

<<聚合过程模拟与优化>>

图书基本信息

书名：<<聚合过程模拟与优化>>

13位ISBN编号：9787122081537

10位ISBN编号：7122081532

出版时间：2010-7

出版时间：化学工业

作者：顾凯//黄继红

页数：184

字数：294000

版权说明：本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问：<http://www.tushu007.com>

<<聚合过程模拟与优化>>

前言

Polymer Plus是Aspen Tech公司在20世纪90年代推出的主要产品之一，是Aspen Tech公司聚合物工业解决方案的重要组成部分。

它提出了一套以链段为特征的聚合物识别方法；能对自由基均相、悬浮及乳液聚合、离子聚合、Ziegler-Natta聚合、缩聚等动力学模拟；包含了一个完善的聚合物、单体、链段、官能团的物性数据库和大量物性及动力学计算模型；可对部分使用性能，如、熔融流动速率（流动性）进行预测。

本书基于Aspen Tech公司的聚合物流程模拟软件Polymer Plus，介绍聚合反应动力学机理的建模、相平衡的计算、最终性质的预测以及聚合过程的模拟与优化的方法。

本书按聚合反应机理来进行组织，为了读者学习的方便，在第2章增加了Aspen Plus软件使用指南；第3章对流程模拟中聚合物的数字表示方法进行了说明，定义了一系列聚合物的结构属性，并用一个简单的实例说明了Polymer Plus建模的基本方法和步骤；第4章对Polymer Plus中内置的自由基聚合反应动力学建模进行了详细的介绍，并用聚苯乙烯的例子加以说明；第5章对离子聚合反应动力学建模进行了介绍，以SBS为例介绍了间歇聚合过程的模拟；第6章对Ziegler-Natta聚合反应动力学进行了介绍，并以乙烯/聚乙烯的相平衡参数求取为例，说明了参数估计方法；以LLDPE的聚合过程为例，详细说明了Ziegler-Natta聚合过程中多活性中心的建模方法。

此外，还简单介绍了聚合物最终性质——熔融指数的预测方法；第7章对逐步聚合反应动力学建模进行了简单介绍，并详细解析了Polymer Plus中逐步聚合建模的步骤和内在的化学原理。

并以聚酯生产的简化模型为例进行了说明。

在建模中，对相平衡计算的活度系数模型进行了简单介绍，最后再次对特性黏度、熔融指数的预测进行了说明。

本书由北京石油化工学院顾凯、黄继红编写。

笔者在Polymer Plus的学习中得到了美国弗吉尼亚理工学院暨州立大学化工系刘裔安教授的指导。

在学习和教学及工业实践中，得到了中国石油化工有限公司科技开发部、燕山仿真培训中心和石化盈科信息技术有限公司的支持，在此表示感谢！

限于笔者业务活动范围和学识水平，书中必有许多不尽如人意之处，误漏之处在所难免，敬请读者不吝赐教和指正。

<<聚合过程模拟与优化>>

内容概要

本书是基于Aspen Tech公司的聚合物流程模拟软件Polymer Plus来介绍聚合过程的模拟与优化的方法。全书共分为八部分。

分别是：聚合过程流程模拟总论、Aspen Plus使用初步介绍、聚合物的计算机表示、自由基聚合的模拟、离子聚合的模拟、配位聚合的模拟、逐步聚合的模拟以及附录。

本书按聚合反应机理来进行组织，并结合工业大宗高分子树脂的聚合过程的建模与优化过程进行了详细的说明，对模型的工业应用进行了初步的介绍。

本书可作为高等院校高分子化工、高分子材料与工程、化学工程与工艺等专业的本科生教材，也可供相关行业的工程技术人员参考。

<<聚合过程模拟与优化>>

书籍目录

1 绪论 1.1 聚合过程流程模拟简介 1.2 聚合过程的建模方法 1.3 聚合物流程模拟与优化应用实例介绍 1.4 我国开展聚合过程模拟与优化的意义

2 Aspen Plus使用初步介绍 2.1 Aspen Plus模拟的一般步骤 2.2 图形界面 2.3 示例 2.3.1 苯乙烯的生产工艺和流程图 2.3.2 打开Aspen Plus 2.3.3 选择运行类型 2.3.4 建立空白模拟文件 2.3.5 创建流程 2.3.6 规定计算的全局信息 2.3.7 规定组分 2.3.8 选择物性方法 2.3.9 输入流股规定 2.3.10 输入模块规定 2.3.11 运行模型 2.3.12 查看运行结果 2.3.13 模型的验证与分析 2.3.14 模拟所对应的Input文件 2.3.15 工程提示

3 聚合物的计算机表示 3.1 聚合物体系的分子组成 3.2 聚合物的链段表示 3.2.1 链段的基本概念 3.2.2 链段的种类 3.2.3 链段的命名 3.2.4 链段数据库 3.3 聚合物的结构性质 3.3.1 聚合物的矩 3.3.2 聚合度 3.3.3 平均分子量 3.4 低聚物 3.5 计算举例 3.6 敏感性分析

