

污染防治与工艺一体化 ——系统化设计工具

〔美〕埃尔—哈瓦格 M. 穆罕默德 著
裴重华 秦晓云 等 译



科学出版社

www.sciencep.com

污染防治与工艺一体化 ——系统化设计工具

[美] 埃尔-哈瓦格 M. 穆罕默德 著

裴重华 秦晓云 等 译

科学出版社

北 京

内 容 简 介

本书是美国同类著作中的第一本教科书,它以成本、效益和工艺设备等为关键因素,通过工艺一体化方法,运用图表法、代数运算法和数学优化法等先进技术,为污染防治提供一个低成本的系统方案,从而协调、提高和实现各种工艺目标,如降低成本、提高产量、节约能源和防治污染等。

本书可作为化学工业和污染防治领域的一线工程师、环保工作者及该领域的研究人员的参考书,以及相关专业本科生和研究生的教材。

Pollution Prevention Through Process Integration

By: El-Halwagi M. Mahmoud

Copyright © 1997 by Elsevier Inc.

Translation Copyright © 2004 by Science Press.

All rights reserved.

原著版权归 Elsevier Inc. 1997

翻译版版权:科学出版社 2004 版权所有

图书在版编目(CIP)数据

污染防治与工艺一体化:系统化设计工具/(美)埃尔-哈瓦格 M. 穆罕默德著. 裴重华, 秦晓云等译. —北京:科学出版社, 2004

ISBN 7-03-012754-4

I. 污… II. ①埃… ②裴… ③秦… III. 污染防治-设备-系统设计 IV. X505

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2004)第 004093 号

责任编辑:杨 震 吴伶俐 王国华/责任校对:朱光光

责任印制:钱玉芬/封面设计:王 浩

科 学 出 版 社 出版

北京东黄城根北街16号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

新 蕾 印 刷 厂 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2004 年 4 月 第 一 版 开本:B5(720×1000)

2004 年 4 月第一次印刷 印张:18 1/2

印数:1—3 000 字数:352 000

定价:38.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换〈环伟〉)

中文版序

我非常高兴地得知我的著作《污染防治与工艺一体化——系统化设计工具》的中文版即将面世。该中译本将为中国化工界——培养了许多杰出和卓越化学工程师的世界上最优秀的学术团体之一——带来一个新兴的设计工具。就个人而言,能与中国读者交流我深感荣幸。我一直对中国人民和中国文化充满了崇高的敬意,他们对人类文明的影响甚巨。

今天,中国的工业化进程加快,工艺一体化和污染防治研究变得非常重要。工艺一体化通过保护物质和能量资源以及提高工艺性能,为优化工艺过程提供了系统化方法。此外,工艺一体化还研究用最经济的方法减少有害污染物排放的环保工艺。因此,用工艺一体化来防治污染的结果是有利性、保护物质和能量资源、消除瓶颈、可持续发展和环境友好等不同工业目标的和谐统一。

我非常敬佩裴重华教授和秦晓云先生等在翻译本书时体现出的创造、勤奋和不懈努力以及克服种种困难的精神,他们代表了职业精神和奉献的最高境界。我还要感谢海南大学对中译本出版的资助,感谢科学出版社同意该书出版发行和为此所做的努力。最后,我感谢多年来教给我许多知识的所有中国朋友,他们让我逐渐了解和钦佩中国、中国人民和中国传统文化。

埃尔-哈瓦格 M. 穆罕默德

英文版序

工艺设施是由诸多单元设备和物流组成的复杂体系。在生产过程中,降低环境污染不可能通过简单的管端测量而得以实施。事实上,对工艺中的物流取得全面的认识至关重要,以此为基础,才能研发出高效低成本的污染防治方案。着眼全局,可以摒弃费时费力的传统工艺方法,从复杂的工艺过程中寻找简单的解决方案。

在过去的 10 年中,工艺一体化在化学加工中的应用取得了显著的进展。这些系统的方案可以用于协调、提高和实现各种工艺目标,如降低成本、提高产量、节约能源和防治污染。本书引入物质一体化这一特别概念,用于物流优化,如各种物质的分配、产生和分离。其中有关物质一体化的文章已发表了很多。本书是面向以低成本系统化解决污染防治问题的各类读者,应其需要而编写的。

