

目 录

第 1 章绪论/1

- 1.1 系统工程与过程系统工程 1
- 1.2 现代化工过程工业的特点和过程系统工程的基本术语 3
- 1.3 过程系统工程的研究对象和内容 5
- 1.4 化工过程系统的模型构造及其求解方法 6
- 1.5 过程系统工程的应用及流程模拟系统简介 7
- 参考文献 15

第 2 章化工单元过程的模型化及其单元模块/16

- 2.1 模型化的基本概念 16
 - 2.1.1 机理模型、统计模型和混合模型 16
 - 2.1.2 模型的数学描述 18
 - 2.1.3 单元模型的自由度 19
- 2.2 化工单元模型和模块 20
- 参考文献 34

第 3 章过程系统的结构分析/35

- 3.1 过程系统的结构描述 36
 - 3.1.1 图论的基本概念 37
 - 3.1.2 图的矩阵表示法 40
- 3.2 系统的分隔与块间排序 41
 - 3.2.1 系统分隔的升幂法 42
 - 3.2.2 系统分隔的邻接矩阵通路搜索法 48
 - 3.2.3 系统分隔的树搜索法 52
- 3.3 不可再分块的切断与块内排序 54
 - 3.3.1 无多余切断 56
 - 3.3.2 变量数最少无多余切断 57
 - 3.3.3 切断流股变量数最少的切断 58
 - 3.3.4 切断后不可再分块内的排序 58
 - 3.3.5 不同切断方式对收敛特性的影响 59
- 3.4 系统结构分析实例 60
 - 3.4.1 甲醇合成系统的结构分析 60
 - 3.4.2 环氧乙烷提纯系统的结构分析 63

参考文献 66

第 4 章序贯模块法/67

- 4.1 经典序贯模块法的迭代层次与系统的自由度 67
- 4.2 不可再分块迭代的收敛方法 71
 - 4.2.1 直接迭代法 72
 - 4.2.2 加权直接迭代法 74
 - 4.2.3 严格 Wegstein 法 74
 - 4.2.4 Newton 法 78
 - 4.2.5 离散 Newton 法 80
 - 4.2.6 一维搜索法 82
 - 4.2.7 拟 Newton 法 84
 - 4.2.8 一种改进的非线性方程组数值解法 88
 - 4.2.9 其他可用于过程系统稳态模拟的算法 88
 - 4.2.10 各种算法性能比较 89
- 4.3 用序贯模块法解设计问题 91
- 4.4 序贯模块法系统模拟应用实例 94
 - 4.4.1 CO₂ 吸收、再生工段的综合模拟策略 94
 - 4.4.2 微加压与升压氨合成回路的模拟 96
- 参考文献 99

第 5 章联立方程法/100

- 5.1 过程系统数学模型的特点 100
- 5.2 过程系统数学模型方程组的建立 102
- 5.3 联立方程组中微分方程的处理 102
- 5.4 初值的选取及变量物理意义的限制 103
- 5.5 过程系统非线性方程组的降阶 103
- 5.6 非线性方程组迭代解法 108
 - 5.6.1 线性化的方法 108
 - 5.6.2 基本迭代法 109
- 5.7 稀疏矩阵的 Gauss 消去法 111
 - 5.7.1 Gauss 消去法 112
 - 5.7.2 三角形(LU)分解法 113
 - 5.7.3 选主元的 Gauss 消去法 115

- 5.7.4 病态系数矩阵的迭代改进 117
- 5.7.5 稀疏矩阵的压缩存储 118
- 5.7.6 消去过程中稀疏性的保持与解的精度兼顾 121
- 5.8 联立方程法的潜在优势 128
- 参考文献 129

