

化工过程模拟及软件应用

杨鑫
化学化工学院
重庆理工大学
第一实验楼A203
cheyangxin@cqut.edu.cn

< 1 >

化学工业是现代产业，还是传统产业？



- 现代与传统重要的区别在于：思想、方法、模式和资源

< 2 >

你们平时用计算机来做什么？



< 3 >

化工专业的学生需不需要学计算机语言？

学到什么程度？

- 化工专业的学生应该具有用计算机语言来表达专业思想的能力，正如自然语言和数学语言一样。
 - 语言文字-具象逻辑（中、英文）、专业符号（分子式、方程式）
 - 数学语言-数理逻辑、平衡方程、机理模型、统计学模型
 - 计算语言-计算机算法、程序、人工智能、数字孪生
- 化工专业的人提出专业模型，计算机专业的人进行翻译
- 实践证明，高效的表达工具只有掌握在自己真正懂得人手中，才能真正去探索最深刻的领域。

*吉旭，四川大学，PSE2020会议报告

< 4 >

课程说明



课程地位：必修课，专业核心课程，40学时

前期修课：高等数学、线性代数、计算机程序基础、化工原理、化学反应工程、化工热力学、分离工程 等

考察方式：

- 平时表现占10%
- 大作业占40%
- 实验（上机）成绩占50%

< 5 >

课程说明



■ 教材：张卫东等主编，《化工过程分析与合成》

■ 参考材料：

- 方利国著，《化工过程系统分析与合成》，化学工业出版社，2013年
- 许国根，许萍萍著，《化学化工中的数学方法及MATLAB实现》，化学工业出版社，2008
- 孙三义编著，《化工流程模拟实训—Aspen plus教程》，化学工业出版社，2012
- 房德中，朱建业著，《化工过程分析与模拟》，化学工业出版社，1991年
- 张卫东，孙巍，刘君腾著，《化工过程分析与合成》，化学工业出版社，2011
- 杨友麒，项曙光著，《化工过程模拟与优化》，化学工业出版社，2006
- 彭秉璞著，《化工系统分析与模拟》，化学工业出版社，2001
- 平经著，《过程系统工程》，华东理工大学出版社，2009
- 由文德，王晓红著，《化工过程计算机应用基础》，化学工业出版社，2007
- 陈志著，《人工智能技术》，清华大学出版社，2010
- 托马斯F.埃德加著，《化工过程优化(Optimization of Chemical Processes)》，(原著第2版国外名校名著)，化学工业出版社，2005
- 温正编著，《Fluent流体计算应用教程》，清华大学出版社，2013
- 吴光中著，《FLUENT基础入门与案例精通》，电子工业出版社，2012
- 王福军等编，《计算流体力学分析—CFD原理应用》，清华大学出版社，2006
- 韩占忠等编，《Fluent-流体工程仿真计算实例与应用》，北京理工大学出版社，2009
- 王瑞金等编著，《Fluent技术基础与应用实例》，清华大学出版社，2007

< 6 >

课程作用



计算机在化工专业的学习、设计和生产中的作用：

- 文献检索、查询、管理 (Endnote)
- 化工制图：AutoCAD, Origin
- 化工数值计算：物性参数计算、数据处理、相平衡计算，物料衡算、能量衡算…… (Matlab)
- 化工过程模拟、设计、控制 等 (Aspen, Matlab, Ansys)
- 化工过程优化 (Matlab)

< 7 >

课程作用



- 适应当代化学工业数字化和信息化的趋势
- 利用好数学和计算机两大工具
 - 数学：高等数学、矩阵理论、数值计算、运筹学、数学建模……
 - 计算机：化工软件、编程能力……
- 培养系统思考的能力，学会用系统工程的观念方法和常用计算机软件去解决化工过程系统的设计、开发、操作、控制等问题
- 学习、科研、工作
- 扩大就业途径

< 8 >

课程内容

- 绪论
 - 化工过程数值计算 (MWORKS/Syslab)
 - 化工过程系统的优化 (MWORKS/Syslab, Excel)
 - 化工过程系统的动态模拟与分析 (Aspen, MWORKS/Sysplorer)
 - 化工过程换热网络合成 (Aspen)
 - 化工过程系统的流体力学模拟 (Ansys)
- 杨鑫
20学时
- 化工过程系统的稳态模拟与分析 (Aspen)
 - 化工过程制图 (AutoCAD)
- 罗华政
20学时

