

可扩展的化工流程模拟软件设计与测试

孟平洧, 李 薇, 曹志凯*

(厦门大学化学化工学院, 福建 厦门 361005)

摘要: [目的] 针对商业流程模拟软件功能扩展时操作繁琐、可解释性差等缺陷, 提出一种实现软件功能扩展的设计思路。[方法] 设计时将 Lua 扩展模块以组件形式嵌入模拟软件中, 使用 C# 语言配合 .NET 环境下的 NLua 库实现 Lua 语言的解释执行, 然后在求解器和物性库的支持下实现扩展模型的求解, 并以重油催化裂化六集总模型的计算为例进行测试。[结果] 测试结果显示关键组分的误差较小, 扩展技术能得到有效应用。与 Aspen Plus 的同类功能相比操作繁琐度降低了 54%。[结论] 本研究为可扩展的化工流程模拟软件设计提供了一种高效解决方案。

关键词: 化工流程模拟; Lua 语言; 模块化; 扩展模块

中图分类号: TQ015.9

文献标志码: A

文章编号: 0438-0479(2025)01-0186-07

Design and test of scalable chemical process simulation software

MENG Pingwei, LI Wei, CAO Zhikai*

(College of Chemistry and Chemical Engineering, Xiamen University, Xiamen 361005, China)

Abstract: [Objective] Chemical process simulation software is a computer program used to simulate and analyze chemical production processes. It is an essential tool for modern chemical process design, optimization, and control. In this study, a design approach is proposed for enhancing the functionality of software to address the shortcomings of complex extended operation, challenging coding languages, and low interpretability in commercial process simulation software. [Methods] In this study, the Lua extended module is integrated into the chemical process simulation software framework as components during the design phase. It utilizes the C# language to implement the interpretation and execution of Lua language through the NLua library in a .NET environment. Then, with the support of the solver and physical property library, the extended model can be solved using the open interface of physical property data and solving methods. Finally, the calculation of the six-lumped model for heavy oil catalytic cracking is taken as an example to verify the scalability of the software. This test uses 14 data sets to solve the parameters of the six-lumped dynamics model, and 5 data sets to verify the accuracy of the model. A code is developed to implement the particle swarm optimization algorithm and Runge-Kutta algorithm to solve a multi value solution problem. The code can solve the parameters of the equation system, substitute these parameters into the differential equation system to compute simulated values, and then compare these values with the actual values to validate the software's scalability. The complexity of extended operation in this simulation software is compared with that of other software to verify the efficiency of the software's extended operations. [Results] Firstly, the test results show that the average relative error between the simulated and actual values of key components in heavy oil catalytic cracking is relatively small. The average relative errors for diesel, gasoline, liquefied gas, and dry gas are 3%, 14%, 4%, and 5%, respectively. The test proves that the extended technology can be effectively applied. Secondly, compared to Aspen Plus, the developed simulation software based on this design scheme has fewer operation steps, lower process complexity, and a reduced number of operation for extended functions. The complexity of extended operation is simplified by 54%. [Conclusion] The above tests and comparison results indicate that the developed simulation software on the basis of this design scheme is scalable and more efficient in extended operations compared to

收稿日期: 2023-12-18 录用日期: 2024-03-06

*通信作者: zhikai@xmu.edu.cn

引文格式: 孟平洧, 李薇, 曹志凯. 可扩展的化工流程模拟软件设计与测试[J]. 厦门大学学报(自然科学版), 2025, 64(1): 186-192.

Citation: MENG P W, LI W, CAO Z K. Design and test of scalable chemical process simulation software[J]. J Xiamen Univ Nat Sci, 2025, 64(1): 186-192. (in Chinese)



Aspen Plus. This study offers an efficient solution for designing scalable chemical process simulation software. The research methods and conclusions of this study hold important reference value for the design and optimization of scalable chemical process simulation software.

Keywords: chemical process simulation; Lua language; modularization; extended module

化工流程模拟软件^[1-2]是用于模拟和分析化工生产过程的计算机程序. 基于模拟软件中的模型库、物性数据库及求解器可在计算机上实现化工过程的传递规律及反应过程的研究. 其耗时短、资源消耗少, 已成为现代化工过程设计、优化和控制的重要工具.

