

■ 高等学校理工科化学化工类规划教材

化工过程分析与综合

ANALYSIS AND SYNTHESIS FOR CHEMICAL ENGINEERING PROCESS

主编 都 健 主审 姚平经



大连理工大学出版社
DALIAN UNIVERSITY OF TECHNOLOGY PRESS

■ 高等学校理工科化学化工类规划教材

化工过程分析与综合

ANALYSIS AND SYNTHESIS FOR CHEMICAL ENGINEERING PROCESSES

主编 都 健

主审 姚平经

编著 (按姓氏笔画为序)

王克峰 王 瑶 孙亚琴

俞红梅 姚平经 都 健

董宏光 韩志忠 樊希山



大连理工大学出版社
DALIAN UNIVERSITY OF TECHNOLOGY PRESS

图书在版编目(CIP)数据

化工过程分析与综合 / 都健主编. —大连:大连理工大学出版社, 2009. 1

高等学校理工科化学化工类规划教材

ISBN 978-7-5611-4597-5

I. 化… II. 都… III. 化工过程—分析—高等学校—教材 IV. TQ02

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2008)第 191956 号

大连理工大学出版社出版

地址:大连市软件园路 80 号 邮政编码:116023

发行:0411-84708842 邮购:0411-84703636 传真:0411-84701466

E-mail: dulp@dulp.cn URL: http://www.dulp.cn

大连力佳印务有限公司印刷 大连理工大学出版社发行

幅面尺寸:185mm×260mm 印张:14.5 字数:326千字
2009年1月第1版 2009年1月第1次印刷

责任编辑:于建辉

责任校对:欣宇

封面设计:宋蕾

ISBN 978-7-5611-4597-5

定价:25.00元

【前言】

“化工过程分析与综合”是化工类本科生的必修课,本课程的任务是:使学生掌握化工过程系统模拟与分析的基本概念和原理;了解建立化工单元操作和过程系统模型的方法及过程模拟的基本技能;掌握过程系统综合的基础知识和策略;了解该学科领域的有关发展前沿。

本教材是在《过程系统分析与综合》(姚平经主编,大连理工大学出版社出版)一书的基础上修订而成的。根据教育部对高等理工科院校课程的设置,将其更名为《化工过程分析与综合》。

经过多所高校的长期使用,很多读者一致认为由姚平经主编的《过程系统分析与综合》一书有作者的科研成果,因此独具特色,实用性强。此次编写除保持原书的特色和精华外,对原书体系进行了适当调整,对部分内容进行了增删或简化,同时,加强了通用过程模拟软件和过程综合软件的功能和使用方法的介绍,力求为本科生提供一本精炼、准确和系统性的教学用书,使之适合当前的教育教学理念,突出对学生创新思维和创新能力的培养。

全书共分7章,主要内容有:化工过程系统模拟与分析的基本概念与原理;建立化工单元操作与过程系统数学模型的方法及过程模拟的基本技能;过程系统综合与集成的基础知识与策略以及该学科领域的有关发展前沿。

另外,本书安排了“课程论文”教学环节,要求运用所学基本原理、方法,完成一个适当规模的过程系统模拟、优化或综合的上机题目。“课程论文”的题目来自科研项目、工程实际的子题目或基本原理、方法的验证与应用。教师提供题目清单,由学生自选,学生以学术论文的形式提交书面报告。这一教学环节对培养学生掌握知识,运用和创造知识很有益处。

学习该课程需先修“应用数学”、“物理化学”及“化工原理”等课程,所以安排在三年级下学期或四年级上学期为宜。

本书由都健主编。第1章由都健、姚平经编写;第2、3章由韩志忠、都健、

樊希山编写;第4章由王克峰、韩志忠、姚平经编写;第5章由王克峰、韩志忠、俞红梅、孙亚琴、姚平经编写;第6章由董宏光编写;第7章由王瑶、都健编写。

本书由姚平经教授主审,同时也得到了樊希山教授的帮助,在此表示深深的感谢!

