不再优良甚至无法工作。例如管壳式换热器是化工行业最基本的设备单元，这里暂且作为一个系统来研究。原来用于液-液换热性能优良的换热系统，当工作环境改变，如用于气-液换热时，该换热系统的性能就大受影响，甚至无法完成换热任务。工作环境对系统性能的影响例子在化工行业中比比皆是，请读者自己分析。

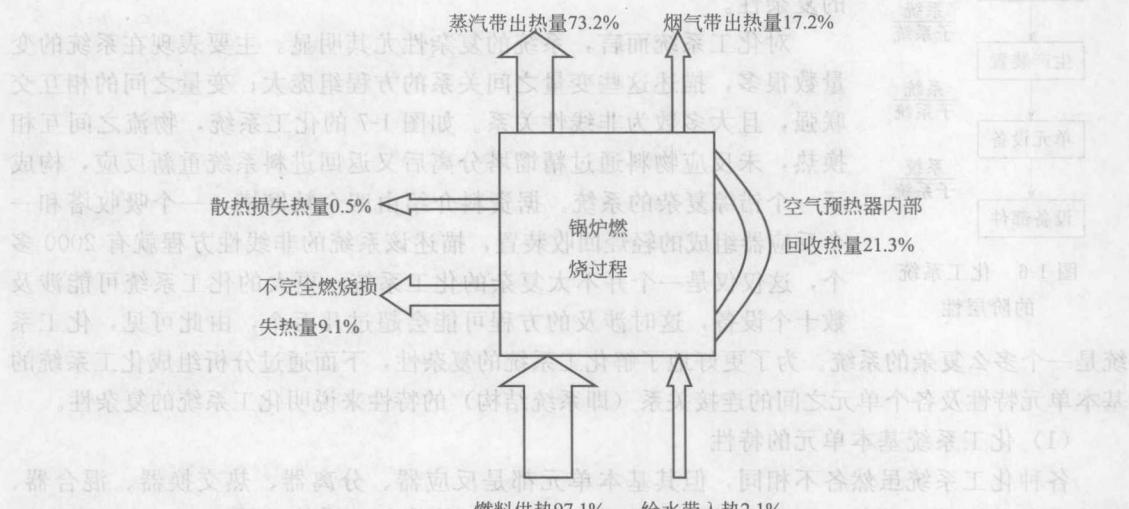


图 1-5 锅炉用能平衡图

1.1.3.2 系统的阶层性及嵌套性

由于系统的范围可大可小，一个大的系统可以包含若干个小的系统，这些小的系统称为大的系统的子系统；而每一个小的子系统又可以由更加小的系统组成，这样只要人们愿意或为了方便研究，就可以层层细分系统，构成了系统的阶层性及嵌套性。大的系统包含小的子系统，子系统包含更加小的子系统的子系统，也可称为第一级系统的孙系统。以化工系统为例，化工系统是一个多阶层的极为庞大的综合系统。它一般可由以下几个层次组成：集团——化工厂——生产装置或流水线——单元设备——设备部件，如图 1-6 所示。图中最高的阶层是联合企业。它拥有数个化工厂作为它的子系统。联合企业接受一次原料，通过一系列的子系统生产出多种产品。化工厂作为联合企业的子系统，除拥有若干套生产装置外，还附有保证生产装置运转的辅助设备。各个化工厂之间有着物料流和能量流之间的联系，一个工厂的产品可以是另一个工厂的原料。生产装置则是由反应器、分离器、热交换器以及泵等单元设备作为其子系统，虽然单元设备可以分解成若干个部件，但通常以单元设备作为基本单元。