传统的化工流程模拟软件存在应用场景受限、新型技术更新慢等问题. 可扩展的化工流程模拟软件^[3]能有效克服上述问题, 支持模拟和验证新工艺, 应用更精确的模拟算法和模型, 帮助创新和研发, 提高工艺模拟精度, 从而扩大应用范围、实现新技术的快速应用.

系统运行时调用可执行扩展编码文件是流程模拟软件实现扩展的主要方法, 如 Aspen Plus 中的 ACM (Aspen Custom Modeler)^[4]、CHEMCAD 的 UAM (User Added Modules)^[5]、支持多平台的 CAPE-OPEN^[6]等. 功能扩展时 ACM 使用 Fortran 语言, UAM 使用 C++ 语言, CAPE-OPEN 的编码规范性强、灵活度不高、解释性差. 这些编码语言的语法专业且操作繁琐导致用户学习成本高, 限制了模拟软件

的应用和推广.

组件化技术^[7]通过拆分和封装功能模块提高软件质量并改善用户体验, 能有效解决操作繁琐等问题. Lua 语言^[8-9]是一种简洁高效的解释性语言, 与 Fortran、C++ 等编译性语言相比, 能有效提高用户编码的便利性. 因此, 本研究将 Lua 扩展模块以组件形式嵌入模拟软件, 设计了一种可扩展的化工流程模拟软件框架. 使用 C# 语言^[10-11]配合 .NET 环境^[12]下的 NLua 库实现软件对 Lua 语言的解释执行, 依托内部求解器和物性库, 实现用户扩展模型的求解, 并以重油催化裂化六集总模型为例对软件的可扩展性进行测试验证.

1 可扩展的化工流程模拟软件的总体框架

化工流程模拟软件应具备流程搭建、模块设置及分析计算三大功能模块, 为实现上述功能采用 MVC (model-view-controller)^[13-14]架构设计, 如图 1 所示.

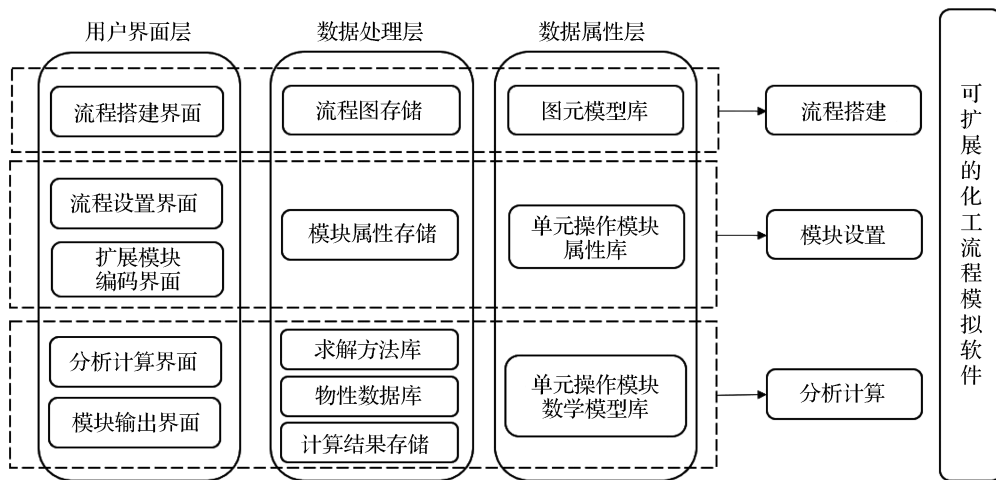


图 1 可扩展的化工流程模拟软件的 MVC 框架

Fig. 1 MVC framework for scalable chemical process simulation software

1) 流程搭建. 该功能模块界面由图元列表框和流程搭建画布组成, 其架构如图 2 所示, 图元列表框中每个图元代表一种设备, 特殊标注的空白图元代表可扩展模块. 用户通过在图元列表选定图元, 再将其拖拽到画布并连接其他图元创建流程图, 给流

程图中每个图元赋予唯一的 Guid (globally unique identifier) 值, 并记录流程图中各图元的位置和图元之间的关系.