由于作者水平有限,书中难免有不妥与错误之处,敬请指正。您有任何意见或建议,请与我们联系:

邮箱: jcjf@dutp.cn

电话:0411-84707962 84708947

编者
2008年12月

目 录

第 1 章 绪 论 /1

- 1.1 过程系统工程的发展历史和
 研究内容 /1
 - 1.1.1 过程系统工程的发展历史 /1
 - 1.1.2 过程系统工程的研究内容 3
- 1.2 基本概念 /3
 - 1.2.1 过程系统 /3
 - 1.2.2 过程系统分析 /4
 - 1.2.3 过程系统综合 /4
 - 1.2.4 过程系统优化 /5
- 1.3 本课程的特点 /5
- 参考文献 /5

第 2 章 单元过程的模拟 /6

- 2.1 基本概念 /6
- 2.2 单元过程的自由度分析 /7
- 2.3 单元过程的稳态模拟 /11
 - 2.3.1 管壳式换热器数学模型
 及模拟 /12
 - 2.3.2 复杂蒸馏塔数学模型及模
 拟 /20
- 2.4 化工单元过程的动态模拟 /34

本章符号说明 /37

参考文献 /39

习 题 /39

第 3 章 过程系统的模拟 /44

- 3.1 过程系统模拟的基本任务及
 结构 /44
 - 3.1.1 过程系统模拟的基本任务 /44
 - 3.1.2 过程系统模拟的基本结构 /45

- 3.2 过程系统结构的表达 /46
 - 3.2.1 图形表示 /46
 - 3.2.2 矩阵表示 /48
- 3.3 过程系统的分解 /51
 - 3.3.1 问题的提出 /51
 - 3.3.2 不相关子系统的识别 /52
 - 3.3.3 不相关子系统的分隔 /53
 - 3.3.4 最大循环网的断裂 /62
 - 3.3.5 模拟的收敛方法 /71
- 3.4 过程系统模拟的基本方法 /74
 - 3.4.1 序贯模块法 /74
 - 3.4.2 联立方程法 /76
 - 3.4.3 联立模块法 /77
- 3.5 过程系统模拟的基本步骤 /78
- 3.6 化工过程稳态模拟软件介绍 /79
- 3.7 过程系统模拟的应用实例 /83
- 本章符号说明 /99
- 参考文献 /99
- 习 题 /99

第 4 章 夹点技术的基础理论 /102

- 4.1 过程系统的夹点及其意义 /102
 - 4.1.1 温-焓图 /102
 - 4.1.2 组合曲线 /104
 - 4.1.3 在 $T-H$ 图上描述夹点 /105
 - 4.1.4 用“问题表格法”确定
 夹点 /109
 - 4.1.5 夹点的意义 /113
- 4.2 过程系统夹点位置的确定 /115
 - 4.2.1 准确地确定夹点位置——

操作型夹点计算 /115

4.2.2 合理地设计夹点位置——

设计型夹点计算 /115

4.3 过程系统的总组合曲线 /116

4.3.1 总组合曲线的绘制 /117

4.3.2 总组合曲线的意义 /120

本章符号说明 /122

参考文献 /122

习 题 /123

第5章 换热器网络的综合 /124

5.1 根据温-焓图综合换热网络法 /125

5.1.1 热力学最小传热面积网络的综合 /125

5.1.2 热力学最小传热面积网络的改进 /129

5.2 夹点设计法 /130

5.2.1 夹点处物流间匹配换热的可行性规则 /130

5.2.2 夹点处物流间匹配换热的经验规则 /134

5.3 换热器网络的调优 /139

5.3.1 最少换热设备个数与热负荷回路 /139

5.3.2 热负荷回路的断开 /141

5.3.3 热负荷路径及能量松弛 /144

5.4 换热器网络综合的结构

优化法 /156

5.4.1 转运模型 /157

5.4.2 最小公用工程费用问题 /158

5.4.3 最少换热设备个数问题 /161

5.4.4 综合的步骤 /162

5.5 换热器设计与换热网络综合软件 /163

本章符号说明 /165

参考文献 /165

习 题 /166

第6章 分离序列综合 /168

6.1 分离序列综合基本概念 /168

6.1.1 分离过程的能耗 /168

6.1.2 分离序列综合问题定义 /170

6.1.3 分离序列综合组合问题 /171

6.1.4 分离序列方案评价 /174

6.2 分离序列综合经典方法 /175

6.2.1 直观推断 /175

6.2.2 渐进调优 /179

6.2.3 数学规划 /184

6.3 分离序列综合启发方法 /190

6.3.1 软计算智能 /190

6.3.2 基于模糊推理的直观推断 /191

6.4 分离序列综合软件介绍 /196

参考文献 /199

习 题 /201

第7章 过程系统集成 /202

7.1 过程系统能量集成 /202

7.1.1 蒸馏过程与过程系统的能量集成 /203

7.1.2 公用工程与过程系统的能量集成 /210

7.1.3 夹点分析在过程系统能量集成中的应用 /213

7.2 过程系统质量集成 /220

7.2.1 质量交换网络综合 /221

7.2.2 质量集成 /222

7.2.3 水网络集成 /222

7.2.4 水网络集成软件 Aspen Water 简介 /223

本章符号说明 /224

参考文献 /224

绪 论

1.1 过程系统工程的发展历史和研究内容^[1~3]