本书是同类著作中的第一本教科书,它把非常依赖经验和主观要求的污染防治工作系统化成为以化学工程和工艺一体化基本概念为基础的一门学科。本书在学术界的基础理论与工业界的具体应用之间架起了一座桥梁,为低成本的污染防治提供了综合的、系统化的应用技术。它既不是简单的建议性的规则,也不是只针对学术研究者,利用深奥的数学方法,提供包罗万象的优化方案;相反地,是这些应用技术以重要的工程理论为基础,为处理各类环保问题提供了坚实的基础,它包含了从图表法、代数运算法到数学优化法等多种不同层次的先进技术。因此,本书的读者对象广泛,包括化学工业和污染防治领域的一线工程师、环保工作者及该领域的研究人员、高年级的本科生和低年级的研究生。图表法非常有效地提供了一个直观的系统表现方法,用于系统地引导设计者开发解决方案;代数运算法使用方便,可直接使用计算器和电子数据表格实施;数学优化法虽然与工作人员的分析 and 偏爱有一定的距离,但它比上述方法的功能更为强大。

本书着眼于低成本、工艺设备的关键技术及环保要求,提供了一个全面的污染防治途径。本书的一大特点是首先利用对工艺一体化的总体认识,在综合理解的基础上建立起一个总体的实施目标,然后加以深入的分析。本书是作者在全面认识实际工艺技术重要性的基础上,结合本人及同事在应用工艺一体化方面的专门技术撰写而成的。

在此,我衷心地感谢我曾经工作和学习过的奥本大学、开罗大学和加州大学洛杉矶分校的同事、老师和学生;感谢我工艺设计的入门老师——加州大学洛杉矶分校的 Vasilios Manousiethakis 教授;感谢对我认识污染防治工艺实践起重大影响作用的 Sheldon Friedlander 教授;感谢奥本大学众多的本科生和工艺实践课的参加者,他们对本书出版前的笔记提出了很有价值的点评;同时感谢大量工艺综合和一体化

领域的研究工作者,在过去的20年里,他们对该领域的诞生做出了重大贡献。

我的新老研究生的聪明才智和富有挑战性的研究为本书做出了重要贡献。我特别愿意和这群充满活力的学生一起工作并向他们学习。在此,我特别感谢 Srinivas“B. K.”Bagepalli(通用电器公司研究和发展部)、Eric Crabtree、Tony Davis(洛克菲勒-马丁)、Alec Dobson(孟山都)、Russell Dunn(孟山都)、Brent Ellison(Matrix 工艺一体化)、Murali Gopalakrishnan、Ahmad Hamad、Eva Lovelady、Bahy Noureldin、Gautham “PG” Pathasarathy、Andrea Richburg(美国能源部)、Mark Shelley、Chris Soileau、Carol Stanley(Linnhoff March)、Obaid Yousuf(Platinum)、Ragavan Vaidyanathan(M. W. Kellogg)、Anthony Warren(通用电器塑料公司)、Matt Wolf(联信)、Mingjie Zhu(通用电器塑料公司)。

同时感谢 Matrix 工艺一体化公司总裁 Dennis Spriggs 博士,他将我的研究引入了重要的应用领域,尤其感谢他利用书中的理论开发出一种技术并将之转化到工业实践中。感谢他和他的“Matrix 工艺一体化”工程队伍在将物质一体化应用到各种工业领域过程中所起的先锋作用,感谢他们提供反馈意见并开发重要的专有技术。

感谢各联邦和州机构及公司的相关人员,他们为我在“通过工艺一体化防治污染”方面的研究提供了很多帮助。同时感谢激励我将科研成果转化到教学中去的下列基金提供者:美国国家科学基金中的国家青年研究人基金、Birdsong 杰出教学基金和 Pred Pumphrey 基金。

感谢 LINDO 系统公司为我提供了 LINDO 优化软件。同时感谢 Brent Ellison 先生和 Obaid Yousu 先生在开发物质交换系统软件方面所提供的帮助。

感谢学术出版社的编辑和出版人员所做的细致工作。在此我特别感谢 David Packer 博士、Linda McAleer 先生、Rebecca Orbegoso 先生、Jacqueline Garrett 小姐等的出色工作和合作精神。

