

# 动态模拟技术与化学工程

陈晓春 马桂荣

(北京化工大学化学工程学院, 北京 100029)

**摘要:**介绍了化工过程动态模拟技术及相应软件的发展与应用状况,总结了动态模拟技术的最新进展。指出动态模拟技术应当与动态优化技术相结合,动态计算机网络管理将实现石油化工过程的连续实时优化,动态模拟技术将向工艺流程和生产方案的合成、能量系统集成、结合生态工业园区实例进行动态流程模拟等方向发展。

**关键词:**动态模拟技术;过程工业;化学工程;应用

中图分类号:TQ018;TQ015.9

文献标识码:A

## Dynamic simulation technique and chemical engineering

CHEN Xiao-chun, MA Gui-rong

(Institute of Chemical Engineering, Beijing University of Chemical Technology, Beijing 100029, China)

**Abstract:** Developments and applications of dynamic simulation technique in chemical engineering and relative software are introduced. Latest advances in dynamic simulation technique are summarized. It is also pointed out that dynamic simulation technique should be combined with dynamic optimization technique. Continuous real-time optimization of petroleum and chemical production will be implemented in computer network administration. Dynamic simulation technique will develop towards the combination of process flow with production scheme, the integration of energy system and the dynamic process flow simulation based on cases in ecological industry parks.

**Key words:** dynamic simulation technique; process industry; chemical engineering; application

20 世纪下半叶以来,能源和原材料日益紧张,环境污染日益加剧,传统化学工程方法难以适应对复杂系统整体行为的研究以及在此基础上开展的过程系统实时分析与控制。在复杂的化工生产过程中,稳态过程只是相对的、暂时的,而实际过程总是存在各种各样的波动、干扰以及条件的变化。因而化工过程的动态变化是必然的、经常发生的,由此带来的一些问题用稳态模拟的思路无法解决,必须由过程的动态模拟来完成。在这种形势下,动态过程模拟技术应运而生,并在过程操作特性的研究方面显示出独特的优越性。

## 1 动态模拟技术在化学工程中的应用

### 1.1 动态特性的研究

动态模拟技术广泛应用于对各种过程系统的行为分析、预测与决策,研究过程系统参数随时间的变化规律,从而得到有关过程的正确设计方案或操作

步骤。过程系统的动态特性并非完全可以从静态特性或者根据经验推断得出,而且往往这类推断是不全面的,有时甚至是错误的。而认识判断的失误往往是导致事故发生的根源,因而对于重要的过程,采用动态模拟技术深入研究与分析其动态特性是十分必要的。

### 1.2 化工生产过程的开、停车研究

在化工生产过程中,开、停车是极其重要的环节。在这一环节中不仅有大量的设备需要开始投入使用或停止操作和运转,而且有大量的物料需要处理。任何疏忽或处理不当都极易产生各种各样的事故,从而导致严重的经济损失或人员伤亡。对于大型的石化装置,每开、停车一次,即使是完全正常,也会造成数十万元、甚至数百万元的经济损失,因此生产管理者无不对开、停车过程给予高度重视。然而在没有应用动态模拟技术的情况下,开、停车过程主要根据经验进行操作,不可能、也不允许直接在装置

上做任何实验。开、停车步骤是否完全正确、恰当,很少能从理论上预测。因而对于操作者来说,积累丰富的经验是至关重要的。

要解决这种问题,通常有两种思路。一是建立生产过程物理模型,在物理模型上研究过程的操作行为。但这种方法耗资、耗时,而且建立复杂系统的物理模型的难度很大。另外一种思路即是采用动态模拟技术,首先建立准确描述过程行为的动态数学模型,然后用其研究开、停车过程的动态行为,借助动态模拟技术系统地探讨和分析开、停车的特性,从而指导开、停车过程的实施。采用动态模拟技术,可以缩短开停车时间,尽快达到稳定操作状态或安全停车;避免可能产生的误操作或事故;减少不合格产品;保证开停车过程的正常进行。