2) 模块设置. 图 3 为本研究设计的模块设置架构, 该功能模块规定流股、塔设备、反应器设备等各类

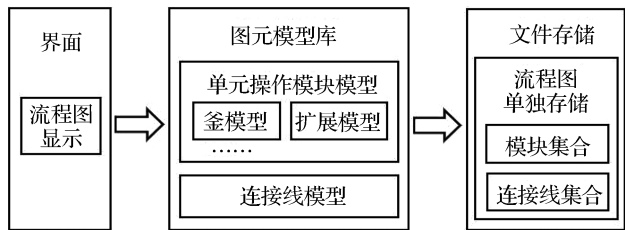


图2 流程搭建架构

Fig. 2 Architecture of process building

单元操作模块的输入属性. 界面初始化阶段展示流程图中各图元对应的单元操作模块名, 用户可点击其中的单元操作模块名结合 Guid 值检索单元模块信息, 从而判断被点击的单元操作模块是否可扩展. 若可扩展则弹出编码文本框供用户编码, 否则弹出包含属性框的窗口供用户输入. 编码和属性输入完成后存储扩展代码和单元模块属性值, 以便求解时执行和调用.

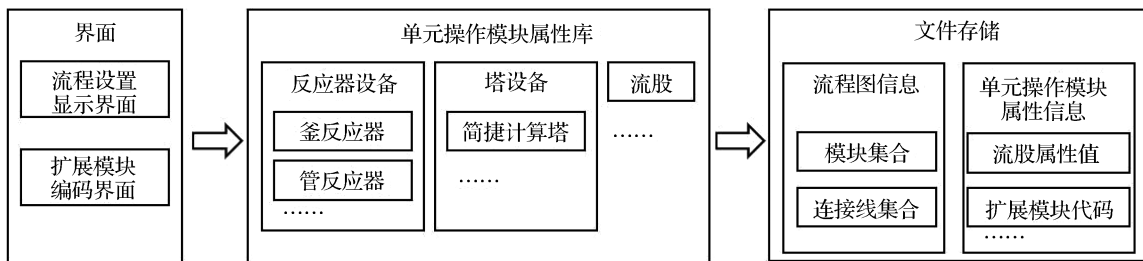


图3 模块设置架构

Fig. 3 Architecture of module setting

3) 分析计算. 其架构如图 4 所示, 该模块包含数学模型库、求解方法库和物性数据库. 图元中设备模型抽象为通用数学模型并存储在模型库中, 用户构建的流程图及模块属性值逻辑关系经后台处理并进行可行性分析. 此外, 基于流程图信息、模块属性值及可扩展模块代码配合 CoolProp^[15] 物性库和求解方法库求解, 并将求解结果展示在输出界面.

2 扩展模块的设计与开发

为实现流程模拟软件的可扩展性, 将 Lua 扩展模块以组件形式嵌入上述软件框架, 其设计思路如图 5(a) 所示. 模拟软件向扩展模块开放求解器及物性库接口供用户编码调用, 扩展模块的数据交互过程及实现如图 5(b) 所示.

