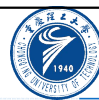


化工过程模拟及软件应用

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

目录

- 绪论
- 化工过程数值计算 (MWORKS)
- 化工过程系统的优化 (MWORKS, Excel)
- 化工过程系统的动态模拟 (Aspen, MWORKS)
- 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)
- 化工过程系统的稳态模拟与分析 (Aspen)
- 化工过程制图 (AutoCAD)



杨鑫
20学时

罗华政
20学时

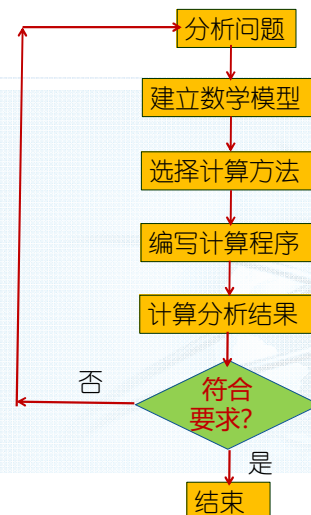
化工过程数值计算



- 简介
- 数据处理：插值、拟合
- 数值积分
- 线性方程组的求解
- 非线性方程（组）的求解
- 常微分方程求解
- 最优化

简介

- 分析解决
- 问题的步骤



数学建模

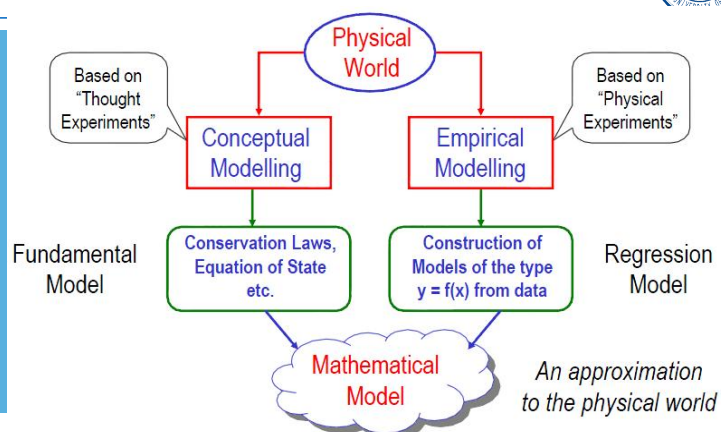
- 数学建模：用有关学科的知识 and 数学理论，将实际工程问题，用精炼准确的数学语言对其核心部分进行描述并给出数学模型，这一过程称为数学建模。
- 数学模型 (Mathematical model)**：物理实体的数学抽象，即关联研究对象的输入、输出以及一系列参数的数学方程式。
 - 微分方程、传递函数和状态方程等数学描述形式
- 数学模型要最大可能近似真实的工程本质
- 模型算法要能在计算机上实现

数学模型

- 道德经：道可道，非常（恒）道
- 苏轼：道可致而不可求
 - 规律可以被认知，但是所有的认知都不是永恒的
 - 世界是无限的，认识是局限的
- 马克思：人是一切社会关系的总和
 - 具体历史条件、特定的社会关系
- 波尔的家徽：互补思想
 - 波粒二象性 + 不确定性原理



建立数学模型的方法



数学模型分类

- 机理模型、第一原理模型 (First-principle models)、白箱模型 (White box models):
 - 根据化工过程的内部机理，列出其平衡数学方程，分析计算输入量与输出量之间的关系。
 - 建模原理：质量、能量、动量守恒定律...
 - 模型特点：
 - 精确，全局适应性强，具有明确的物理意义；
 - 难以建立，复杂，大型的ODE或PDE方程组；
 - 用于模拟、操作培训和优化
- 经验模型 (Empirical models)、黑箱模型 (Black box models)
 - 对研究系统，通过一组输入来考察输出参数的变化规律
 - 模型特点：
 - 不需要了解过程内部机理，只反映输入与输出关系的经验曲线和经验函数关系
 - 形式简单、建模容易；
 - 用于控制器设计
- 半经验模型 (semi-empirical models)、灰箱模型 (Grey-box models)

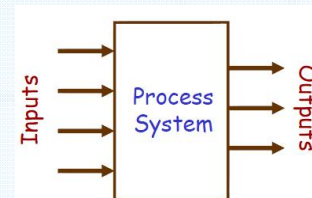
模型的分类

- 根据对过程系统中状态变量分布特征的不同描述方式：
 - 集中参数模型：状态变量在系统中呈空间均匀分布（强烈搅拌的反应罐）
 - 分布参数模型：状态变量在系统内呈非均匀，但一般是连续的空间分布（管式反应器、变压吸附塔）
 - 多级集中参数模型：一般用于描述多级串连、级内状态变量均匀分布的过程（板式塔内的传质分离过程）

数学模型

George E. P. Box:
"essentially, all models are wrong, but some are useful."

- 过程设计
- 过程模拟
- 控制设计
- 过程优化



混合器的机理建模

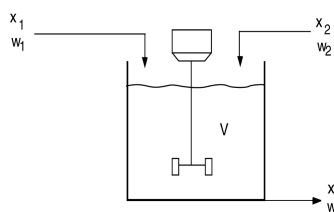


Figure 2.1. Stirred-tank blending process.