系统与子系统是相对的，某一系统对较高的系统而言是其子系统，即是下级，而对于较低层的系统来说，则是它们的上级。如广州某石化总公司，下辖炼油厂、氮肥厂、乙烯厂。而每一个厂下面又有多套不同的生产装置及生产车间，在生产装置及生产车间下面又有许多不同的单元设备。对于石化总公司来说，炼油厂、氮肥厂、乙烯厂是总公司的子系统，而各个分厂又是生产装置及生产车间的上级系统，即生产装置及生产车间是各个分厂的子系统。由此可见，要判断一个系统是否是子系统还是上级系统，主要决定于研究者观察问题的立脚点，而不在于系统本身。了解系统与子系统的这种阶层性及相对性对解决系统工程的问题很有帮助。

1.1.3.3 系统的复杂性

由于一个系统可以由多个子系统构成，每一个子系统又可以进一步细分为更小的子系统，这样构成系统的要素单元也可以说是子系统可以无限增加，而这些子系统之间的相互关系即可以是并行的同级关系，也可以是垂直的上下级关系，也可以是互相影响的网络及回路关系，从而导致了系统的复杂性。

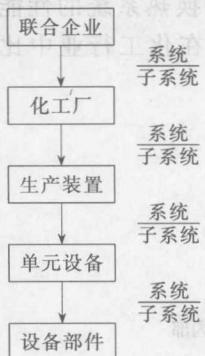


图 1-6 化工系统
的阶层性

对化工系统而言，系统的复杂性尤其明显。主要表现在系统的变量数很多，描述这些变量之间关系的方程组庞大；变量之间的相互交联强，且大多数为非线性关系。如图 1-7 的化工系统，物流之间互相换热，未反应物料通过精馏塔分离后又返回进料系统重新反应，构成了一个错综复杂的系统。据资料介绍由四个精馏塔、一个吸收塔和一个反应器组成的轻烃回收装置，描述该系统的非线性方程就有 2000 多个，这仅仅是一个并不太复杂的化工系统，更大的化工系统可能涉及数十个设备，这时涉及的方程可能会超过几万个，由此可见，化工系统是一个多么复杂的系统。为了更好地了解化工系统的复杂性，下面通过分析组成化工系统的基本单元特性及各个单元之间的连接关系（即系统结构）的特性来说明化工系统的复杂性。

(1) 化工系统基本单元的特性

各种化工系统虽然各不相同，但其基本单元都是反应器、分离器、热交换器、混合器、吸收塔以及泵单元设备。在其中进行化学反应、传质、传热和动量传递等过程。这些过程同时发生，相互交联，描述这些过程的数学模型大多是非线性的涉及的变量数有很多，下面是一个常见的广义传递数学模型， Y 表示系统的某一个性能指标，可以是温度、浓度等， K 是一个广义的传递系数， A 是传递面积， $(Y - Y^*)$ 是传递推动力，可以是温度差、浓度差、压力差等，这个数学模型是一个向量模型，它涉及一个系统中的许多变量。热量传递方程、质量传递方程、动量传递方程均可以仿照式(1-1)写出，在以后的模型方程建立中，会经常用到这个概念。如将上述方程用于某高温铁球突然落入无限大的水池中的冷却的数学模型时，可以得到以下方程（假设水池温度不变，铁球内部温度均匀）：

$$\frac{dY}{dt} = -KA(Y - Y^*) \quad K = f(Z) \quad (1-1)$$

$$Z = (z_1, z_2, z_3, \dots, z_n) \quad \frac{d(mc_p T)}{dt} = -K \times 4\pi R^2 (T - T_0) \quad (1-2)$$

式中， m 为铁球的质量； c_p 为铁的比热容； T 为铁球在时间 t 瞬间的温度； K 为铁球和水接触面的传热系数； R 为铁球的半径； T_0 为水池的温度。以上变量的单位在不同制式下可以不同，但最后都可以化为温度随时间变化的关系式。尽管作了两个假设，但最后化简后得到的传热方程为：