1.1.1 过程系统工程的发展历史

化工过程是指用适当的原料经过一系列物理单元操作和化学反应的单元过程而转化为合乎需要的产品的过程。

过程系统工程(process system engineering, PSE)是一门综合性的边缘学科,它以处理物料-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。过程系统工程广泛地用于化学、冶金、制药、建材、食品等过程中,目的是在总体上达成技术上及经济上的最优化,以符合可持续发展的要求。

随着科学技术的进步,现代过程工业实现了综合生产,生产装置日趋大型化、复杂化,产品品种精细化,要求整个装置乃至一个联合企业实现最优设计、最优控制和最优管理,并在安全可靠、对环境污染最小的状况下运行。在能源、资源日益紧张的情况下,以单元操作概念为基础的化学工程方法已不能适应时代的要求。

20世纪60年代初,在化学工程、系统工程、运筹学、数值计算方法、过程控制论及计算机技术等学科的基础上,产生和发展起来一门新兴的技术学科——过程系统工程。由于化工过程是一类典型的过程系统,而且关于化工系统工程的研究开展得较早、较为深入,在一些场合常将化工系统工程作为过程系统工程来讨论。

20世纪60年代末至70年代末是过程系统工程产生和发展的理论准备时期,这个时期的活动主要在学术界,是学术酝酿期。这期间奠定了过程系统工程学科的理论基础及研究方法,明确了学科范畴为过程系统的分析、过程综合和过程控制。

20世纪80年代初至90年代末是过程系统工程成长的时期。一方面,随着计算机应用的普及,采用化工系统工程方法,陆续研制出有效的工业用化工流程通用模拟系统,并对过程生产实现计算机控制,取得了显著的经济效益。另一方面,由于20世纪70年代石油危机的挑战,需要大幅度节能降耗,石油化工装置的大型化、综合化的需求,迫切需要开发新的手段来分析、设计和控制这些复杂的化工系统,这些动因就促成了过程系统工程的大发展。

在这个时期,过程系统工程已经由学术理论走向工业应用,不仅在化工、石油、石油化

工、核工业和能源工业中获得广泛应用,而且向冶金、轻工、食品等连续加工过程工业部门推广,有力地促进了这些部门生产技术的飞速发展,并实现了不少重大技术突破。以 Aspen Plus, HYSYS 和 PRO/II 为代表的流程模拟技术开发取得明显效果,在世界各地科研院所和工厂企业广泛应用,成为工程师手中必不可少的工具;人工智能技术及过程集成技术在“节能降耗”方面的应用也取得了很好的成果。同时,化工系统工程学科在理论、方法和内容方面也在不断完善和发展。

新世纪开始到现在,过程系统工程进入扩展时期。表现在研究范围和研究内容两方面都在扩大。

传统的过程系统工程研究对象范围通常在 $10^{-1} \sim 10^2$ m (即颗粒、薄膜、气泡到制造车间、工厂),现正向两极扩大:微观方面向分子模拟、产品设计扩充(纳米级);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。

研究内容方面,过去“过程(process)”是指物理-化学制造过程,现在则已扩大到管理业务过程(business process)。也就是说,由研究工程决策延伸到研究商务决策。由于现在进入了可持续发展时代,过程优化的判别指标也在变化,除了传统的经济效益外,要增加健康、安全和环境影响、可控制性和可维护性等,将来还会增加更多的社会因素,如气候影响、生命周期影响、风险最小化等。这样一来,最优化也就成了多目标优化。

总之,过程系统工程一方面正在迎接全球性竞争的挑战;另一方面正在迎接可持续发展的挑战。这都要求过程工业企业在操作运行中不仅要考虑经济效益,而且要同时考虑环境保护。于是,20世纪90年代涌现出“绿色浪潮”,如绿色产品、绿色制造、绿色技术、绿色化学、绿色化工等。上述挑战必然要求过程系统工程的变革和创新,于是,产生了“绿色过程系统工程”。

绿色过程系统工程的研究对象和过程系统工程是相同的,仍以处理物料-能量-资金-信息流的过程系统为对象,研究该类系统在技术经济合理的前提下,其资产配置、计划、管理、设计和操作控制对环境影响最小的规律,其目的是在总体上使系统达到可持续发展的目标。

