



普通高等院校“十三五”规划教材

化工过程分析与综合

HUAGONG GUOCHENG FENXI YU ZONGHE

晋梅 主编



华中科技大学出版社

<http://www.hustp.com>

化工过程分析与综合

主 编 晋 梅
副主编 邹琳玲 卢文新
参 编 安 良 吴宇琼
余国贤 王晋黄



华中科技大学出版社
中国·武汉

内 容 提 要

在我国《工程教育专业认证标准》中,“化工过程分析与综合(合成)”是化学工程与工艺专业基础课程之一,是化学工程与工艺专业本科生的专业必修课程。

本书共六章,主要内容包括:化工过程系统模拟与分析的基本概念,建立化工单元过程与过程系统数学模型的方法,过程系统模拟的基本思路和方法,过程系统换热网络综合的思路和方法,分离序列综合的思路和方法,能量系统综合与集成、质量综合与集成以及水综合与集成的基础知识和基本方法。同时,在各章节的内容中,还通过实际工程应用案例将理论知识和工程实际应用进行有机结合。

本书可作为高等学校化学工程与工艺专业高年级本科生教材及化工类研究生参考用书,同时,对从事化工、生物和环境等领域科研工作的人员也有一定参考价值。

图书在版编目(CIP)数据

化工过程分析与综合/晋梅主编. —武汉:华中科技大学出版社,2018.7
ISBN 978-7-5680-3998-7

I. ①化… II. ①晋… III. ①化工过程-分析-高等学校-教材 IV. ①TQ02

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2018)第 165139 号

化工过程分析与综合

晋 梅 主 编

Huagong Guocheng Fenxi Yu Zonghe

策划编辑:王新华

责任编辑:熊彦

封面设计:潘群

责任校对:曾婷

责任监印:周治超

出版发行:华中科技大学出版社(中国·武汉)

电话:(027)81321913

武汉市东湖新技术开发区华工科技园

邮编:430223

录排:华中科技大学惠友文印中心

印刷:武汉市籍缘印刷厂

开本:787mm×1092mm 1/16

印张:13.75

字数:355千字

版次:2018年7月第1版第1次印刷

定 价:32.00元



华中出版

本书若有印装质量问题,请向出版社营销中心调换
全国免费服务热线:400-6679-118 竭诚为您服务
版权所有 侵权必究

前 言

“化工过程分析与综合(合成)”与“化工热力学”“化工原理”和“化学反应工程”一起构成了化学工程与工艺专业基础课程体系,是化工专业本科生的专业必修课程。

本课程是在过程系统工程学的基础上建立起来的,将系统工程学的理论和方法结合化学工程、数值计算和经济技术分析基本方法,在对化工过程进行系统模拟和评价的过程中,培养学生应用化工过程系统模型的建立、求解、优化等基本理论解决化工过程模拟、优化及计算等方面实际问题的工程实践能力。

本书共六章,主要内容包括:化工过程系统模拟与分析的基本概念,建立化工单元过程与过程系统数学模型的方法,过程系统模拟的基本思路和方法,过程系统换热网络综合的思路和方法,分离序列综合的思路和方法,能量系统综合与集成、质量综合与集成以及水综合与集成的基础知识和基本方法。同时,在各章节的内容中,还通过实际工程应用案例将理论知识和工程实际应用进行有机结合。

本书由江汉大学晋梅任主编,江汉大学邹琳玲、中国五环工程有限公司卢文新高级工程师任副主编,江汉大学安良、吴宇琼、余国贤、王晋黄等参与编写。江汉大学路平教授审阅了全书,并提出了宝贵的意见和建议,在此深表感激。在编写过程中,得到了华中科技大学出版社的热情帮助,以及高等学校“专业综合改革试点”项目、湖北省普通高等学校战略性新兴产业(支柱)产业人才培养计划项目和江汉大学研究生教材建设项目的大力支持,再次致以诚挚的谢意!同时,向书中所引用文献资料的中外作者表示衷心的感谢!