我由衷地感谢我的母亲,她是我一生中爱和支持的永恒源泉;并由衷地感谢我的父亲——M. M. El-Halwagi 博士,他是对我影响最深远的良师,是他把我带到化学和环保工程这一奇妙的世界,教给了我人生和工作中最宝贵的理念;同时感谢我的祖父——M. A. El-Halwagi,是他给我灌输了对化学工程深厚的爱和不断求知的欲望;感谢我的妻子——Amal,在过去的20年里她是我人生和工作的伴侣,她为本书贡献了很多鲜明的观点,她一直是我的第一个读者和建设性的批评者,没有她大量的爱、支持、鼓励和永恒的耐心,永远不可能有这本书的出版;最后,感谢我的孩子——Omar 和 Ali,由于“爸爸正在与大气和海洋中的污染而战”,他们错过了很多美好的夜晚、周末和足球比赛。

埃尔-哈瓦格 M. 穆罕默德

译 者 序

2002年7月,旅美学者秦晓云先生向裴重华教授推荐他导师编写的著作——《污染防治与工艺一体化——系统化设计工具》(学术出版社出版),并建议合作将此书译成中文介绍给中国的读者。此书是美国同类著作中的第一本教科书,并被美国多所大学选为教材使用,因此具有较高的学术价值(2003年此书第2次印刷,足以证明其影响深远)。有鉴于此,裴重华教授随后与科学出版社联系,得到了肯定的答复,接着组织人员翻译,历时一年,终于付梓,甚感欣慰。

全书共分12章,第1章由艾亚菲翻译;第2章由李嘉诚翻译;第3章由孙中亮翻译;第4章由马国清翻译;第5~7章由裴重华翻译;第8~10章由秦晓云翻译;第11章由林强翻译;第12章、序言及索引由张德拉翻译;附录I、II由谌伦华翻译;附录III、IV由谢杨林翻译;全书的插图和表格由孙盛杰重新处理;蒋国周校对了全书;全书由裴重华和秦晓云再校、统筹和编排,最后由南京理工大学钟秦教授审定。此译本的出版事宜由科学出版社的杨震编辑负责。

本书的出版得到了海南大学应用化学重点学科建设经费和海南大学教材基金的资助,海南大学学校领导给予了大力支持,同时科学出版社为购买本书的中文版权付出了艰苦的努力,本书的原著者美国得克萨斯农工大学化学工程系的埃尔-哈瓦格 M. 穆罕默德教授为中译本写了热情洋溢的序言,在此一并致谢。

由于本书中许多专业词汇较新,在现有英汉专业词典中难以查找到相应的译文,故由译者根据书中应有之义予以诠释,不妥之处由译者自行负责,敬祈专家指正。

译者

目 录

中文版序

英文版序

译者序

第 1 章 绪论	1
1.1 环境问题与污染防治	1
1.2 什么是工艺一体化	2
1.2.1 工艺综合	2
1.2.2 工艺分析	4
1.2.3 工艺优化	4
1.3 流程图能否提供整体认识	5
1.4 工艺一体化的两个分支: 物质一体化和能量一体化	8
1.5 本书结构介绍	10
参考文献	10
第 2 章 物质交换单元模型在环保中的应用	14
2.1 什么是物质交换器	14
2.2 交换平衡	15
2.3 界面传质	16
2.4 物质交换器的类型和规格	17
2.5 物质交换系统的成本最小化	23
习题	35
参考文献	39
第 3 章 物质交换系统的设计——图表法	41
3.1 系统与单元	41
3.2 实际问题的范围、影响及复杂性	41
3.3 物质交换系统设计的任务	42
3.4 目标法	43
3.5 对应组成的比例尺	44
3.6 锋位图	45
3.7 构建锋位图(无工艺内物质分离剂)	64
3.8 平衡固定成本与经营成本	68

习题	69
符号	74
参考文献	75
第4章 物质一体化图表法(物质交换截流)	77
4.1 供需关系图(物料源-处理器关系图)	78
4.2 物质一体化在丙烯腈装置中的应用——提高产量、消除瓶颈、 减少废水	79
习题	88
参考文献	93
第5章 物质交换系统的设计——代数法	94
5.1 组成-间隔图	94
5.2 可交换负载表	95
5.3 物质交换层叠图	96
5.4 废水脱酚示例	97
5.5 最少交换器条件下的物质交换系统设计	100
5.6 锋位的可行性标准	100
5.6.1 物流数	101
5.6.2 操作线与平衡线	101
5.7 系统设计	103
5.8 使用物质加载路径平衡固定成本与经营成本	107
习题	109
符号	110
参考文献	111
第6章 物质交换系统的设计——数学法	112
6.1 广义组成-间隔图	112
6.2 有关问题的公式表示法	113
6.3 废水脱酚示例的再研究	114
6.4 出口组成的优化	118
6.5 物流匹配与系统设计	122
6.6 废水脱酚示例的系统设计	124
习题	132
符号	135
参考文献	136
第7章 物质一体化的数学优化法	138
7.1 问题的陈述和挑战	138