建立动态仿真系统是动态模拟技术的一项重要用途。动态仿真系统用来模拟装置的实际生产,它不仅能得到稳态的操作情况,更重要的是,借助动态仿真技术可以随意改变某些可调量,人为造成过程的动态变化条件,从而系统地考察干扰存在时系统行为的变化,其仿真效果一目了然。因而动态模拟技术已经在教学、生产过程培训以及生产过程调优方面得到广泛应用。

### 1.3 设计先进控制系统

先进控制系统起源于20世纪70年代末,并在90年代获得了广泛应用。现今控制系统设计的关键是了解装置的动态特性,而装置的动态特性可以通过在线过程识别或者过程动态模拟获得。动态模

拟的发展使得人们可以用计算机模拟代替现场动态测试,不仅节省了大量资金,加快了动态特性模拟数据的获取,而且对生产无任何干扰,理论上可以取得任何所需的数据。国外已将动态模拟技术应用于先进控制系统的设计,尤其是在著名的过程控制公司如美国 Setpoint 公司和 DMC 公司(均于1996年为 Aspen Tech 公司兼并),在过程的先进控制领域开展了卓有成效的研究。

### 1.4 质量交换网络综合<sup>[1]</sup>

质量交换网络综合是过程系统工程的新兴分支方向。质量交换网络综合在化学工业中广泛地应用于进料预处理、产品分离及精制有用物质的回收等。近年来,它的应用则主要侧重于工业过程的废物最小化和清洁生产。几种重要的质量交换网络引起了人们极大的兴趣,它们是伴随反应过程的动态质量交换网络、动态热分离网络及动态废物截断分配网络等。

## 2 化工动态模拟技术的研究进展

### 2.1 国外研究状况

国外化工过程模拟始于20世纪50年代中后期。1958年,美国 Kellogg 公司率先推出化工过程模拟程序——灵活流程模拟系统(flexible flowsheeting),并在当时的化学工程界产生了很大的影响。随后出现了一系列稳态流程模拟软件,如 ASPEN、PROCESS、PRO-Ⅱ、SPEED UP、HYSIM 等,在化学工程领域产生了重要影响并发挥了巨大的作用。有的

(上接第13页)

- [18] Yekta A, Xu B, Minnik M A. The structure of telechelic associating polymers in water[A]. In: Webber S E, Munk P, Tuzar Z. Eds. Solvents and self-organization of polymers. Dordrecht/Boston/London: Kluwer Academic Publishers, 1996. 319 ~ 325
- [19] 冯玉军,罗平亚,董兆雄,等.疏水缔合水溶性聚合物溶液结构的研究[C].第二届油气藏开发工程师国际学术研讨会,南充, 1999
- [20] Jimenez-Regalado E, Selb J, Candau F. Phase behavior and properties of aqueous solutions containing mixtures of associating polymers [J]. *Macromolecules*, 2000, 33: 8720 ~ 8730
- [21] Yamamoto Hiroshi, Morishima Yotaro. Effect of hydrophobe content on intra- and interpolymer self-associations of hydrophobically modified poly(sodium 2-(acrylamido)-2-methylpropanesulfonate) in water [J]. *Macromolecules*, 1999, 32: 7469 ~ 7475
- [22] Bock J, Valin P L, Pace S J, et al. Hydrophobically associating polymers [A]. In: Stahl G A, et al. Water-soluble polymer for petroleum recovery. New York: Plenum Press, 1988. 147 ~ 160