W: 总物质流量
X: 物质A的物质含量

质量平衡方程: 输入 = 输出 + 累积

$$\frac{dV}{dt} = \frac{1}{\rho} (w_1 + w_2 - w)$$

假定混合均匀，密度 ρ 是常数

$$\frac{dx}{dt} = \frac{w_1}{V\rho} (x_1 - x) + \frac{w_2}{V\rho} (x_2 - x)$$

附：2000年数学二考研题

七、(本题满分7分)

某湖泊的水量为 V ，每年排入湖泊内含污染物 A 的污水量为 $\frac{V}{6}$ ，流入湖泊内不含 A 的水量为 $\frac{V}{6}$ ，流出湖泊的水量为 $\frac{V}{3}$ 。已知 1999 年底湖中 A 的含量为 $5m_0$ ，超过国家规定指标，为了治理污染，从 2000 年初起，限定排入湖泊中含 A 污水的浓度不超过 $\frac{m_0}{V}$ 。问至多需经过多少年，湖泊中污染物 A 的含量降至 m_0 以内？(注：设湖水中 A 的浓度是均匀的)。

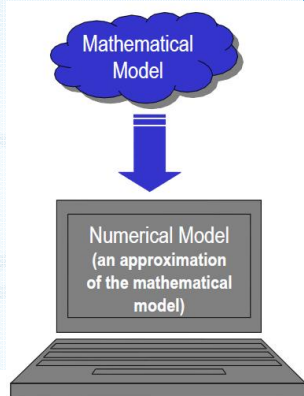
模型计算方法

- 解析算法 (analysis algorithm) : 用解析的方法找出表示问题的前提条件与结果之间关系的数学表达式, 并通过表达式的计算来实现问题求解。

- 解析解 (analytical solution) : 连续、精确、用严格的函数公式表示

$$x^2 = 2 \rightarrow x = \sqrt{2}$$

- 模型复杂, 很难得到解析解
- 数学模型转化为近似的数值模型
- 数值计算: 使用计算机求数学问题近似解的方法与过程。



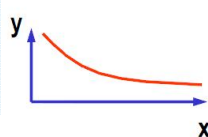
< 13 >

数值计算 (Numerical)

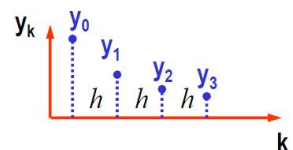
- 连续系统离散化、有限逼近误差
- 数值解是离散的, 并且一定有误差
- 注重计算的稳定性、收敛性、快捷的计算速度和高计算精度。

$$x^2 = 2 \rightarrow x = 1.414$$

Analytical Solution



Numerical Solution



< 14 >

常用化工数值计算的计算机软件

1. 编程语言: C语言, Fortran语言, Visual Basic, Delphi, Python...

2. 计算软件

- Matlab/Simulink

- MATLAB是矩阵实验室 (Matrix Laboratory) 的简称, 美国Mathworks公司开发的商业数学软件, 以矩阵为计算单元。
- 功能强大, 用于算法开发、数据可视化、数据分析、数值计算的高级技术计算语言和交互式环境, 主要包括MATLAB和Simulink两大部分。
- 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

Maple, Mathematica

< 15 >

常用化工计算的计算机软件

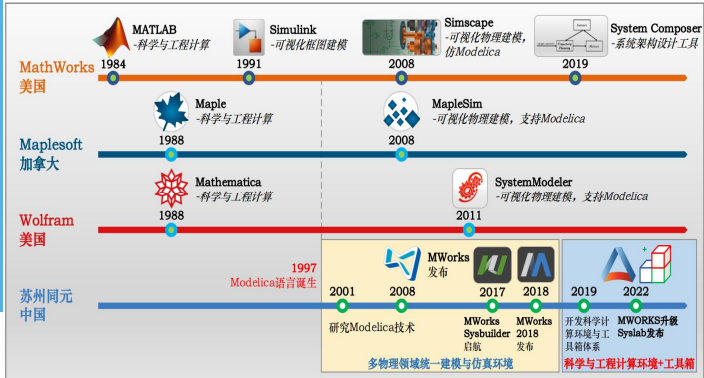
- Excel: 通用软件, 数据拟合和最优化求解工具
- GAMS (The General Algebraic Modeling System, 通用代数模型系统):
 - GAMS最早是由美国的世界银行(World Bank)的 Meeraus 和 Brooke [1992]所开发。是特别为建模线性、非线性和混合整数最优化问题而设计的, 是一款数学规划和优化的高级建模系统。以简单清楚的使用者接口和强健稳定的数值分析能力见长。
- G2:
 - G2 美国Gensym公司开发的一套实时专家系统开发平台, 用于实时监测与诊断、智能化监督控制、过程优化、质量管理、开停车监控及仿真培训。
 - 具有交互作用的人-机界面, 使用结构式的自然语言。具有面向目标图形生成系统, 可很快生成化工流程图。可以接受动态模拟仿真数学模型; 有实时接口与各种集散控制系统相联接, 采集实时数据。

< 16 >

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。



作业



- 自学MWORKS文件学习资料
- 对Matlab感兴趣的同学：
<https://matlabacademy.mathworks.com/cn/details/matlab-onramp/gettingstarted>在线学习matlab课程