4 自由基聚合的模拟 4.1 基本知识 4.2 自由基聚合反应动力学的建模 4.3 凝胶效应 4.4 动力学反应组的定义 4.5 聚合物属性的计算 4.6 聚苯乙烯的模拟 4.6.1 模型运行和计算结果 4.6.2 模型分析

5 离子聚合的模拟 5.1 离子聚合反应动力学的建模 5.1.1 活性中心生成反应 5.1.2 链引发反应 5.1.3 链增长反应 5.1.4 缔合反应 5.1.5 离子交换反应 5.1.6 活性种电离 5.1.7 链转移反应 5.1.8 链终止反应 5.2 离子聚合反应的定义 5.3 离子聚合物属性的计算 5.4 SBS聚合工序的模拟 5.4.1 SBS简介 5.4.2 模拟流程 5.4.3 组分与进料 5.4.4 物性和相平衡 5.4.5 聚合动力学 5.4.6 反应器的操作 5.4.7 模型结果和结论

6 配位聚合的模拟 6.1 Z-N聚合的特点 6.2 Z-N聚合动力学简介 6.3 多活性中心数据解析 6.4 乙烯淤浆聚合热力学参数的回归 6.4.1 Sanchez-Lacombe状态方程 6.4.2 HDPE聚乙烯SL状态参数的回归 6.5 聚合物本体物性的计算 6.5.1 液相摩尔体积(密度)的计算 6.5.2 Van Krevelen液相摩尔体积模型 6.5.3 Tait模型 6.5.4 混合物的液相摩尔体积 6.5.5 熔体流动速率(MFR)的预测 6.5.6 Bremnei-Rudin热塑性塑料模型 6.5.7 Quaekenbos关系式 6.5.8 用户的经验关系式及其实现 6.6 LLDPE的模拟计算 6.6.1 流程和工艺描述 6.6.2 组分 6.6.3 Properties——物性方法 6.6.4 主要单元的操作条件 6.6.5 聚合动力学机理和参数估计方法 6.6.6 单中心反应动力学模型 6.6.7 GPC曲线的解析 6.6.8 多中心反应动力学模型 6.6.9 收敛算法 6.6.10 全流程模拟 6.6.11 数据回顾和一致性检验 6.6.12 模型的应用

7 逐步聚合的模拟 7.1 逐步聚合反应动力学机理 7.2 逐步聚合反应动力学建模 7.3 聚合物非随机二液相活度系数模型(PolyNRTL) 7.4 PET三釜聚合工艺的模拟 7.4.1 生产工艺流程简介 7.4.2 组分的定义 7.4.3 定义聚合物 7.4.4 定义低聚物 7.4.5 流股数据 7.4.6 单元操作数据 7.4.7 物性和相平衡 7.4.8 聚合动力学 7.4.9 计算结果 7.4.10 产品性质——特性黏度的建模 7.4.11 模型应用

8 附录 8.1 Segment数据库中整理的链段列表 8.2 模拟文献 8.2.1 一般性文献 8.2.2 乳液聚合的文献 8.2.3 悬浮聚合的文献 8.2.4 离子聚合的文献 8.2.5 聚烯烃的文献 8.2.6 逐步聚合模拟的文献 8.2.7 聚合物热力学的文献 8.2.8 其他参考文献

<<聚合过程模拟与优化>>

章节摘录

插图：对聚合过程的模型化研究，可以追溯到Denbigh在1947年撰写的连续搅拌反应釜（CSTR）中发生的聚合反应论文。

几十年来，这种研究一直没有停止过。

但是通用聚合过程模拟软件的出现却是在20世纪90年代。

聚合过程的模拟与优化，是过程系统工程（Process System Engineering）在分子化工方向的一个分支，是化工过程系统工程的重要组成部分。

在介绍聚合过程的模拟与优化之前，我们对化工过程的模拟进行一个简单的定义。

化工过程模拟，又称化工流程模拟，是一种采用数学方法来描述过程的稳态/动态特性，通过计算机进行物料平衡、能量平衡、化学平衡、压力平衡等计算，进行设备尺寸估计和能量分析，做出经济评价的技术。

聚合过程的模拟与优化，是化工过程模拟技术在分子化工中的应用。

该技术已经在化工生产装置（包括聚合装置）的全生命周期都起到了重要的作用。

- 在项目规划阶段：对工艺过程进行可行性分析，评价各种方案；
- 在研究阶段：进行概念设计，弄清研究的重点，在与实验研究同时开展数学模型的研究、进行模拟实验，使两者互相补充，提高研究质量、加快研究进度；
- 在工程设计阶段：对初步设计进行方案比较、寻求最优设计；
- 在生产阶段：通过对过程性能进行监控，克服“瓶颈”，实现操作优化，离线指导生产来实现企业节能降耗、挖潜增效、提高经济效益的目的。

总而言之，流程模拟技术在化学工业中应用已经十分广泛。

<<聚合过程模拟与优化>>

编辑推荐

《聚合过程模拟与优化:基于Polymer Plus》：高等学校教材。

<<聚合过程模拟与优化>>

版权说明

本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问:<http://www.tushu007.com>