- [23] Kim H S, Lau W, Kumacheva E. Interaction forces between adsorbed layers of associative polymer [J]. *Macromolecules*, 2000, 33: 4561 ~ 4567
- [24] Abraham T, Gisson S, Gohy J F, et al. Adsorption kinetics of a hydrophobic-hydrophilic diblock polyelectrolyte at solid-aqueous solution interface: A slow birth and fast growth process [J]. *Macromolecules*, 2000, 33: 6051 ~ 6059
- [25] 王健,郑焰,冯玉军,等.新型聚合物驱油性能评价[J]. *油田化学*, 1999, 16(2): 149 ~ 153
- [26] 岳钦艳,赵华章,高宝玉,等.有机高分子絮凝剂 P(DMDAAC-VTMS)和 P(DMDAAC-AM-VTMS)的合成与絮凝性能研究[J]. *工业水处理*, 2001, 21(3): 16 ~ 19
- [27] 黄雪梅,许国强.疏水缔合型聚合物 P(AM/TA)溶液性质的研究[J]. *精细化工*, 2000, 17(3): 152 ~ 154
- [28] 史向阳,吴世康,孙曹民.疏水化修饰的聚 N-异丙基丙烯酰胺高分子的水溶液性质研究[J]. *高分子学报*, 1999(2): 200 ~ 215
- [29] 陈尔凡,赵常礼,程远杰,等.甲基丙烯酸二甲氨基乙酯溴代烷基铵盐与苯乙烯共聚合的研究[J]. *高分子学报*, 1999(5): 588 ~ 594 ■

软件至今仍然是某些设计部门的必不可少的工具。

动态模拟的发展较稳态模拟略迟。有关动态模拟研究成果的报道出现于 70 年代初期,随着计算机的普及和计算能力的不断提高,加上近似计算方法(如有限元法、有限差分法、有限体积法等)的发展,基于数值计算的计算流体力学(computational fluid dynamics, CFD)方法形成,并得到了蓬勃的发展。比如,应用于指导丁二烯抽提装置开停车的 SYNSYS 系统;用于可控 CSTR 反应器的 DYFLO 软件以及用于 SO<sub>2</sub> 吸收装置开停车的 DYSCO 软件等。这些初期的动态模拟软件虽然都取得了很好的效果,但由于处理的变量少,应用范围狭窄,只能对个别具体装置进行动态研究。这一时期尚未能形成通用化的动态模拟系统。

进入 80 年代后,化工过程模拟走向了它的成熟期,众多动态模拟软件纷纷推出,模拟软件的开发、研制走向专业化、商品化。模拟计算的准确性、可靠性大大加强,应用范围不断拓宽,功能更加丰富,使用愈加方便。90 年代是化工动态模拟的深入发展期,从“离线”走向“在线”,从稳态模拟发展到动态模拟和实时优化,从单纯的离线稳态计算发展到和工业装置紧密相连的动态模拟。这一时期,动态模拟得到了长足的发展,新的模拟软件不断问世。如加拿大 HYPROTECH 公司的 HYSIS、美国 Aspen Tech 公司的 Custom Modeler 和 DYNAMICS 等。Aspen Tech 公司的 Aspen Plus, SIMSCI 公司的 Pro- II (ProVision) 是当今国际上较为流行的两大过程模拟软件。Matlab 软件中的数学模型和动态模拟软件 Simulink 是国外软件控制工程界最受欢迎的软件之一,它包括了目前最新的数值计算技术和软件开发工程技术,特别是在面向图形对象编程(graphic object oriental programming, GOOP)和图像用户界面(GUI)技术方面尤为突出。该软件中虽然不包括化工流程和单元设备的内容,但却值得我们在开发动态流程模拟软件时参考和采用。

20 世纪 90 年代,动态模拟开始应用于聚合过程的模拟和计算。其中自 Polymer Plus 被 Aspen Tech 公司吞并后,与 Aspen Custom Modeler™或 Aspen Dynamics 相结合,发展成为聚合过程的动态模拟软件。加拿大 Mc Master 大学开发的 POLYPRO 已经商业化,CiT(Computing in Technology GmbH)的 Wulkow 开发的 PREDICI<sup>[2]</sup>具有过程模拟和参数估计功能。还有一些软件包,如 Gao J 和 Penlidis<sup>[3,4]</sup>开发的自由基均聚/共聚模拟软件包,Pertsinids 等人<sup>[5]</sup>开发的专用