7.2 应用物质分离剂的废物物流截流系统设计	139
7.2.1 路线图	139
7.2.2 路线图与锋位图的一体化	142
7.2.3 综合运用路线图与锋位图筛选物质分离剂	142
7.3 示例研究:氯乙烷合成工艺中氯乙醇的截流	143
7.4 隔离、混合和直接循环的优化策略	158
7.5 示例再研究:氯乙烷合成工艺中氯乙醇的隔离、混合和循环	158
7.6 隔离、混合和循环与截流的一体化	164
习题	165
符号	169
参考文献	171
第8章 反应性物质交换系统设计	172
8.1 反应性物质交换系统的设计目标	172
8.2 反应性物质交换系统相应组成的比例尺	173
8.3 设计方法	180
习题	186
符号	192
参考文献	194
第9章 热量一体化与物质一体化的综合设计	195
9.1 热量交换系统的设计	195
9.1.1 利用锋位图确定加热和制冷的最低能耗	196
9.1.2 示例:制药工艺	198
9.1.3 利用代数层叠图确定加热和制冷的最低能耗	202
9.1.4 利用层叠图对示例进行再研究	203
9.1.5 利用数学规划(优化)法求最低能耗	206
9.1.6 利用线性规划对示例进行再研究	207
9.2 热量和反应性物质交换系统的综合设计	209
9.3 示例:废气除氨过程中的结合热交换和反应性物质交换系统 综合设计	211
9.4 示例:硝酸铵厂的热量和物质一体化	216
习题	218
符号	220
参考文献	221
第10章 挥发性有机物冷凝的热致分离系统设计	223
10.1 问题介绍	223

10.2 系统配置	223
10.3 物质和热量目标的一体化	225
10.4 设计方法	225
10.4.1 外部制冷能耗的最小化	226
10.4.2 制冷设备的选择	226
10.4.3 固定成本与经营成本之间的平衡	227
10.5 典型示例: 废气稀释	227
10.6 示例: 除去甲乙酮	228
10.7 压力的影响	232
习题	233
符号	233
参考文献	234
第 11 章 膜分离系统的设计	236
11.1 膜分离系统的分类	236
11.2 反渗透系统	237
11.2.1 作用原理	237
11.2.2 中空纤维反渗透膜模型	238
11.3 多重反渗透膜的设计	245
11.3.1 反渗透系统的设计: 问题陈述	245
11.3.2 反渗透系统设计的捷径	246
习题	253
符号	257
参考文献	258
第 12 章 环保化学及化学药品种类	260
12.1 环保化学反应设计	260
12.2 环保化学药品的研发	262
参考文献	264
附录	267
附录 I 各组分间的重要关系	267
I.1 质量与物质的量	267
I.2 气体组成与其分压	267
I.3 百万分浓度	268
附录 II 转换因子(单位换算)	269
附录 III 工艺的经济性评价	271
III.1 设备成本预算	271

Ⅲ.2 固定资产投资	272
Ⅲ.3 总投资	273
Ⅲ.4 年度总成本	274
Ⅲ.5 利润标准	274
附录Ⅳ 软件包使用指南	275
Ⅳ.1 物质交换系统软件	275
Ⅳ.2 LINGO 软件	277
参考文献	279

第 1 章 绪 论

本章对污染防治与工艺一体化进行了简要概述。首先,讨论了减少工业废物的主要方法,提出了工艺一体化是系统化防治污染的可靠工具,并具体探讨了工艺一体化的三个主要方面——综合、分析和优化;其次,将工艺一体化分类为物质一体化和能量一体化,由于物质一体化在污染防治中起着关键作用,本书将予以重点介绍;最后,说明本书的结构和范围。