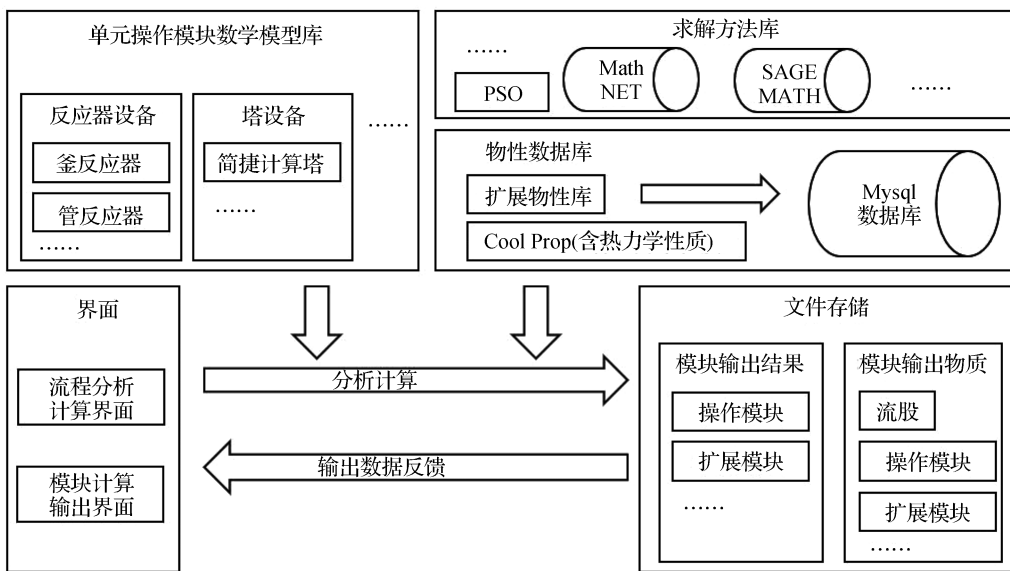


图4 分析计算架构

Fig. 4 Architecture of analytical computing

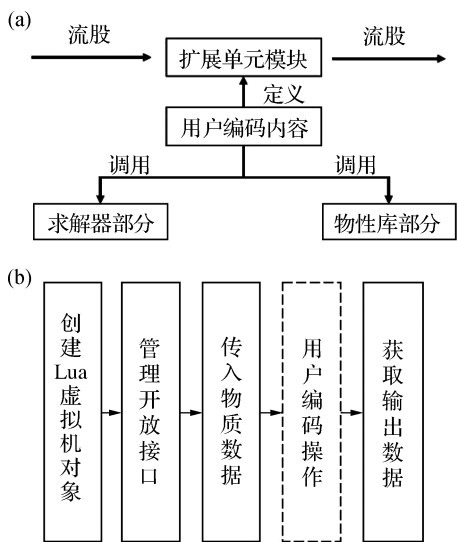


图 5 扩展模块的设计思路(a)和实现步骤(b)
Fig. 5 Design ideas (a) and implementation steps (b) for extended module

扩展功能的实现过程设计主要考虑:

1) 管理开放接口:参照模拟软件对物性库和求解器的调用方法,选择性地将其注册为 Lua 函数,作为用户获取物性数据和调用求解方法的开放接口.注册代码形如 state. (“A”, obj, obj. GetType(), GetMethod (“B”)),用户编码时通过调用“A”接口实现软件内部的“B”方法功能.软件开放的部分接口如表 1 所示.

2) 传入物质数据:获取当前模块的输入物质信息,将其以字典数据类型传给 Lua 脚本.本软件默认扩展编码框中代码开头为 Function ScriptFunc(val),其中 val 为存储当前模块输入物质的 Lua 字典.该字典以物质名为键,物质属性数组为值.用户通过形如 val[KEY]的代码获取 val 字典中键为 KEY 的属性数组,数组下标为 0,1,2 时对应数值的含义分别是物质流率、温度和压力.

3) 获取输出数据:计算结果的解释和数值分别添加到对应数组并输出到扩展模块的输出界面.模拟软件通过执行 Lua 代码获取输出数组,将其转换为内部数据类型存储和管理.

表 1 软件开放的部分接口

Tab. 1 Parts of the open interfaces of software

开放接口	接口功能	接口参数含义
Props1SI(Name,Prefix)	计算国际单位制下物质的性质	Name 为查询的物质名,Prefix 为查询物质的性质
PropsSI(Prefix,Name1,Value1,Name2,Value2,FluidName)	计算物质的热力学性质(如压力、温度、焓等)	Prefix 为查询的热力学性质,Name1 和 Value1(Name2 和 Value2)是已知属性名及其对应值,FluidName 为查询的物质名
RungeKutta(X,Y,Z)	使用龙格库塔算法求微分方程组的数值解	X 为求解数值数组,Y 为已知参数数组,Z 为微分方程数组
BackwardDF(X,Y,Z)	使用反向差分法求解微分方程组的数值解	X 为求解数值数组,Y 为已知参数数组,Z 为微分方程数组

3 案例研究

3.1 扩展案例

催化裂化装置是石油加工的典型过程^[16],其反应体系复杂,因此重油催化裂化反应常简化为集总模型^[17]来描述.在文献[18-19]的基础上获得重油催化裂化六集总模型的反应网络如图 6 所示,并基于可扩展的化工流程模拟软件的求解器和物性库求解.利用模拟结果和实际数据间的平均相对误差测试扩展模块是否能有效调用开放接口.绘制各组分质量分数随当前位置距反应器入口处距离的变化曲线,测试软件是

否能有效获取扩展模块输出数据,验证软件的可扩展性.