于低密度聚乙烯(LDPE)生产过程的 CAD 软件包,并已用于实际设计工作。

## 2.2 国内研究状况

我国化工过程模拟起始于 20 世纪 60 年代末,整个 70 年代是国内自行开发模拟软件的大发展时期。随着计算机硬件的飞速发展,工程技术软件从限于几个公式、几百个语句的程序发展成为具有良好界面、多种计算机语言、多功能的软件系统。1977 年原化工部第五设计院在国内率先推出了大型烃类分离模拟系统,并成功地用于大型 30 万 t/a 乙烯装置的计算。至 70 年代末 80 年代初,国内模拟软件水平已接近国外的先进水平。更深层次的模拟技术——先进控制和动态模拟,却起步于 20 世纪 90 年代,并且仅仅在为数不多的大型工业装置中实现,实时优化基本上处于空白。如何赶上世界先进水平,是今后系统工程界值得深入思考的问题。

国内化工模拟软件的开发力量主要集中在化工设计院、大型炼油石化企业和大专院校。

清华大学开展了燃煤循环流化床(CFBC)反应系统的模拟研究。CFBC 锅炉由于其燃煤适应性广,高效、低污染等方面的优点而受到国内外学术界的普遍重视,并且正在不断向大型化发展,经过多年努力,其机理模型的研究已取得了丰富的成果。如李政建立了循环流化床锅炉通用、整体数学模型<sup>[6]</sup>;倪维斗等人采用该模型对清华大学研制的 220 t/h CFBC 的性能进行了仿真预测,其结果在趋势及数量级上与国外经试验验证的结果基本一致<sup>[7]</sup>。

北京化工大学在动态模拟方面也进行了长期努力并取得了良好效果。其中,在动态行为研究的一个重要方面——化学反应器人为非定态反应技术模拟方面取得了一定的成果。化学反应器人为非定态反应技术与传统的定态操作相比,除了流程的集成度很高外,反应热的利用率也较高,由于其对外界的抗干扰能力较强,运行更加稳定,显示了在改善反应系统时均性能方面的巨大潜力。继前苏联将此技术成功地应用于工业大规模低浓度 SO<sub>2</sub> 的自热催化氧化后<sup>[8]</sup>,国际上有许多学者对其他反应体系进行了非定态反应操作特性的实验研究。陈晓春等人<sup>[9]</sup>完成了合成甲醇两功能集成反应器的动态模型化研究(化学反应与直接式蓄热功能),并取得了较好的结果,为这种反应过程的行为研究奠定了基础。同时,北京化工大学在动态流程模拟方面也进行了广泛而深入的研究。如 30 万 t/a 合成氨生产过程、13 万 t/a 尿素生产过程、催化重整过程、聚丙烯液相本体聚

合过程、氯乙烯单体和聚氯乙烯的生产过程、空气深冷分离生产高纯氮气过程以及空气变压吸附制备氮气过程的动态模拟等。近10年来国内的仿真培训器发展很快,北京化工大学还开展了从动态模拟转向仿真培训器的研发,并开发了燕山烟机发电仪表培训器,并逐步开发、完善了有自主知识产权的动态模拟软件平台<sup>[10]</sup>。国防科技大学曾明等人<sup>[11,12]</sup>把序贯模块法应用于实时仿真系统,在实际应用中取得了良好效果。

### 3 今后发展方向

当前,我国在过程的模拟计算方面已经进行了一系列工作,并取得了令人瞩目的成绩。但是,作为化学工程学科中较为年轻、发展最为迅速的子学科领域,还存在着不少问题。目前它在工业界还没有得到广泛的应用。动态模拟软件的功能应当与动态优化思路相结合,由于研究经费短缺、研究手段相对落后,流程模拟技术与应用领域的发展受到了一定程度的限制。

从我国的现状和已有的成果看,针对我国过程工业调优和控制基础较差的特点,在推行计算机集成过程系统中,只有应用人工智能化的优化和控制方法,对现有工业装置、测量和控制设备进行特殊要求并降低投资成本,才有可能走出一条低投入、高产出的路子。而引进专业软件的改进、消化吸收和二次开发是国内设计单位走向国际,并与国际工程公司接轨的必要步骤。