绿色过程系统工程除了在方法论上继承过程系统工程多年来形成的研究方法和手段外,还要吸收绿色化学化工、工业生态学、生态工程、环境科学与工程等相邻学科的研究方法和成果,这种情形如图 1-1 所示。现代的“过程系统”也已不再限于过程工厂中的制造系统,而应当从经营管理业务和决策过程,即供应链角度来考查。所谓供应链是指从原料采购、生产、储存、仓库管理、发货、运输、履行订单,直到客户服务及市场需求预测、订货的全过程。此外,还应当着眼于产业的生命周期的全过程,考查其对环境造成的影响。

绿色过程系统工程从以下几方面为过程工业的环境保护、责任关怀及可持续发展作贡献:

(1) 绿色过程系统的模拟与分析

包括微观层次的绿色产品开发和反应路径的综合(原子经济反应),介观层次的绿色制造流程模拟及宏观层次的生态经济系统热力学分析。

(2) 绿色过程的评价指标体系

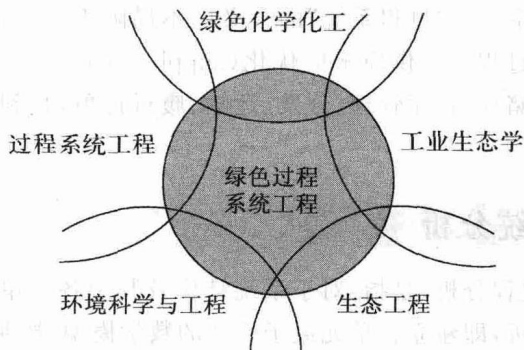


图 1-1 绿色过程系统工程与相邻学科的关系

不同的学术团体/科学家从不同的角度提出各种环境评价指标,形成各种不同的评价体系。在宏观评价时用的是环境性能指标,而对制造过程评价时用的是过程筛选指数,现在还没有统一的公认体系可循。

(3) 绿色过程系统的集成(设计)

现在要求在概念设计阶段就考虑环境影响,因为如果在概念设计阶段解决某个环境问题花费 1 元钱,在详细设计阶段就得花 10 元,到制造施工时再解决就得花 100 元,到工厂建成投产后再解决就可能需要 1 000 元。

(4) 多目标优化算法

传统的优化目标是单一的经济效益,而可持续发展要求考虑的目标至少是二元的(如经济效益最大、排度量最小),有时甚至是多元的目标函数,这就要求发展多目标优化算法。过去的多目标优化算法总是用各种办法将多目标转化成单目标,直到 20 世纪 90 年代各种多目标遗传算法才陆续开发出来。

1.1.2 过程系统工程的研究内容

过程系统工程的基本内容是:从过程系统的整体目标出发,根据系统内部各个组成部分的特性及其相互关系,确定过程系统在规划、设计、控制和管理等方面的最优策略。

过程系统工程的研究内容主要有:过程系统模拟,包括稳态过程系统模拟和动态过程系统模拟;过程系统综合;过程系统的操作与控制,包括数据的筛选与校正、过程操作优化、过程安全监控及事故诊断和操作模拟培训系统;间歇过程的设计与操作优化;人工智能技术的应用等。

1.2 基本概念

1.2.1 过程系统

过程系统是对原料进行物理的或化学的加工处理的系统,它由一些特定功能的过程单元按照一定的方式相互联结而组成,它的功能在于实现工业生产中的物质和能量的转换;过程单元用于进行物质和能量的转换、输送和储存;单元间通过物流、能量流和信息

流相连而构成一定的关系^[4]。“过程系统”的含义已不局限于生产工艺过程,而逐步延伸到经营管理业务和决策过程——供应链的优化(supply chain optimization);所谓供应链是指从原料采购、生产、储存、仓库管理、分发、运输、履行订单,直到客户服务及市场需求预测、订货的全过程^[5]。

1.2.2 过程系统分析

过程系统分析(或过程分析)是指:对于系统结构及其中各个单元或子系统均已给定的现有过程系统进行分析,即建立各单元或子系统的数学模型,按照给定的系统结构进行整个系统的数学模拟,预测系统在不同条件下的特性和行为,借以发现其薄弱环节并给以改进^[3]。过程系统分析的概念如图 1-2 所示,即对于已知的过程系统,给定其输入参数,求解其输出参数。具体些说,大致包括过程系统的物料、热量衡算,确定设备负荷、费用,以及对过程系统进行技术、经济和环境影响等多目标评价。化工过程模拟系统是过程系统分析的主要工具。