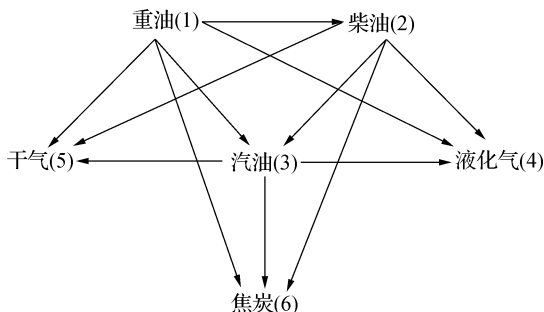


图 6 六集总模型反应网络

Fig. 6 Reaction network of six-lumped model

各组分质量分数随当前位置距反应器入口处距离变化的速率方程如式(1)所示:

$$\frac{dy}{dX} = e^{-\alpha t_c} \frac{1}{1+k_A w_A} \frac{1}{1+k_N w_N/\varphi_{c/o}} \frac{p/\sum_{i=1}^6 (y_i/10^3 M_i)}{\frac{1}{\varphi_{c/o} t_c} RTZ} \mathbf{K} \mathbf{y}. \quad (1)$$

式中: p 为反应压力, kPa; R 为气体常数, J/(mol · K); T 为反应热力学温度, K; α 为催化剂失活常数; t_c 为催化剂停留时间, s; k_A 为芳烃吸附失活系数; w_A 为原料中芳烃的质量分数; k_N 为碱氮吸附失活系数; w_N 为原料中碱氮的质量分数; $\varphi_{c/o}$ 为剂油比; y_i 为第 i 个组分的质量分数; M_i 为第 i 个组分的摩尔质量, kg/mol; X 为当前位置距反应器入口处距离, m; Z 为反应器总高度, m; \mathbf{K} 为反应速率常数矩阵, $10^{-3} \text{ m}^3/(\text{kg} \cdot \text{s})$, 如式(2)所示; \mathbf{y} 为反应体系组成向量, 如式(3)所示.

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} -\sum_{j=2}^6 K_{1j} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ K_{12} & -\sum_{j=3}^6 K_{2j} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ K_{13} & K_{23} & -\sum_{j=4}^6 K_{3j} & 0 & 0 & 0 \\ K_{14} & K_{24} & K_{34} & 0 & 0 & 0 \\ K_{15} & K_{25} & K_{35} & 0 & 0 & 0 \\ K_{16} & K_{26} & K_{36} & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (2)$$

$$\mathbf{y} = (y_1, y_2, y_3, y_4, y_5, y_6)^T. \quad (3)$$

其中 K_{ij} 为反应速率常数, 下标 i 代表反应原料组分在反应网络中的序号, 下标 j 代表反应产物组分在反应网络中的序号. 当碱氮的质量分数较小时, 其影响可忽略, 此时 $1/(1+k_N w_N/\varphi_{c/o})$ 的数值默认为 $1^{[20]}$, 由此可得出一组关于动力学参数的非线性微分方程组. 19 组在 $T=808 \text{ K}$ 下的操作条件及各组分质量分数分别如表 2 和 3 所示.

表 2 六集总模型操作条件

Tab. 2 Operating conditions of six-lumped model

序号	p/kPa	$\varphi_{c/o}$	t_c/s	$w_A/\%$
1	240.00	8.06	1.57	22
2	240.86	8.16	1.53	22
3	265.71	8.51	1.52	22
4	241.71	8.23	1.50	22
5	264.86	8.45	1.53	22
6	242.57	8.26	1.49	22

续表

序号	p/kPa	$\varphi_{c/o}$	t_c/s	$w_A/\%$
7	264.00	8.42	1.53	22
8	243.43	8.27	1.48	22
9	244.57	10.03	1.47	22
10	246.00	8.12	1.54	22
11	245.14	8.15	1.53	22
12	246.86	8.18	1.52	22
13	247.71	8.08	1.55	22
14	248.57	8.26	1.49	22
15	249.43	8.23	1.50	22
16	250.29	8.22	1.50	22
17	251.14	8.30	1.47	22
18	255.43	8.33	1.48	22
19	252.00	8.11	1.54	22