动态计算机网络管理将实现整个炼厂的连续实时优化,这种动态模拟与管理技术将向其他大型石油、化工领域深度发展。随着计算机的迅速升级和网络技术的迅速发展,石油化工企业将从中得到最大程度的优化。

传统的过程系统工程多局限在对化工生产过程从设计、操作或控制层面上进行建模与优化,均属技术领域。近年来,随着国际市场的竞争愈演愈烈,人们正在试图通过改进企业业务过程以降低成本,提高产品质量和缩短市场的响应时间,从而保持在竞争中的优势。因此,要在企业内部将工作过程、人的参与以及二者间的相互作用、软件与硬件间的相互作用系统集成起来的同时,将企业本身与其所生存的环境相结合,通过过程系统技术与管理的综合集成来实现过程企业整个供应链的整体优化和可持续发展,充分发挥动态模拟的优势<sup>[13]</sup>。

计算机集成制造系统(computer integrated manufacture system, CIMS)是今后发展方向之一。未来的过程系统综合研究热点在以下3个方面:①工艺流程和生产方案的合成(process synthesis),主要目的是寻求技术先进可靠、操作优化合理的工艺流程,这方面的成果主要应用于小规模、多品种、多批量、流程复杂、高附加值产品的生产过程,如农药、医药、精细化工等部门的优化排产问题;②能量系统集成(process energy integration),主要是对能量系统进行耦合集成,降低能耗;③从过程集成思路出发,结合生态工业园区实例进行动态流程模拟,在此基础上开展不确定条件下质量交换网络随机模型优化方法的研究,以及进行基于模糊知识推理的过程综合是十分重要的课题<sup>[14]</sup>。

### 参考文献

- [1] 薛东风,陈理,袁一,等.质量交换网络综合[J].现代化工,2001,21(6):16~19,21
- [2] Wulknaw M. The Simulation of molecular weight distributions in polyreaction kinetics by discrete Galerkin method [J]. Macromol Theory Simul, 1996, 5(3):393~416
- [3] Gao J, Penlidis A. A comprehensive simulator/database package for review free-radical homopolymerization [J]. J Macromolecular Science: Rev Macromol Chem Phys, 1996, 36(2):199~404
- [4] Gao J, Penlidis A. A comprehensive simulator/database package for reviewing free-radical copolymerizations [J]. J Macromolecular Science: Rev Macromol Chem Phys, 1998, 38(4):651~780
- [5] Pertsinidis A, Papadopoulos E, Kiparissides C. Computer aided design of polymer reactors [J]. Comput Chem Eng, 1996, 20(s1):449~454
- [6] 李政. 循环流化床锅炉动态仿真实验平台的研制[J]. 清华大学学报, 1999, 39(3):27~34
- [7] 倪维斗,李政. 220 t/h 循环流化床锅炉性能的仿真预测[J]. 动力工程, 1996(2):22~25
- [8] Borekov G K, Matros Yu Sh. Forced unsteady-state process in heterogeneous catalytic reactors [J]. Catal Rev-Sci and Eng, 1993, 25(4):551~590
- [9] 陈晓春,饶国瑛,李成岳. 合成甲醇单元过程瞬态动力学的模型化[J]. 化工学报, 1999, 50(2):145~158
- [10] 王健红,陈晓春,魏杰,等. 化工装置动态模拟与优化工艺软件平台[J]. 化工进展, 1997, 16(4):49~51
- [11] 曾明,龚时雨,李希平. 序贯模块法用于化工仿真培训[J]. 化工进展, 1997, 16(4):39~42
- [12] 曾明. 化工仿真培训支持系统算法预算法库设计[D]. 长沙:国防科技大学, 1996
- [13] 黄仲涛,李雪辉,王乐夫. 21世纪化工发展趋势[J]. 化工进展, 2001, 20(4):1~4
- [14] 金涌,汪展文,王金福,等. 化学工程迈入21世纪[J]. 化工进展, 2000, 19(1):5~10