$$\frac{dT}{dt} = -0.04 \times e^{(T - T_0)/1000} \times (T - 300) \quad (1-3)$$

式(1-3)中温度的单位为 K，时间的单位为 min，可见式(1-3)不是常系数微分方程，需要采用数值求解的方法进行求解。尽管可以自己编程计算，但作者建议采用 Matlab 计算。调用 Matlab 的 ODE45 和 ODE23，具体程序如下。

```
function xODEs (具体程序见电子课件第一章程序 xODEs.m)
```

```
% 铁球从 2000K 降温曲线，在 7.0 版本上调试通过
% 由华南理工大学方利国编写，2012 年 2 月 29 日
% 欢迎读者调用，如有问题请告知 lfgfang@scut.edu.cn
```

```
clear all;clc
y0=[2000];%铁球初始温度为 2000K
[x1,y1]=ode45(@f,[0:1:170],y0);%0 到 170min,每分钟一个计算点
[x2,y2]=ode23(@f,[0:1:170],y0);
plot(x1,y1,'r-')
xlabel('时间, M')
ylabel('温度, K')
hold on
disp('Results by using ode45():')
disp('      x          y(1)      ')
disp([x1 y1])
disp('Results by using ode23():')
disp('      x          y(2)      ')
disp([x2 y2])
plot(x2,y2,'k:')

function dy=f(x,y)      % 定义降温速率的微分方程
dy=-0.04 * exp(0.001 * (y(1)-300)) * (-300+y(1));
```

计算结果由 Matlab 自动绘制出图 1-7。用户可以通过修改 dy 的表达式，将此程序用于其他微分方程求解。ODE45 和 ODE23 还可以求解微分方程组，在以后化工模型求解时会介绍。由于该问题比较简单，自己编程也不难，作者用 VB 编程的代码如下。

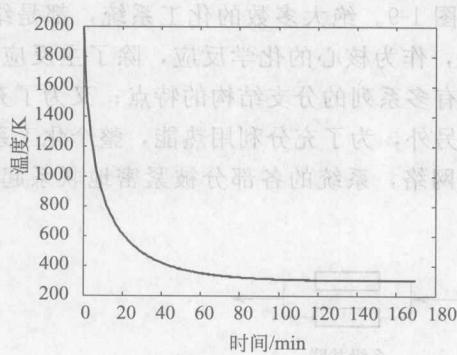


图 1-7 Matlab 计算铁球温度随时间变化

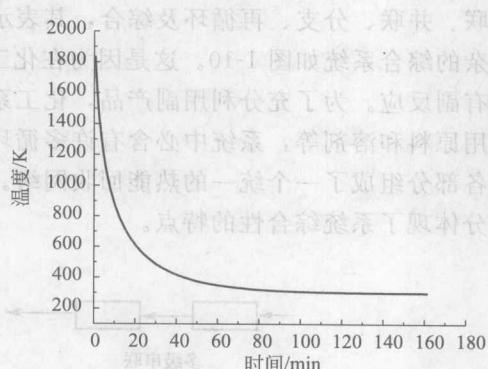


图 1-8 VB 计算铁球温度随时间变化

```
Dim i, x0, y0, y, h, k1, k2, k3, k4, n, x(具体程序见电子课件第 1 章程序 龙格库塔法 .vbp)
h=0.5
y0=2000
x0=0
xt=170
n=(xt-x0)/h
pn=(xt-x0)/(10*h)
Print
Open"d:weidate4.dat" For Output As #4
For i=0 To n-1
```

```

x0=h*i+x00
k1=dy(x0,y0)
k2=dy((x0+0.5*h),(y0+0.5*h*k1))
k3=dy((x0+0.5*h),(y0+0.5*h*k2))
k4=dy((x0+h),(y0+h*k3))
y=y0+h/6*(k1+2*k2+2*k3+k4)
Write#4,(i+1)*h,y
y0=y
If(i+1)/pn=Int((i+1)/pn)Then
Print"x=";(i+1)*h+x00;"y=";Int(y*1000+0.5)/1000
Else
End If
Next i
Close #1
End Sub
Public Function dy(x,y)
dy=-0.04*Exp(0.001*(y-300))*(y-300)
End Function