表 3 各组分距反应器入口 40 m 处的质量分数

Tab. 3 Mass fraction of each component at a distance of 40 m from the reactor inlet

序号	重油	柴油	汽油	液化气	干气	焦炭
1	22.88	22.70	29.72	17.75	3.85	3.10
2	20.85	22.44	30.66	18.53	4.01	3.51
3	13.84	21.02	34.05	21.57	4.63	4.89
4	19.28	22.24	31.38	19.13	4.13	3.84
5	15.11	21.21	33.49	21.06	4.52	4.61
6	18.71	22.16	31.64	19.36	4.17	3.96
7	15.69	21.32	33.22	20.81	4.47	4.49
8	18.34	22.11	31.82	19.49	4.19	4.05
9	20.05	22.31	31.04	18.85	4.07	3.68
10	21.62	22.48	30.34	18.27	3.95	3.34
11	21.01	22.41	30.62	18.50	4.00	3.46
12	20.33	22.32	30.93	18.76	4.05	3.61
13	22.25	22.55	30.07	18.04	3.90	3.19
14	18.71	22.13	31.65	19.36	4.17	3.98
15	19.27	22.19	31.40	19.16	4.13	3.85
16	19.55	22.21	31.29	19.06	4.11	3.78
17	17.77	22.00	32.07	19.73	4.25	4.18
18	17.19	21.82	32.39	20.03	4.31	4.26
19	21.69	22.46	30.32	18.26	3.95	3.32

利用表 2 和 3 中前 14 组数据求解集总动力学模型参数, 后 5 组数据用于验证模型, 测试扩展模块是否能有效调用开放接口. 通过本研究提出的方法在流程图中添加可扩展空白图元, 对其编码调用粒子群优化算法^[21-22]和龙格库塔算法^[23]求解方程组参数以解决多值解问题, 求解出的参数如表 4 所示.

表 4 六集总模型参数
Tab. 4 Parameters of six-lumped model

参数	数值	参数	数值
$K_{12}/(10^{-3} \text{ m}^3 \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{s}^{-1})$	1 389. 93	$K_{25}/(10^{-3} \text{ m}^3 \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{s}^{-1})$	8. 75
$K_{13}/(10^{-3} \text{ m}^3 \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{s}^{-1})$	1 000. 39	$K_{26}/(10^{-3} \text{ m}^3 \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{s}^{-1})$	73. 46
$K_{14}/(10^{-3} \text{ m}^3 \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{s}^{-1})$	405. 75	$K_{34}/(10^{-3} \text{ m}^3 \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{s}^{-1})$	111. 00
$K_{15}/(10^{-3} \text{ m}^3 \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{s}^{-1})$	90. 05	$K_{35}/(10^{-3} \text{ m}^3 \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{s}^{-1})$	15. 98
$K_{16}/(10^{-3} \text{ m}^3 \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{s}^{-1})$	22. 37	$K_{36}/(10^{-3} \text{ m}^3 \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{s}^{-1})$	135. 35
$K_{23}/(10^{-3} \text{ m}^3 \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{s}^{-1})$	200. 39	α	7. 53
$K_{24}/(10^{-3} \text{ m}^3 \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{s}^{-1})$	7. 80	k_A	4. 03

代入以上参数得到各组分质量分数在 $T=808 \text{ K}$ 下关于 X 、 p 、 w_A 、 t_c 、 $\varphi_{c/o}$ 的微分方程组. 利用该微分方程组计算 n 组不同反应条件下各组分的质量分数, 并与实际值对比计算其平均相对误差, 如式(4)所示.

$$e_i = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \frac{|y_{ij} - y'_{ij}|}{y_{ij}}, \quad (4)$$

式中 e_i 为第 i 种组分质量分数的平均相对误差, y_{ij} 和 y'_{ij} 分别为第 i 种组分在第 j 组反应条件下质量分数的实际值和模拟值.

经式(4)计算得出关键组分柴油、汽油、液化气和干气的模拟值与实际值的平均相对误差分别是 3%, 14%, 4% 和 5%, 证明模型准确性较高, 扩展模块能有效调用开放接口. 基于模拟结果得到固定反应条件下 ($p=246 \text{ kPa}$ 、 $T=808 \text{ K}$ 、 $w_A=22\%$ 、 $t_c=1.17 \text{ s}$ 、 $\varphi_{c/o}=10.60$) 各组分质量分数随当前位置距反应器入口处距离的变化曲线如图 7 所示. 由此表明本方法能有效获取并管理扩展模块的输出数据, 预测重油催化裂化各组分的质量分数, 可切实实现其扩展功能.