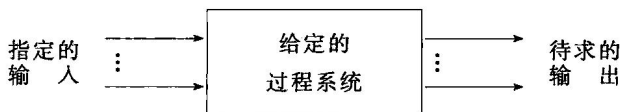


图 1-2 过程系统分析示意图

1.2.3 过程系统综合

在哲学中,为了构成较为完整的观点或体系,将各部分或各种因素结合在一起,叫做综合。过程系统综合(或过程综合)是过程系统工程学的核心内容,是指:按照规定的系统特性,寻求所需的系统结构及其各子系统的性能,并使系统按规定的目标进行最优组合^[3]。过程系统综合的概念如图 1-3 所示。即,当给定过程系统的输入参数及规定其输出参数后,确定出满足性能的过程系统,包括选择所采用的特定设备及其间的联络关系,并提供某些变量的初值。在设计新建装置时,过程综合用于从众多备选方案中选择最优流程。

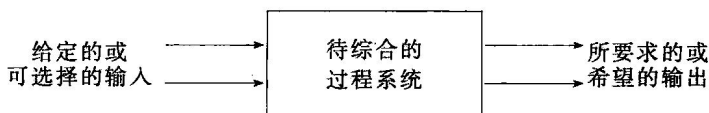


图 1-3 过程系统综合示意图

过程综合需要以过程分析为基础,同时过程综合又对过程分析提出新的要求,过程系统设计是综合与分析交替过程的整体。

过程系统综合是一个极为复杂的大系统、多目标最优组合问题,是过程系统工程学的一个前沿领域。

过程系统综合研究的主要课题有:①反应路径的综合;②反应器网络综合;③换热器网络综合;④分离序列综合;⑤公用工程系统综合;⑥控制系统综合;⑦全流程系统综合;⑧过程系统能量、质量集成。

过程系统综合的方法可归纳成4种基本方法:①分解法;②直观推断法;③调优法;④结构参数法。人工智能技术以及几种方法的合理组合是一种发展趋势。

1.2.4 过程系统优化

过程系统优化或系统优化可分为参数优化和结构优化。参数优化是指:在一已确定的系统流程中,对其中的操作参数(如温度、压力和流量等)进行优选,以使某些指标(如费用、能耗和环境影响等)达到最优;如果改变过程系统中的设备类型或相互间的联结,以优化过程系统,则称为结构优化^[6]。现场生产装置由于原料、负荷以及产品质量要求等发生变化,与原设计不符合,或个别设备已更新(如更换了新催化剂)或老化(催化剂老化,换热设备结垢等),因而使过程系统操作条件不协调,并非处于最佳操作状态,针对这种情况,需要采用过程系统优化技术以实施过程离线或在线操作优化。

1.3 本课程的特点

本课程注重基本概念、原理、方法和策略的论述,以便使学生掌握系统的知识和综合的能力去应对变化的环境世界的挑战。

本课程采用的研究方法是系统的方法论,即把研究的对象系统看做一个整体,同时把研究过程也看做一个整体,并贯穿着优化的思想,即把系统中可调的部分调节到获得可能的最优性能。

本课程的一个最基本的目的是讨论化工过程系统设计的现代化方法和策略,即建立过程系统的数学模型,描述出系统中每一部分及总体性能,并给以评价;应用过程集成技术、数学规划方法和人工智能技术等对过程系统进行综合优化。

参考文献

- 1 成思危. 过程系统工程辞典[M]. 北京:中国石化出版社,2001
- 2 姚平经. 过程系统分析与综合[M]. 大连:大连理工大学出版社,2004
- 3 成思危,杨友麒. 过程系统工程的昨天、今天和明天[J]. 天津大学学报. 2007,(3): 321-328
- 4 格隆,等. 过程系统工程(上册)[M]. 陆震维,译. 北京:化学工业出版社,1983
- 5 中国大百科全书编辑委员会. 中国大百科全书·化工卷[M]. 北京:中国大百科全书出版社,1989
- 6 Westerberg A W, Hutchison H P, Motard R L, et al. Process Flowsheeting[M]. Cambridge:Cambridge University Press,1979

单元过程的模拟

2.1 基本概念^[1~4]