1.1 环境问题与污染防治

对环境的影响是化学工业目前面临的最严重的挑战之一。仅美国,估计每年就产生大约 120 亿 t(湿重)的工业废物(Allen and Rosselot, 1994)。随着对惊人数量的工业废物以及废物排放到自然界的严重后果的认识不断加深,加工工业更加重视环境保护并采取更加积极主动的措施。在过去的 20 年里,人们为减少工业废物付出了巨大努力,环境保护的焦点逐渐从下游污染控制转变为更加主动地从污染产生的源头加以控制。在 20 世纪 70 年代,加工工业主要的环保措施是管端治理,该方法是通过安装污染控制设施来降低废物排放量或把排放物的毒性降到合理水平。大多数的此类装置都采用转化工艺(如焚烧或生化处理)将污染物转变成有益的物质。到了 20 世纪 80 年代,各化工企业都热衷于采取回收/再利用的措施,将生产流程终端的污染物(一般通过分离工艺)回收、再利用或出售。该方法得到大力推广的原因在于人们认识到只要能找到经济的方式来处理污染物,那么污染物是可以成为有价值的工业原料的。目前,高度综合的污染防治概念引起了工业界的浓厚兴趣。

在文献上可以找出许多有关污染防治的定义(比如 El-Halwagi and Petrides, 1995; Freeman, 1995; Theodore et al., 1994; Noyes, 1993),它们的定义由于污染防治范围的不同而有所差异。本书中,污染防治一词是指在切实可行的程度下减少对环境排放废物的任何行为。其他词如废物最少化、废物控制和废物治理与污染防治是同义的。

工艺中防止污染的方法分为四个等级,等级确定了废物治理的优先顺序。

1) 源头控制 指从源头上减少废物的数量或降低其毒害性,如进行装置改造、工艺设计与操作方法的改进、产品的改良或重新设计、原材料的替代以及采用环境友好的化学反应。

2) 循环/再利用 指在加工工艺中,使用污染物流。一般在回收/再利用系统中,主要使用分离技术回收有用的物质,如溶剂、金属、无机物和水。

3) 管端治理 指应用化学、生物与物理工艺来减少流程终端排放的废物总量或降低废物的毒害性。处理方法包括生物处理系统、化学沉淀、絮凝、凝结以及锅炉和工业炉焚烧(BIF)。

4) 处理 指对废物进行最后处理,如进行深井灌注和将有害物从厂区运送至废物治理设施。

污染防治和本书的核心内容是前两个方法:源头控制和循环/再利用。在上游减少污染源比在下游(或管端)采取防治措施的效果更好。换句话说:“先抓关键,再及其余”。尽管如此,上述四种方法的综合运用是十分重要的。有效的设计方法必须能使所用的方法达到最佳程度。

由于对污染防治的重视程度不断增加,一些企业一直在积极开发和采用各种不同方法来防治污染。但大多数方法只能解决个别工厂的特定污染问题。该方法所获得的技术和经验由于不能推广应用到其他工厂和工业领域而使其应用受到了限制。缺乏普适应用技术使得开发污染防治方法十分费力。如果要为某一给定的工业企业开发污染防治技术,工程师们往往要从多种方案中进行选择。他们要选择污染防治的技术形式、系统构成、各操作单元的连接方式以及操作条件。大多情况下,可供选择的方案数不胜数。因此,人们需要一种系统的、普适的污染防治方法。该方法超越特定工艺环境,从全局考虑环境问题,并综合下列因素:①所有工艺目标,包括低成本、提高产量、节约能源,以及环境友好;②接受废物的介质,即空气、水、土壤;③各种污染防治方法,即源头控制、循环/回收再利用、管端治理、处理;④所有废物控制技术。有鉴于此,工艺一体化可为实现前述目标提供卓越的系统。

1.2 什么是工艺一体化

化工工艺是由相互联系的各单元和物流组成的一体化系统,而且应当如此。工艺一体化是一种从全盘来考虑工艺设计、工艺革新与操作的方法,它着重工艺的整体性。由于工艺各单元、各物流和各个目标间存在强烈的相互作用,工艺一体化提供了一个独特的方法使人们从根本了解工艺全貌,从而确定它达到的性能目标,系统决策以实现目标。任何复杂工艺一体化方法均包括三方面:综合、分析和优化。

1.2.1 工艺综合

工艺综合(Westerberg, 1987)可以定义为:分步进行的决策过程,即推断①应使

用哪些已知条件;②对给定的设计问题,如何将已知条件相互联系构建最佳解决方案。因此,工艺综合的研究领域涉及不同工艺因素的一体化和制作系统工艺流程图,以满足特定目标。工艺综合是一项较新的工程设计方法,该领域的评论可参阅文献(如 El-Halwagi and El-Halwagi, 1992; Douglas, 1992; Westerberg, 1987; Stephanopoulos and Townsend, 1986; Nishida et al., 1981)。