由于作者水平有限,书中难免有不妥和疏漏之处,敬请广大读者批评指正。

编 者

目 录

第一章 绪论	(1)
1.1 过程系统工程的发展	(1)
1.2 基本概念	(2)
1.2.1 过程系统	(2)
1.2.2 过程系统分析	(2)
1.2.3 过程系统综合	(2)
1.2.4 过程系统优化	(2)
1.3 过程模拟的一般方法	(3)
1.3.1 物理模拟和数学模拟	(3)
1.3.2 数学模型化的步骤	(3)
1.3.3 数学模型的类型	(3)
1.4 本课程的特点	(5)
本章小结	(5)
参考文献	(6)
第二章 单元过程的模拟	(7)
2.1 自由度	(7)
2.1.1 独立流股的自由度	(7)
2.1.2 自由度的实质	(7)
2.1.3 自由度分析的目的	(8)
2.1.4 设计变量与状态变量	(8)
2.1.5 设计变量确定的原则	(8)
2.2 过程系统自由度分析	(8)
2.2.1 单元过程自由度分析	(8)
2.2.2 过程装置自由度分析	(12)
2.2.3 过程系统自由度分析	(12)
2.3 单元过程的稳态模拟	(13)
2.3.1 单元过程稳态模拟步骤	(13)
2.3.2 单元过程稳态模拟实例	(14)
2.4 单元过程的动态模拟	(23)
2.4.1 动态模拟与稳态模拟的区别	(23)
2.4.2 动态模拟系统的分类	(24)
本章小结	(25)
习题	(25)
参考文献	(26)

第三章 过程系统的模拟	(27)
3.1 过程系统模拟的基础知识	(27)
3.1.1 过程系统模拟问题的类型	(27)
3.1.2 过程模拟软件的基本结构	(29)
3.2 过程系统的数学模型	(30)
3.3 过程系统结构的数学模型	(31)
3.3.1 流程图	(31)
3.3.2 信息流图	(31)
3.3.3 矩阵表示	(33)
3.4 序贯模块法	(36)
3.4.1 序贯模块法的基本问题	(36)
3.4.2 过程系统的分隔	(38)
3.4.3 不可分隔子系统的断裂	(44)
3.4.4 断裂流股变量的收敛方法	(46)
3.4.5 序贯模块法的优缺点	(50)
3.5 联立方程法	(51)
3.5.1 联立方程法的基本问题	(51)
3.5.2 方程组的分隔	(53)
3.5.3 不可(再)分隔方程组的断裂	(56)
3.5.4 稀疏线性方程组的分解	(59)
3.5.5 联立方程法的优缺点	(62)
3.6 联立模块法	(62)
3.6.1 简化模型的建立方法	(63)
3.6.2 联立模块法的特点	(64)
3.7 化工过程模拟软件简介及其应用	(65)
3.7.1 化工过程系统模拟的一般步骤	(65)
3.7.2 化工过程模拟软件简介	(66)
3.7.3 应用实例	(69)
本章小结	(83)
习题	(84)
参考文献	(86)
第四章 换热网络综合	(87)
4.1 换热网络综合方法及一般步骤	(87)
4.2 热力学目标法换热网络综合的基本概念	(88)
4.2.1 传热过程有效能分析	(88)
4.2.2 温-焓图	(89)
4.2.3 组合曲线	(89)
4.3 过程系统的夹点及其意义	(92)
4.3.1 夹点在温-焓图上的描述	(93)
4.3.2 问题表格法确定夹点	(96)