< 9 >

杨鑫简历

- 1996 ~ 2000 青岛科技大学, 化学工程系
化学工程与工艺, 学士 (ECSS)
- 2000 ~ 2003 青岛科技大学, 计算机与化工研究所
化学工程, 硕士 (GAMES)
- 2003 ~ 2005 上海国际化建工程咨询公司
化学工程师, 化工设计 (Proll, Hysys, AutoCAD)
- 2006 ~ 2011 新加坡国立大学, 化学与生物分子工程系
化学工程, 博士 (Matlab)

论文题目: LINEAR AND ADAPTIVE **CONTROLLER** DESIGNS FROM PLANT DATA, (**Matlab**) 导师: Chiu Min-Sen (**过程控制**)

中国系统工程学会过程系统工程专业委员会委员

< 10 >

过程系统工程

Process Systems Engineering, PSE

< 11 >

PSE基本概念

过程工业 (流程工业)

- ① 物质化学/物理/生物性质转化
- ① 新的物质
- ① 流程性材料 (气体/液体/粉体)
- ① 连续操作

装备工业

- ① 物件的加工和组装
- ① 物质的内在性质不变
- ① 硬件产品
- ① 非连续操作

过程 (Process): 对原料进行某些物理或化学变换, 使其性能发生预期的变化, 从而增加了附加的价值, 这种操作或处理称为“过程”



PSE基本概念

- **系统**：一定条件下完成一定功能或实现一定目的，由若干互相联系、互相影响的部分要素组成的**整体**。
- 系统（System）为了某种目标，由共同的物质流股或信息流联系在一起的基本单元组合而成的整体称为系统。
- **哲学观点**：系统是由相互作用的要素组成的具有特定结构、功能的有机整体。

系统=f(组成要素，结构，功能)
- **系统工程**：从**全局**的观点出发，用定量和定性相结合的方法，从技术、经济、社会的角度，对一个系统作全面的**模拟、分析、评价、优化和控制**等。
- **研究内容**：研究解决系统问题的方法，而不是讨论构成系统的基本单元的基本原理、规律和特性
- **特点**：系统在整体上具有其组成部分所没有的性质，即系统的**整体性**。

系统工程与钱学森

- 二战时的运筹学，1950年代MIT开设《系统工程》课程
- 1978年9月27日钱学森等在《文汇报》发表了《组织管理的技术——系统工程》

I. Prigogine

H. Haken

欧洲学派

美国学派

中国学派

钱老关于“综合集成”的思想、方法的提出，要比国外领先10年左右。
综合集成技术是从整体上考虑并解决问题的方法。

系统工程与中国哲学

- 中国文化的熏陶和继承
- **道德经**：
 - 道可道，非常道。名可名，非常名。
 - 道生一，一生二，二生三，三生万物。
- **周易**：
 - 易穷则变，变则通，通则久。是以自天祐之，吉无不利。
 - 君子安而不忘危，存而不忘亡，治而不忘乱，是以身安而国家可保也。
- **庄子**：
 - 南海之帝为倏，北海之帝为忽，中央之帝为浑沌。倏与忽时相与遇于浑沌之地，浑沌待之甚善。倏与忽谋报浑沌之德，曰：“人皆有七窍，以视、听、食、息，此独无有，尝试凿之。”日凿一窍，七日而浑沌死。

*杨晓光，中国科学院数学与系统科学研究院，PSE2022会议报告

PSE基本概念

- 过程系统（Process system）
 - 使原料进行物理的乃至化学的变化，从而由低价值的原料变成高价值的产品的系统，由共同的物质流股或信息流联系在一起的基本单元组合而成的整体。
 - 不仅指传统的化工过程系统，更涵盖这一类型的整个过程网络，如化工、冶金、材料、生化、医药的生产过程。
- 过程系统工程
 - 系统工程的一个分支
 - 把系统工程的一套研究方法、观点、思路应用到过程系统上。