在实际化工生产中,一套化工生产装置的合理设计或实际化工生产装置的优化操作、生产故障的分析诊断,以及生产装置生产能力的预测或评价等均离不开过程系统的模拟。单元过程的模拟是过程系统模拟的基本单元模块,也可以独立使用。所谓模拟(simulation),就是采用一能反映研究对象本质和内在联系,与原型具有客观的一致性,且可再现原型发生的本质过程和特性的模型,来研究和设计原型过程的方法。这里所指的模型可以是一小型或微型实验装置,也可以是一描述原型的数学方程组。前者称为物理模型,后者称为数学模型。故采用物理模型装置进行研究称为物理模拟,采用数学模型进行研究则称为数学模拟。数学模拟可视为在计算机上进行实验研究,比物理模拟经济、灵活得多,可以减少中间放大实验,缩短了开发周期,获得难以在实验条件下得到的重要信息,并且可利用现有的理论成果来研究复杂的过程系统。但是,数学模拟的基础仍源于实验研究和工程实际研究。本章主要介绍数学模拟。

数学模拟离不开数学模型(mathematical model),数学模型是通过研究对象或原型的模型化获得的。我们所研究的对象或原型是含有若干化工单元过程的化工过程系统,这些化工单元过程是指对原料进行特定的物理或化学加工的过程,而过程系统则是由这些具有特定功能的单元过程,按照一定方式相互联结所形成的网络。过程系统的功能是实现工业生产中的物质和能量的转换,保证物流的输送和储存。对化工过程系统的模型化,或将某化工单元模型化,就是在现有理论、实验研究、工程实践的基础上,通过分析研究及科学、合理简化,抽象出能够深刻、正确反映过程系统本质的数学描述,即数学方程组。从这个意义上讲,模型化就是建立过程系统的简化物理图像的数学方程式,或建立过程数学模型。

数学模型是对单元过程及过程系统或流程进行模拟的基础,模拟结果的可靠性及准确程度与数学模型有很大关系。不同的过程具有不同的性能,因而需建立不同类型的模型,不同类型的模型求解方法也不同。

1. 稳态模型与动态模型

在模型中,若系统的变量不随时间而变化,即模型中不含时间变量,称此模型为稳态模型。当连续生产装置正常运行时,可用稳态模型描述。对于间歇操作,装置的开、停车过程或在外界干扰下产生波动,则用动态模型描述,反映过程系统中各参数随时间变化的

规律。

2. 机理模型与“黑箱”模型

数学模型的建立是以过程的物理与化学变化本质为基础的。根据化学工程学科及其他相关学科的理论与方法,对过程进行分析研究而建立的模型称为机理模型。例如,根据化学反应的机理、反应动力学和传递过程原理而建立起来的反应过程数学模型,以及按传递原理及热力学等建立起来的换热及精馏过程的数学模型等。而当缺乏合适的或足够的理论依据时,则不能对过程机理进行正确描述,对此,可将对象当做“黑箱”来处理。即根据过程输入、输出数据,采用回归分析方法确定输出与输入数据的关系,建立起“黑箱”模型,即经验模型。这种模型的适用性受到采集数据的覆盖范围的限制,使用范围只能在数据测定范围内,而不能外延。

3. 集中参数模型与分布参数模型

按过程的变量与空间位置是否相关,可分为集中参数模型和分布参数模型。当过程的变量不随空间坐标而改变时,称为集中参数模型,如理想混合反应器等,当过程的变量随空间坐标而改变时,则称为分布参数模型。如平推流式反应器,其数学模型在稳态时为常微分方程,在动态时为偏微分方程。若在以 z 轴为中心的半径方向也存在变化,则该模型为二维分布参数模型。

4. 确定性模型与随机模型

按模型的输入与输出变量之间是否存在确定性关系可分为确定性模型和随机模型。若输入与输出存在确定关系则为确定性模型,反之为随机模型。在随机模型中时间是一个独立变量,若时间不作为变量,则称其为统计的数学模型。

单元过程的模拟是过程系统模拟的基础,本章主要介绍单元过程的模拟。

2.2 单元过程的自由度分析

自由度是一个抽象的概念,同时也是系统的非常重要的参数^[5]。自由度分析的主要目的是在系统求解之前,确定需要给定多少个变量,可以使系统有唯一确定的解。在求解模型之前,通过自由度分析正确地确定系统应给定的独立变量数,可以避免由设定不足或设定过度而引起的方程无解。

单元操作过程的数学模型由代数方程组和(或)微分方程组所构成,假定共有 m 个独立方程式,其中含有 n 个变量,且 $n > m$,则该模型具有的自由度为

$$d = n - m$$

即需要在 n 个变量中给定 d 个变量的值,对选出的 d 个变量赋以不同的值,模型方程得到的解也将有所不同,这些变量称为设计变量;其余 m 个变量可由 m 个方程式解出,称为状态变量。