工艺综合提供了一个通过系统化方法解决诸多设计问题的有效途径。它可以指导设计者获得并筛选出各种工艺方法、方案、结构及操作条件。在大多数情况下,可供选择的工艺方案数量实在太多(很多情况下是无限的)。如果缺乏工艺综合的系统方法,工程师通常只能基于经验和企业的偏好开发出部分可供选择的工艺方案;然后,设计人员挑选出其中最经济的方案并认定它就是“最优”方案。然而,仅仅靠评估有限数量的方案很难得到真正的最佳方案,甚至与最优方案南辕北辙。此外,全凭老经验产生创新设计的可能性微乎其微。

由于可供选择的工艺方案数量巨大,所以综合技术能从许多备选方案中筛选出最优的方案而不需要将众多方案一一列举的优点显得尤为重要。有两种综合方法可以用来确定解决方案并规避众多问题外延的干扰:非结构法和结构法。非结构法(或目标法)是通过一系列的步骤来处理综合问题,在每一步中,都可以确定一个设计目标并用于以后的各个步骤。这些目标是在每一具体的设计步骤之前决定的,而且不受最后系统结构的影响。目标法有两大优势:第一,每步问题的复杂程度减少到了可控的程度,从而避免出现组合性问题;第二,该方法可使设计者对系统的性能与特点有很好的认识。

工艺综合的第二种方法是结构法。该方法建立一个系统,使其包罗了所有具有潜在影响的结构。该系统包括工艺图表、空间状态图和超级结构(如 Friedler et al., 1995; Bagajewicz and Manousiouthakis, 1992; Floudas et al., 1986)。该方法的数学模型一般采用混合整数非线性规划(MINLP)的模式。该规划的目标是确定两类变量:整数变量和连续变量。整数变量与方案中特定工艺和装置的存在与否相对应。例如,当选择某一个装置时,二进制整数变量值假设为1,当该装置未被选入方案时,变量为0。而连续变量与非离散设计和操作参数如流速、温度、压力和装置大小的最佳值相对应。虽然该方法可能比非结构法更有生命力,但它的成功与否与三个关键因素息息相关:第一,系统模型应尽可能多地包含潜在方案,若某一结构的结合不善,将得到次优方案;第二,数学模型的非线性特性意味着获得这些优化规划的全面方案有时可能是虚假的结果,由于现有商业优化软件不能保证全面解决普通混合整数非线性规划,因此该问题是主要障碍;第三,一旦将综合问题转化成混合整数非线性规划,工程师的投入、选择、判断和见识将无用武之地。因此,将这些见解一并考虑到模型中去显得尤为重要,这确实是一项繁重的工作。

工艺综合的结果是一张表示不同装置结构及其相互连接的流程图。而后对流

程图的特性进行分析是十分必要的。

1.2.2 工艺分析

综合的目的在于将工艺单元组成一个有机的整体,而工艺分析是将整体分解成工艺单元以分别研究其性能。因此,一旦工艺综合化,就可用分析技术预测其具体特点(如流速、组成、温度与压力等)。分析技术包括数学模型、经验公式和计算机辅助工艺仿真工具(如 ASPEN Plus、ChemCAD III、PRO II、HYSIM)。另外,工艺分析可以通过实验室小试或者中试试验,甚至在现有设备上实际运转,来预测和验证工艺性能。

1.2.3 工艺优化

一旦完成工艺综合和确定其性能后,就可知道其是否能满足设计目标。所以,综合和分析是不断交替地进行的,直至达到工艺设计目标。工艺目标的实现表明我们得到了一个行之有效的方案,但不一定是最优方案。故而复杂工艺一体化方法中必须包括优化这一步骤。优化就是从一系列备选方案中筛选出“最优”方案。方案的优良程度可以通过目标函数(如投资费用、利润、废物产量)的最大值化或最小值化来进行量化。工艺选取受到系统模型和约束条件限制。约束条件以等式或不等式表示,等式约束条件有物料平衡、能量平衡、工艺模型方程、热力学条件等;而不等式约束条件可能是环境因素(如某污染物排放量应低于规定水平)、工艺因素(如压力、温度或流速不能超过某个给定值)或热力学因素(如系统状态不能违背热力学第二定律)。所有约束条件和目标函数均为线性时的最优化问题称为线性规划(LP),反之称为非线性规划(NLP)。最优化变量的性质也影响优化规划的分类。如果最优化模型中含有连续(实)变量(如压力、温度、流速),及整数变量(如0、1、2...)时则被称为混合整数规划(MIP)。根据线性或非线性的特征又可将混合整数规划分为混合整数线性规划(MILP)和混合整数非线性规划。