PSE基本概念



- 状态变量 (State variables) : 描述系统所处状态(温度、压力、浓度...)的变量, 其值往往不能自由设定。
- 决策变量 (Decision variables) : 数值可以由设计者给定的变量。
- 参数 (Parameter) : 代表过程或其环境的某种性质, 而且可以被赋予一定数值的量称为“参数”, 其中也包括方程式中的常数或系数。
- 流程 (Flowsheet) : 又称作流程图, 原指将各种单元设备等用图形符号画出, 并示出其间联接关系, 从而将整个化工系统的构成情况描绘出来的图形表达; 现也用来一般地指一个化工系统的构成情况。

< 17 >

化学工程学科发展



化学工程学科发展三次突破

- 单元操作: 把单元操作从各种工艺过程中抽象出来
- 传递过程: 把传递过程从各种单元操作中抽象出来, “三传一反”特征确立
- 过程系统工程: 把各种单元组成的过程系统作为整体来研究
 - 以处理物料-能量-资金-信息流的过程系统为研究对象, 其核心功能是过程系统的组织、计划、协调、设计、控制和管理。目的在整体上达成技术及经济上的最优化, 以符合可持续发展的要求。

< 18 >

Process systems engineering, PSE



- Process Systems Engineering is concerned with the improvement of decision making processes for the creation and operation of the chemical supply chain.
- It deals with the discovery, design, manufacture and distribution of chemical products in the context of many conflicting goals.
- -----Ignacio E. Grossmann and Arthur W. Westerberg, **Research Challenges in Process Systems Engineering**

< 19 >

化学工程经过归纳、综合和与其它知识的交叉, 形成了以传递和反应为主且还在不断发展的**三传一反+X**的学识基础. 这一学识基础的应用对象已远远超出了化工起家时的化学产品, 覆盖了所有物质的物理和化学加工的工艺, 将**化学工程**提升至**过程工程**。



——郭慕孙

郭慕孙 (1920-2012), 中国科学院过程工程所原所长, 化学工程专业.

2008年被美国化学工程师学会评选为化学工程百年开创时代50杰出化工科学家 (Fifty Chemical Engineers of the “Foundation Age”) 之一

< 20 >

PSE发展简史



- **1961-1979:**
 - 1961 第一次出现在 AIChE Symposium Series.
 - 1968年Rudd和Watson出版 "Strategy of process engineering"
 - 1969年矢木荣和西村肇出版 "过程工程学", 明确了学科范畴为:
过程系统分析、过程综合和过程控制;
- **1979-2000:** 石油危机, 应用数学及计算机技术发展, PSE由理论走向应用; 1982年日本京都第一届国际过程系统工程会议
- <http://www.pse.org.cn/>
- **2000-至今:**
 - 范围从颗粒、薄膜、气泡到车间、工厂, 微观方面向分子模拟、产品设计扩充 (nm级), 宏观方面向整个公司、整个供应链、一个工业园区乃至全球气候变化扩充;
 - 研究内容: 从物理-化学制造过程扩大到管理业务过程 (Business Process); 最优化成了多目标优化

< 21 >

Roger W. H. Sargent: "Father" of PSE



- 1966-1992: Courtaulds Professor of Chemical Engineering at Imperial College London
- 1975-1988: Head of the Department of Chemical Engineering
- 1989-1992 (retired): Director of the Centre for Process Systems Engineering (which he founded)

• Born on 14
October 1926

✦ He has extraordinarily large family tree of research students: he supervised **43** research students, and several of these first-generation students have gone on to establish large research schools of their own.

✦ By 2008, this family tree extended to **seven generations** and **639 students** and former students.

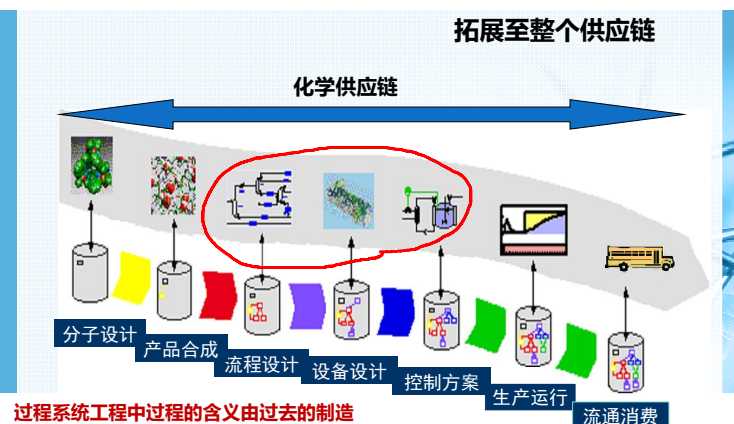
< 22 >

过程系统工程与其它学科的关系



< 23 >

过程系统工程的发展前景与方向



< 24 >

Significant accomplishments in PSE



Process Design

- › Synthesis of energy recovery networks
- › Synthesis of distillation systems (azeotropic)
- › Synthesis of reactor networks
- › Hierarchical decomposition flowsheets
- › Superstructure optimization
- › Design multiproduct batch plants