上述自由度的概念与物理化学课程中的自由度不同。“相律”中,用下式表达系统的自由度

$$d = C - P + 2$$

式中 C ——组分数;

P ——相数。

“相律”中的自由度只包括强度性质(T 、 p 等),而不涉及系统的大小数量(总量、各相的量)。但在建立单元操作过程模型时必然要考虑系统的大小数量,如流股的流量、热负荷以及压力的变化等。

化工热力学中杜亥姆(Duhem)定理指出^[6]:“对于一个已知每个组分初始质量的封闭体系,其平衡状态完全取决于两个独立变量,而不论该体系有多少相、多少组分或多少化学反应。”根据该定理,可推知一个独立流股具有 $(C+2)$ 个自由度,或者说,指定 $(C+2)$ 个独立变量即可确定一个独立流股。如,规定了流股中 C 个组分的摩尔流量以及流股的温度 T 和压力 p ,则该流股就确定了。也可用流股中组分的摩尔分数(即 $C-1$ 个组分的摩尔分数值)和该流股的总摩尔流量来代替各组分的摩尔流量。

值得注意的是,以杜亥姆定理定义自由度时含有归一方程($\sum_{i=1}^C x_i = 1$),若不含归一方程,则独立流股的自由度定义为 $(C+3)$ 。

这里介绍几种主要单元操作过程的自由度分析。

(1) 混合器^[1,2]

简单混合器的示意表达如图 2-1 所示,有两个流股混合成一个流股,每一流股有 $(C+2)$ 个独立变量。对该过程可以建立以下独立方程:

$$\text{压力平衡方程} \quad p_3 = \min\{p_1, p_2\}$$

$$\text{物料衡算方程} \quad F_1 = F_2 + F_3$$

$$x_{j1}F_1 + x_{j2}F_2 = x_{j3}F_3 \quad (j=1, 2, \dots, C-1)$$

$$\text{热量衡算方程} \quad F_1H_1 + F_2H_2 = F_3H_3$$

式中 H ——流股的比摩尔焓;

F ——流股的摩尔流量;

x ——流股中组分的摩尔分数;

p ——压力。

上述混合器的独立方程数

$$m = C + 2$$

混合器的自由度为

$$d = n - m = 3(C+2) - (C+2) = 2(C+2)$$

由上式可见,两独立流股混合过程的自由度为两个独立流股自由度之和,即相当于指定该两个输入流股变量后,混合器出口流股的变量就完全确定了,可用 $(C+2)$ 个独立方程解出。也可指定包括输出流股在内的 $2(C+2)$ 个独立变量,用 $(C+2)$ 个方程求出输入流股中的某些变量。如果混合器有 S 个输入流股,则自由度为 $S(C+2)$,即相当于指定 S 个输入流股变量后,混合器出口流股的变量也就确定了。

(2) 分割器^[1,2]

简单分割器的示意表达如图 2-2 所示,由一股输入物流按一定分率分割成两股物流。

由直观分析得知,当指定 $(C+2)$ 个输入流股变量以及一个分割分率(其值为 $0 \sim 1$ 之间的一个参量),则该分割器的两股输出物流的变量就完全确定了,即该简单分割器的自

由度为 $(C+2)+1$ 。

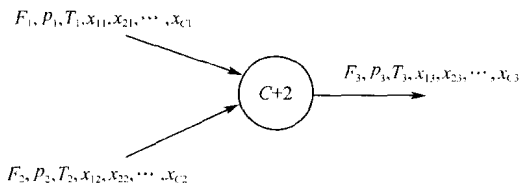


图 2-1 简单混合器示意图

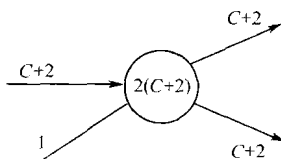


图 2-2 简单分割器示意图

当一个流股分割成 S 个流股时,由以上分析可知,指定 $(C+2)$ 个输入流股变量以及 $(S-1)$ 个分割分率值(因为分割分率之和为 1,故在 S 个分割分率中只有 $S-1$ 个是可以被规定的),则可由 $S(C+2)$ 个独立方程式解出 S 个支流股包含的变量。该分割器的自由度为

$$d = (S+1)(C+2) + (S-1) - S(C+2) = (C+2) + (S-1)$$

(3) 闪蒸器^[1]