许多书上都介绍了最优化理论的原理及运算法则(如 Grossmann, 1996; Floudas, 1995; Edgar and Himmelblau, 1988; Reklaitis et al., 1983; Beveridge and Schechter, 1970),而且在市面上可以购买到几种软件包(如本书附送的 LINGO 软件)。值得一提的是,大多数最优化软件都能获得线性规划和混合整数规划的全面解决方案。但没有哪一个商业软件包能保证全面解决非凸出非线性规划和混合整数非线性规划。最近,人们在研制高效技术全面解决非凸出非线性规划和混合整数非线性规划方面进行了有益的探索(如 Vaidyanathan and El-Halwagi, 1994, 1996; Sahinidis and Grossmann, 1991; Visweswaran and Floudas, 1990)。通过不懈的努力,在未来几年内,能切实解决一般非线性规划和混合整数非线性规划问题的应用软件有可能会问世。

工艺一体化的优化组合促使综合和分析交替进行,直至接近最优化状态。在

许多情况下,优化也可用于综合过程中。比如,在综合的目标法中,用优化来协调不同目标间的关系。在综合的结构法中,优化通常是综合任务的建模和求解的主要方法。

1.3 流程图能否提供整体认识

在化工过程中,物料与能量间有强烈的相互作用。一般来说,工厂的总目标是转化和加工物料,能量用于推动化学反应、高效分离和驱动泵、压缩机进行工作。图 1.1 为工艺主要投入产生的物质-能量模型。工艺流程图反映工艺单元、物流以及它们之间的联系。因此工艺流程图描述了原材料的预处理(如通过分离、细化),然后通过化学反应转化,最后通过分离、纯化变成所需的产品、副产品及废物的整个过程。从这点上说,工艺流程图是工程师实施生产计划,建立基本物料和能量的平衡和模拟工艺性能的有力工具。但是,那是我们所需了解的工艺的全部吗?在任何工厂,都有一个整体认识问题,它勾画出物料与能量流向的全貌,并由此可以得到全厂物料种类(污染物、产品等)和能量分配的最优方案。从传统工艺流程图上不能直接得到这些整体认识,为说明此观点,用下面活生生的例子予以证实。

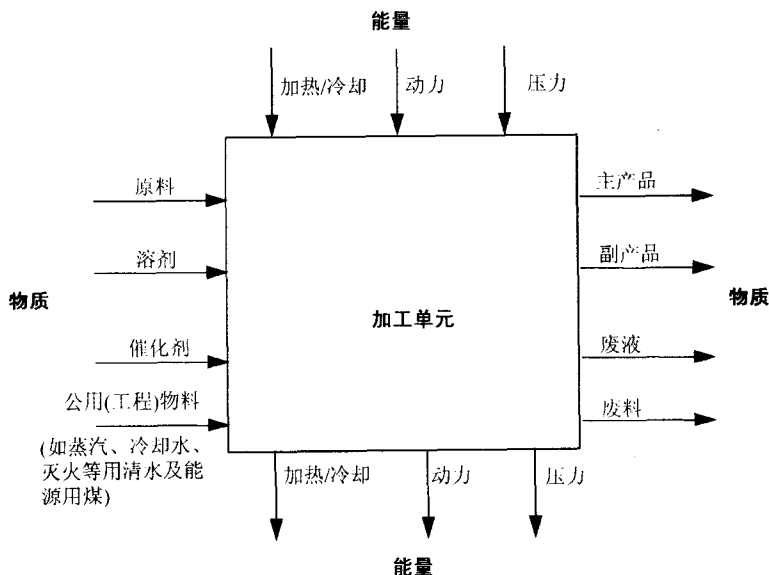


图 1.1 工艺主要投入产出的物质-能量模型(Garrison et al., 1996)

一工厂用乙醇(C_2H_5OH)与盐酸通过催化反应生产氯乙烷(C_2H_5Cl)(El-Halwagi et al., 1996),图 1.2 是氯乙烷生产工艺简易流程图。乙烯(C_2H_4)首先通过催化水