Process Control

- › Model predictive control
- › Controllability measures
- › Robust control
- › Nonlinear Control
- › Statistical Process Control
- › Process Monitoring
- › Thermodynamics-based control

Process Operations

- › Scheduling of process networks
- › Multiperiod planning and optimization
- › Data reconciliation
- › Real-time optimization
- › Flexibility measures
- › Fault diagnosis

Supporting tools

- › Sequential modular simulation
- › Equation based process simulation
- › AI/Expert systems
- › Large-scale nonlinear programming (NLP)
- › Optimization of differential algebraic equations (DAEs)
- › Mixed-integer nonlinear programming (MINLP)
- › Global optimization

< 25 >

化工过程分析与综合



- 化工过程分析：分析过程系统的运行机制、影响因素、过程模型的数学描述、目标函数的建立，最佳操作参数等等。
- 化工过程综合（合成）（Process synthesis）：反应路径合成，换热网络合成，分离序列合成，过程控制系统合成，解决由各个单元过程合成总体过程系统的任务。给定输入、输出或仅给定其中之一，求取能使目标函数最优的最佳过程系统，此类优化称为过程系统合成或过程系统综合（Process synthesis）
- 具体事例？

< 26 >

化工过程模拟



- 模拟（Simulation）：用一个更为方便、经济而性能相似的系统B来模仿系统A的性能的方法，试验系统B称为系统A的模型（Model）。若模拟系统B是一台计算机，它所演算的数学方程组可以足够准确地描述过程A，则称为数学模拟。
- 化工过程模拟分析：在确定过程系统的结构及其子系统特性的前提下，借助计算机和系统模型，通过数学模拟的方法，推测特定系统的特性，确定其各部位信息和总体技术经济指标的方法，简称系统模拟。



< 27 >

过程分析模拟应用



- 化工开发
 - 数学模型为放大设计的基础，减少放大工作量，提高放大倍数。
- 化工设计
 - 计算机辅助工艺设计，选择最优方案，确定工艺流程
 - 设备的设计
- 操作优化
 - 生产条件变化、设备更换、生产策略改变
 - 操作参数的选定，改善操作，降低成本
- 经济分析
- 提高产品质量
- 减少生产过程的盲目性

< 28 >

过程模拟商业通用软件—稳态模拟



- Aspen Plus: AspenTech公司 (美国能源部在MIT的项目 - 过程工程的先进系统, Advanced System for Process Engineering, 简称ASPEN) 适应范围最广, 在电解质、固体、燃烧等模块有优势 
- Aspen Hysys: 加拿大公司Hyprotech, 后被Aspen Tech收购 在油气工程领域就有着极高的精度和准确性
- PROII: 美国SIMSCI公司 在石化上应用较多, 积累了丰富的经验 
- ChemCAD: 美国Chemstations公司开发的产品
- ECSS: 青岛科技大学 (原青岛化工学院) 计算机与化工研究所/炼油化工高新技术研究所 国内唯一化工过程模拟商业化软件 国家科技进步二等奖 

动态模拟商业通用软件



用于化工过程和控制系统模拟的商业软件:

- HYSYS Dynamics
- Aspen Dynamics

理论研究的动态模拟软件MATLAB/Simulink 

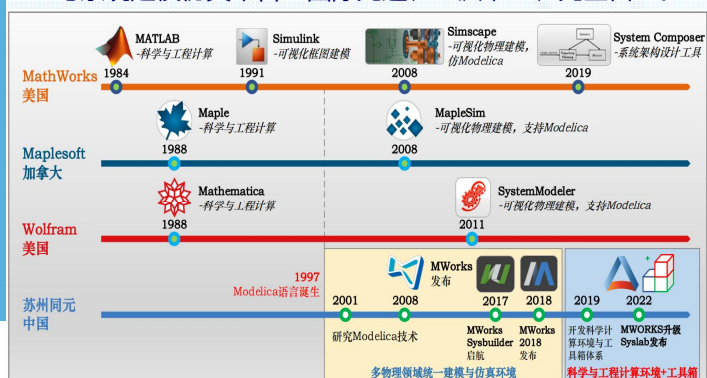
- 美国 Mathworks公司主要面对科学计算、可视化以及交互式程序设计的高科技计算环境。
- MATLAB是matrix&laboratory两个词的组合, 意为矩阵工厂 (矩阵实验室)
- MATLAB和Mathematica、Maple并称为三大数学软件
- 工具箱 (toolbox): 优化, 控制系统, 模型识别, 信号处理, 鲁棒控制, 神经网络, 模型预估控制等
- Simulink 作为人机图像接口, 为使用者运用MATLAB里的工具箱, 提供一个良好的模拟平台。
- Simulink 没有开发出针对化工过程的专用模块: 化工过程包含的大量化合物的物性以及化工设备特性, 非常复杂
- 用化工过程的数学模型, 或者过程的输入输出数据, Simulink可对化工过程进行动态模拟, 改进过程控制

30

国产化软件MWORKS



- MWORKS被称为中国的Matlab, 全球第四个科学计算与系统建模仿真平台: 国际先进、亚洲唯一、完全自主。



流体力学商业软件



- CFX: 英国AEA Technology公司开发, 2003年被全球最大的CAE仿真软件ANSYS公司收购。可计算不可压缩及可压缩流动、流固耦合、传热问题、多相流、化学反应、气体燃烧等问题。
- FLUENT: 由美国FLUENT Inc.于1983年推出, 市场占有率最大, 近年被ANSYS公司收购。计算可压缩及不可压缩流动、含有粒子的蒸发、燃烧过程、多组分介质的化学反应过程等问题。
- FIDAP (Fluid Dynamics Analysis Package): 于1983年由美国Fluid Dynamics International Inc. 推出, 是世界上第一个使用有限元法(FEM)的CFD软件。
- PHOENICS: 世界上第一个投放市场的CFD商业软件。
- STAR-CD (Simulation of Turbulent Flow in Arbitrary Region, CD是开发商Computational Dynamics Ltd的简称)

32

课外阅读



- 参考资料
- 维基百科搜索: process systems engineering
- Research Challenges in Process Systems Engineering-----*Ignacio E. Grossmann and Arthur W. Westerberg*
- MDPI 编辑荐读 | Processes: 纪念PSE之父Roger W.H. Sargent教授
- https://mp.weixin.qq.com/s?__biz=MzkyNjl3Njl4Mg==&mid=2247486088&idx=1&sn=9b938bf25a624421d2fa5f7033b8ea55&chksm=c23885df54f0c4bdb337b88e2d0204495fe9ad6f9780724be60b4b6ce50bd10a16ff436b5ba&mpshare=1&scene=23&srcid=1003vjWNJ4VTohhzHq7hnAsw&share_time=1633874256388&shareid=d3328db67a2188e3fc620007ca8bcbae#rd
- 中国过程系统工程30年: 回顾与展望, 化工进展, 2022年第41卷第8期

< 33 >

安装及学习软件



- 安装MWORKS软件: 安装文件在学校官网, 安装后用学校邮箱注册激活。需要先安装Syslab, 再安装Sysplorer
- 安装后先在首选项中预加载数据库, 选中后重启。如果没有预加载数据库, 要调用该数据库的命令时, 需要using.....语句。
- 课程中需要预加载的数据库包括: TyMath, TyCurveFitting, TyPlot, TyOptimization等
- 了解其中的控制工具箱, 便于后续的学习和实践。
- 学习资料:
 - 上课的课件
 - 同元公司的部分资料
 - Mworks的帮助文件
 - 其他网站的学习资料

< 34 >

作业



- 讨论: 随着中国制造2025战略、互联网+和工业大数据的实施, 如何适应时代要求, 成为一名怎样的化学工程师?
- 课程论文: 每人写一篇课程论文, 说明对过程系统工程和该课程的认识, 并说明上完该课程的感受及对专业的认识。
- 格式参考科技论文的写作格式: 题目、姓名、学号、摘要、关键字、引用文献要注明
- 期末时候交

< 35 >