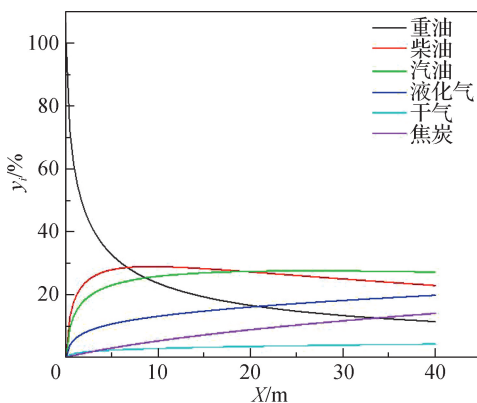


图 7 各组分质量分数随反应器内位置的变化

Fig. 7 Variation of each component mass fraction with the position inside the reactor

3.2 扩展操作繁琐度的对比

以操作步骤数、操作过程复杂度和操作软件数作为操作繁琐度的评估指标, 其中操作过程复杂度涉及步骤依赖和循环次数. 本软件和 Aspen Plus 下扩展操作步骤如图 8 所示.

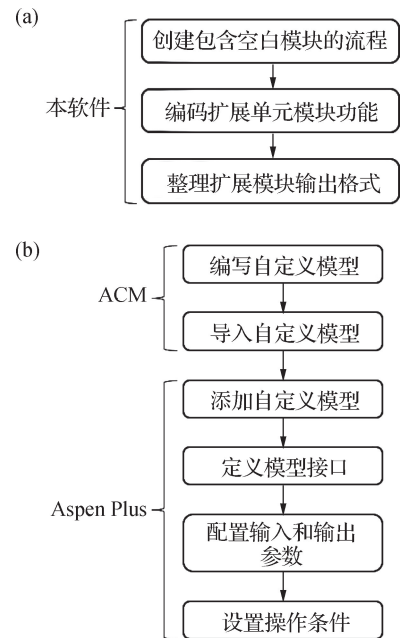


图 8 本软件(a)和 Aspen Plus(b)的扩展操作步骤

Fig. 8 Extension operation steps for this software (a) and Aspen Plus (b)

根据图 8 可得出两款软件扩展功能操作繁琐度各评估指标值如表 5 所示. 设 n_i 和 m_i 分别为本软件和 Aspen Plus 的扩展繁琐度第 i 个评估指标的值, p_m 为本软件相对于 Aspen Plus 扩展繁琐度的简化率, 定义如式(5)所示.

$$p_m = \frac{1}{3} \sum_{i=1}^3 \frac{m_i - n_i}{m_i}. \quad (5)$$

表 5 Aspen Plus 与本软件的扩展操作繁琐度指标

Tab. 5 Complexity index of extension operation for Aspen Plus and this software

流程模拟软件	操作步骤数 ($i=1$)	操作过程复 杂度($i=2$)	操作软件数 ($i=3$)
Aspen Plus(m_i)	6	5	2
本软件(n_i)	3	2	1

由表 5 可以看出,与 Aspen Plus 相比,本设计方案扩展功能的操作步骤数、操作过程复杂度、操作软件数均较少。由式(5)计算可得本软件扩展繁琐度与 Aspen Plus 相比降低了 54%,证明本设计方案实现的软件扩展功能涉及的用户操作更少、更高效。

4 结 论

本研究针对目前商业流程模拟软件扩展中存在的操作繁琐、解释性差等问题,提出将 Lua 扩展模块以组件形式嵌入模拟软件中的设计思路,设计了一种可扩展的化工流程模拟软件的架构,使用 C# 语言配合 .NET 环境下的 NLua 库实现 Lua 语言的解释执行,在求解器和物性库的支持下求解扩展模型。以重油催化裂化六集总模型为例进行测试,结果表明软件具备可扩展性,该设计思路可行。同时,本软件与 Aspen Plus 相比扩展繁琐度降低了 54%,说明该设计思路具备优越性。

参考文献:

[1] 唐宏青. 化工流程模拟软件警钟敲响[J]. 中国石油和化工产业观察, 2020(7): 80-81.