```

计算结果放在 D 盘文件名为 weidate4.dat 的文本文件上，利用计算数据调用 ORIGIN 绘图软件，得到计算结果如图 1-8，该 VB 程序也可以通过改变 dy 的表达式用于其他微分方程。

(2) 化工系统结构特性

化工系统结构是指组成系统的各个子系统（或单元）的连接方式。它和基本单元特性一起决定了整个系统的特性。不管多么复杂的系统。仔细分析，不外有以下五种结构，分别是串联、并联、分支、再循环及综合，其表示形式如图 1-9。绝大多数的化工系统，都是结构复杂的综合系统如图 1-10。这是因为在化工系统中，作为核心的化学反应，除了主反应外，还有副反应。为了充分利用副产品，化工系统便具有多系列的分支结构的特点；又为了充分利用原料和溶剂等，系统中必含有许多循环回路。另外，为了充分利用热能，整个化工系统的各部分组成了一个统一的热能回收网络。通过该网络，系统的各部分被紧密地联系起来，充分体现了系统综合性的特点。

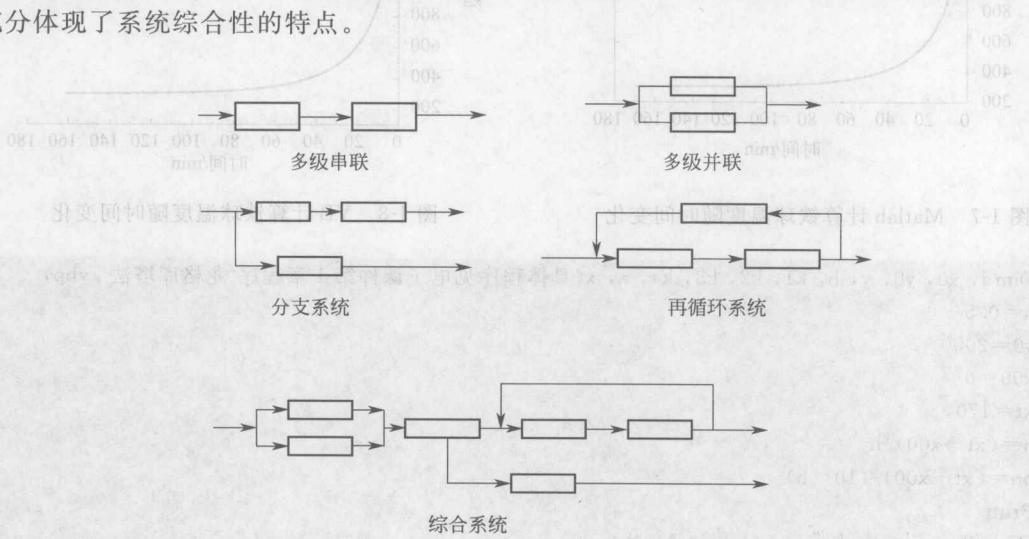


图 1-9 化工系统的结构

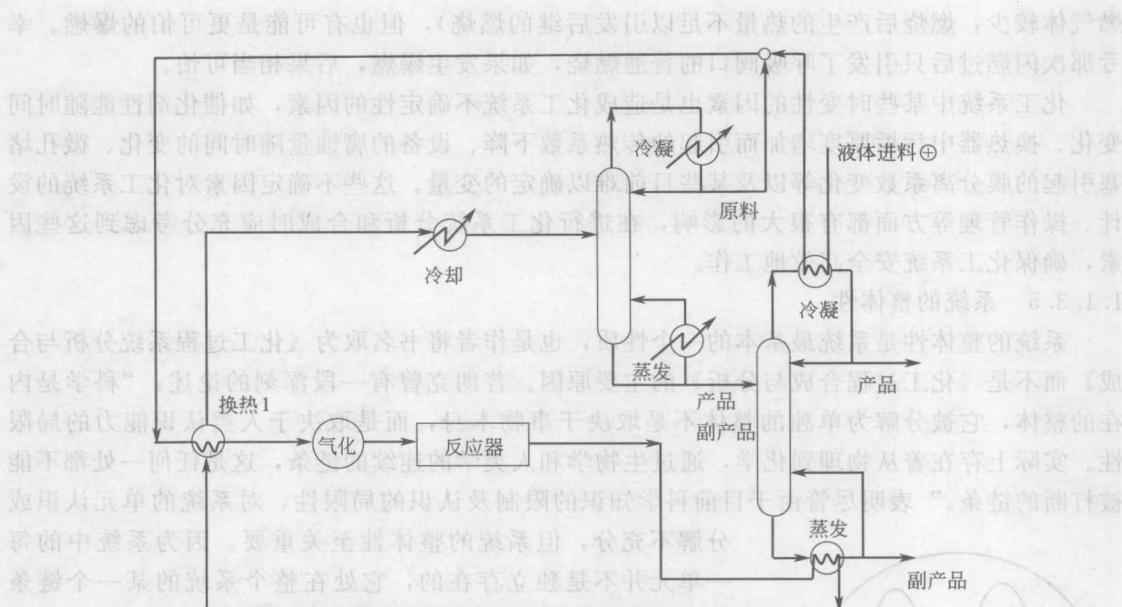


图 1-10 化工综合系统实例

1.1.3.4 系统的不确定性

系统的不确定性是由系统的复杂性所决定的。由于系统构成的单元及结构的复杂性及系统所处环境变化对系统性能的影响，造成了系统的不确定性。有些系统由于目前的技术手段的限制或基本原理尚未完全掌握，系统的性能尚无法完全预测。如目前的地震预报系统，尽管人们对地震已掌握了一定的知识，但在所观察到的相同的条件下，上次可能发生了强烈地震，而这次可能不发生地震；天气预报系统也是一样，由于有太多的不确定因素，造成了天气预报系统也不可能百分之一百的准确。