第6章 联立模块法/130

- 6.1 联立模块法的基本思路及发展概况 130
- 6.2 两种不同的切断方案及三种不同程式的近似线性方程组 132
 - 6.2.1 全切断方案 132
 - 6.2.2 环路切断方案 133
 - 6.2.3 程式一：全切断全方程形式 133
 - 6.2.4 程式二：全切断去连接形式 135
 - 6.2.5 程式三：环路切断形式 135
 - 6.2.6 不同程式的讨论 136
- 6.3 线性化方法 137
 - 6.3.1 摄动法求 Jacobi 矩阵 137
 - 6.3.2 解析法求子 Jacobi 矩阵 138
 - 6.3.3 模块摄动法求近似 Jacobi 矩阵 138
 - 6.3.4 对角块摄动法求近似 Jacobi 矩阵 139
 - 6.3.5 组合单元摄动法 140
- 6.4 联立模块法结构分析的特点 140
- 6.5 联立模块法与序贯模块法的比较 141
- 6.6 三层法 142
- 6.7 模拟方法研究实例——环氧乙烷生产过程模拟 143
- 参考文献 148

第7章 化工系统的最优化/150

- 7.1 化工系统最优化问题的数学描述 151
- 7.2 化工系统最优化问题数学模型的一般形式 159
- 7.3 最优化数学方法分类 162
- 7.4 无约束最优化方法 164
 - 7.4.1 目标函数的几何形态 164
 - 7.4.2 单变量函数的优化 165

- 7.4.3 多变量函数的优化策略 175
- 7.4.4 变量轮换法 176
- 7.4.5 负梯度法 178
- 7.4.6 单纯形法 180
- 7.4.7 Newton 法 183
- 7.4.8 拟 Newton 法——秩一逆修正法 184
- 7.4.9 变尺度法 185
- 7.5 有约束多变量函数的最优化方法 187
 - 7.5.1 有约束多变量函数的最优化问题的表达 187
 - 7.5.2 有约束优化问题的求解策略及极小的必要条件 187
 - 7.5.3 Lagrange 乘子法 189
 - 7.5.4 罚函数法 191
 - 7.5.5 既约梯度法——一种求解线性规划问题的方法 192
 - 7.5.6 广义既约梯度法 (GRG) 193
 - 7.5.7 逐次二次规划 (SQP) 197
- 7.6 化工大系统的最优化策略 202
 - 7.6.1 大系统最优化的基本策略 202
 - 7.6.2 两级分解协调法——一种不可行路径法 204
 - 7.6.3 黑箱法 208
 - 7.6.4 可行路径的联立方程法 208
 - 7.6.5 单元模块逼近法 209
 - 7.6.6 不可行路径序贯模块法 209
 - 7.6.7 不可行路径联立方程法 211
 - 7.6.8 不可行路径双层法 212
 - 7.6.9 过程系统最优化实例——低压脱甲烷系统优化分析 213
- 7.7 过程系统的统计调优 217
 - 7.7.1 调优目的及应用场合 218
 - 7.7.2 调优方法简介 218
 - 7.7.3 化工过程统计调优的思路 219
 - 7.7.4 附加试验点的设计——均匀试验设计 222
 - 7.7.5 不良数据剔除——数据筛选 224
 - 7.7.6 统计回归——模型参数估值和逐步回归方法 227
 - 7.7.7 模型的判别——统计检验 231
 - 7.7.8 统计调优举例 234

参考文献 236

第 8 章化工过程系统的合成/237

8.1 过程合成的基本概念 238

8.2 分离序列的合成 240

8.2.1 分离序列的基本概念 240

8.2.2 分支定界法合成分离序列 244

8.2.3 调优法合成分离序列 248

8.3 换热网络的合成 250

8.3.1 问题的提出 251

8.3.2 基本概念 253

8.3.3 以能量回收最优为目标的换热网络合成方法 260

8.3.4 以节能与设备投资为综合目标的换热网络合成 262

8.3.5 流股分割换热器网络合成方法 263

8.4 系统的热集成 265

8.4.1 热泵精馏系统的热集成 266

8.4.2 热机与换热网络的系统匹配 270

8.4.3 热泵与换热网络的系统匹配 271

8.4.4 精馏塔的冷凝器、再沸器与换热网络的匹配 272

8.5 其他类型的过程合成简介 274

8.5.1 复杂反应系统中提高主产物选择性的策略 275

8.5.2 反应器网络合成 276

8.5.3 用水网络的合成 277

8.5.4 反应路径的合成 277

8.5.5 全流程合成的策略 278

参考文献 279

附录 A 上机作业与习题/280

附录 B 学习思考要点/285