[2] 高立兵. 石油化工行业工业软件趋势探析及发展路径研究[J]. 新型工业化, 2023, 13(9): 61-68.

[3] SHEN M T, CHEN Y H, CHANG H. Simulation of the dynamics and control responses of the carbon dioxide chemical absorption process using Aspen Custom Modeler[J]. Energy Procedia, 2019, 158: 4915-4920.

[4] 王洪元, 刘江, 吕斌. Aspen Custom Modeler 软件应用研究[J]. 石油化工高等学校学报, 2001, 1: 72-77.

[5] 戴斌, 徐宏. CHEMCAD 中二次开发工具 UAM 的应用[J]. 计算机与应用化学, 2008, 25(6): 749-751.

[6] 王乐, 蔡振兴, 于萌萌, 等. 基于 CAPE-OPEN 标准的化工过程模拟软件开发[J]. 计算机与应用化学, 2016, 33

(12): 1255-1260.

[7] 田阔, 明平寿, 杨恒, 等. 一种组件式数据采集模型与系统实现[J]. 数字技术与应用, 2023, 41(11): 211-214.

[8] 崔献军, 何飞跃. Lua 在电力自动化系统计算公式中的应用研究[J]. 电网与清洁能源, 2019, 35(5): 54-58.

[9] 宋宏江, 高何, 卢成志, 等. 一种基于 Lua 脚本的航天器遥控快速测试验证技术[J]. 航天器工程, 2020, 29(3): 182-186.

[10] 高舒凯, 毕果. 适用于智能制造的数控机床全信息监控系统[J]. 厦门大学学报(自然科学版), 2022, 61(6): 1090-1096.

[11] 曾馨雨, 陈伟. 齿面接触闪温测量系统的设计[J]. 厦门大学学报(自然科学版), 2020, 59(1): 116-122.

[12] 张彦敏, 宋克兴, 李韶林, 等. 材料与化工专业教学案例库的设计与开发[J]. 中国现代教育装备, 2022(23): 14-17.

[13] SOHRABI SHOABJAREH A, FARHADI F, PISHVAIE M R. SimDFBA: a framework for bioprocess simulation and development[J]. Computers & Chemical Engineering, 2023, 169: 108073.

[14] 曾楠, 郑灵翔, 陈辉煌. 基于 MVC 模式的嵌入式 Web 设计方法[J]. 厦门大学学报(自然科学版), 2006, 45(2): 196-198.

[15] 李文博, 莫善军. 浅谈湿空气物性计算软件 CoolProp 的应用[J]. 日用电器, 2019(11): 77-80, 86.

[16] 周华, 江青茵, 曹志凯. 催化裂化分馏塔动态机理模型与仿真研究[J]. 厦门大学学报(自然科学版), 2004, 43(2): 217-220.

[17] 张红梅, 尹云华, 赵雨波, 等. 集总方法在复杂反应动力学模型中的应用[J]. 化学工业与工程技术, 2010, 31(2): 33-37.

[18] 周键. 重油催化裂解提升管反应器数值模型的研究[D]. 青岛: 中国石油大学(华东), 2021.

[19] 刘永吉. 集总动力学模型结合神经网络预测重油催化裂化产物收率[D]. 上海: 华东理工大学, 2017.

[20] 熊凯, 卢春喜. 催化裂化(裂解)集总反应动力学模型研究进展[J]. 石油学报(石油加工), 2015, 31(2): 293-306.

[21] 刘瞰东, 许两有, 邵桂芳, 等. 粒子群优化算法在 Pt-Pd 合金纳米粒子稳定结构优化中的应用[J]. 厦门大学学报(自然科学版), 2015, 54(1): 87-92.

[22] 韩会宾. 基于目标 PSO 算法的工程项目优化研究[J]. 西南大学学报(自然科学版), 2023, 45(12): 167-177.

[23] 谢坚坚, 滕波涛, 楼怡林, 等. 计算机辅助设计在化学反应工程教学中的实践[J]. 化学教育(中英文), 2017, 38(12): 66-71.

(责任编辑: 曾礼娜)