如图 2-3 所示,闪蒸器共有三个流股,此外,闪蒸器的加热量 Q 必须作为设备参数。故变量总数为 $3(C+2)+1$,表示闪蒸器变量之间关系的方程为

物料衡算方程

$$F_1 x_{j1} = F_2 x_{j2} + F_3 x_{j3} \quad (j = 1, 2, \dots, C)$$

热量衡算方程

$$F_1 H_1 + Q = F_2 H_2 + F_3 H_3$$

式中 H ——流股的比摩尔焓;

F ——流股的摩尔流量;

x ——流股中组分的摩尔分数。

温度平衡方程 $T_2 = T_3$

压力平衡方程 $p_1 = p_2$

相平衡方程 $x_{j2} = k_j x_{j3} \quad (j = 1, 2, \dots, C)$

这里共有 $2C+3$ 个独立方程式。故闪蒸器的自由度为

$$d = 3(C+2) + 1 - (2C+3) = C+4$$

(4) 换热器^[1]

换热器的示意表达如图 2-4 所示,换热器的换热负荷可作为设备参数由设计规定。对换热器的热流一侧(组分数为 C_1)和冷流一侧(组分数为 C_2)可各写出 (C_1+2) 和 (C_2+2) 个关系式。故自由度为

$$d = 2(C_1+2) + 2(C_2+2) + 1 - [(C_1+2) + (C_2+2)] = C_1 + C_2 + 5$$

即当给定进口热、冷流股的 (C_1+C_2+4) 个变量以及换热负荷(一个变量)后,出口流股的变量就完全确定了,可由 (C_1+C_2+4) 个独立方程式求出。

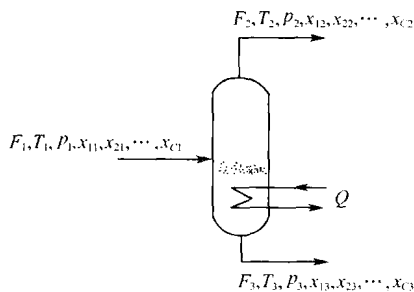


图 2-3 闪蒸器单元示意图



图 2-4 换热器单元示意图

(5) 反应器^[7]

如图 2-5 所示,常用的反应器模型是规定出口反应程度的宏观模型,可称“反应度模型”。不假定反应达到平衡,而是规定了 r 个独立反应的反应度 $\xi_i (i=1, 2, \dots, r)$ 。向反应器提供的热量 Q (移出时 Q 为负值) 和反应器中的压力降 Δp 是两个设备单元参数,所以共有 $r+2$ 个设备单元参数;独立方程数为 C 个组分物料平衡方程、1 个焓平衡方程、1 个压力平衡方程,即独立方程总数为 $C+2$ 。其自由度为

$$d = 2(C+2) + (r+2) - (C+2) = C+r+4$$

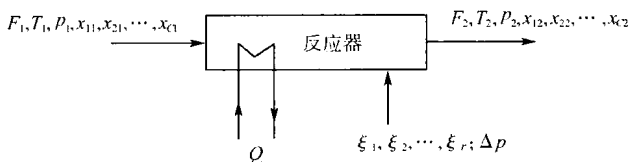


图 2-5 反应器单元示意图

(6) 压力变化单元^[8]

压力变化单元包括阀门、泵、压缩机等单元,如图 2-6 所示。压力变化单元中除了压降 Δp 作为设计参数予以规定,对于泵、压缩机而言,与物料流无关的能量流(轴功 W)也作为设计参数予以规定;独立方程数为 C 个组分物料平衡方程、1 个温度相等(忽略温度变化)方程、1 个压力平衡方程,即独立方程总数为 $C+2$ 。

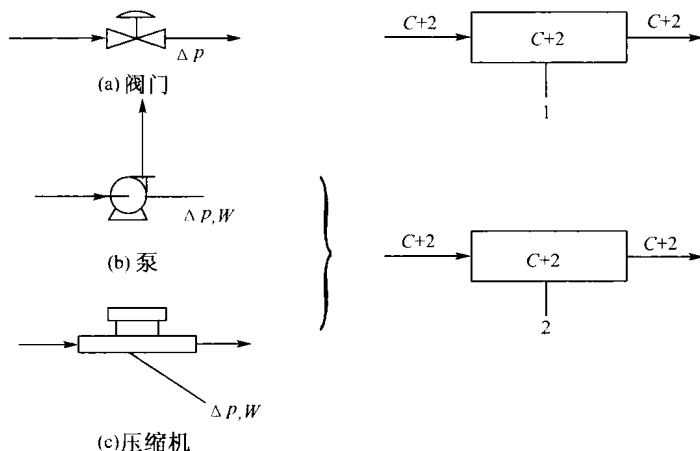


图 2-6 压力变化单元