化工系统的不确定性由系统本征的不确定性、外部环境的不确定性、设备性能的时变性及随机性等单种或多种因素造成。如图 1-11，容器的下部开有一个小孔，液体随管子自然流出，假设流量与容器的液位成正比，与小孔的阻力成反比；容器的上部有流体以一定的流量流入，这时容器液位 H 的大小就会随流入流量的大小而波动，尽管从理论上讲，如果容器流入的流量突变后不再发生变化， H 会停留在一个高度上。但由于流入流量的不确定性变化，从而导致了容器液位高度的不确定性，至于两者不确定性的联动关系需要通过动态质量守恒方程、水力学方程等确定。

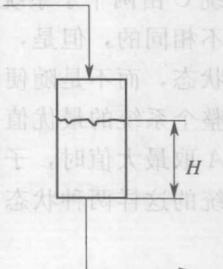


图 1-11 容器小孔自流液位高度

外部环境的不确定性也是造成化工系统不确定性的一个主要因素，尤其对化工安全系统而言。一个燃烧过程由于外部情况的不同就可能引发几种不同情况的燃烧，如普通燃烧、闪燃、爆燃。曾有某一化工厂的汽油罐呼吸阀由于灌装汽油速度问题引发较大量的可燃气体通过呼吸阀流出，本来呼吸阀是一个安全装置，而此时却成了一个杀人凶手。碰巧有安装工人在汽油罐附近路过（其实仍有一定距离，也没有观察到火源及热源），突然，几个工人被大火烧伤。事后调查是由于呼吸阀流出的可燃气体以及不知哪里来的火星或撞击能量刚好引发了这些可燃气体的闪燃。闪燃顾名思义就是一闪而过的燃烧，如果你周围刚好有可燃气体，几乎没有逃避的可能。闪燃过后可能是普通的燃烧，也可能一闪而过，火熄灭了（泄漏的可