4.3.3 夹点的意义	(99)
4.3.4 传热温差 ΔT_{\min} 的确定	(99)
4.4 过程系统总组合曲线	(101)
4.4.1 总组合曲线的绘制	(101)
4.4.2 总组合曲线的意义	(103)
4.5 基于有效能分析的换热网络综合	(104)
4.6 基于夹点设计法的换热网络综合	(105)
4.6.1 夹点处物流匹配的可行性规则	(105)
4.6.2 物流匹配换热的经验规则	(106)
4.6.3 夹点设计法换热网络综合	(108)
4.7 换热网络调优	(113)
4.7.1 换热网络调优的基本概念	(114)
4.7.2 换热网络调优过程	(115)
4.8 应用实例	(118)
本章小结	(124)
习题	(125)
参考文献	(127)
第五章 分离序列综合	(128)
5.1 分离序列综合的基本概念	(128)
5.1.1 简单塔	(129)
5.1.2 顺序表	(129)
5.1.3 顺式流程	(130)
5.1.4 可能的分离序列数	(130)
5.1.5 分离序列群	(131)
5.1.6 分离序列问题	(131)
5.1.7 目标产物组	(133)
5.1.8 分离序列方案评价指标	(133)
5.1.9 分离序列综合方法	(134)
5.2 直观推断法	(134)
5.2.1 M类规则	(135)
5.2.2 D类规则	(135)
5.2.3 S类规则	(136)
5.2.4 C类规则	(137)
5.3 调优法	(140)
5.3.1 建立初始分离序列	(141)
5.3.2 确定调优规则	(141)
5.3.3 制定调优策略	(141)
5.4 动态规划法	(146)
5.5 分离序列综合软件及精馏塔的优化设计实例	(150)
5.5.1 分离序列综合软件介绍	(150)

5.5.2 精馏塔的优化设计	(150)
本章小结	(164)
习题	(165)
参考文献	(166)
第六章 过程系统集成	(168)
6.1 过程系统能量集成	(168)
6.1.1 蒸馏过程与过程系统的能量集成	(169)
6.1.2 公用工程与过程系统的能量集成	(172)
6.1.3 全局能量集成	(174)
6.1.4 夹点分析在过程系统能量集成中的应用	(178)
6.2 过程系统的质量集成	(181)
6.2.1 质量交换网络综合的基本概念	(181)
6.2.2 利用组合曲线法确定传质过程夹点	(184)
6.2.3 利用浓度间隔图表法确定传质过程夹点	(186)
6.2.4 质量交换网络综合	(191)
6.2.5 质量交换网络的优化	(195)
6.2.6 过程系统的质量集成网络	(197)
6.3 水系统集成	(197)
6.3.1 水系统集成的基本概念	(197)
6.3.2 夹点法确定最小新鲜水用量目标	(199)
6.3.3 最小新鲜水用量目标的水系统集成	(205)
本章小结	(206)
习题	(207)
参考文献	(208)

第一章 绪 论



本章学习要点

- (1) 了解过程系统工程的发展过程；
- (2) 掌握过程工程学的几个基本概念；
- (3) 掌握过程系统数学模型的几种类型；
- (4) 了解课程的特点和过程系统工程的研究方法。

1.1 过程系统工程的发展

化学工程学科是以化学、物理和数学为基础,研究物料在工业规模下发生物理或化学状态变化的工业过程,以及这类过程所用装置的设计和操作的一门科学技术。20世纪20年代所提出的“单元操作”概念奠定了化学工程学科的基础。

20世纪40年代,以运筹学、系统分析和现代控制理论为基础、以计算机为工具,形成了系统工程学科,即研究系统组织、协调、控制与管理的工程技术学科。

20世纪50年代,以石油化工为代表的过程工业得到了蓬勃发展,一方面,实现了工业过程的综合化、大型化、复杂化、精细化,另一方面,对工业过程提出了更高的要求:整个生产过程需要安全、可靠,且对环境污染最小的环境要求和优化的操作条件。

20世纪60年代,在系统工程、运筹学、化学工程、过程控制以及计算机等学科基础上,将系统工程思想和方法用于过程系统研究,形成过程系统工程学科。这一时期是过程系统工程产生和发展的理论建立时期,明确了过程系统工程学科范畴为过程系统分析、过程系统综合和过程系统控制。

20世纪70年代,随着计算机应用的普及和石油危机的挑战,过程系统工程从理论研究逐步走向实践应用。在这一时期,相继开发了化工流程通用模拟系统:PRO/II、HYSYS和Aspen Plus,并将这些模拟软件用于分析、设计和控制日益大型化、综合化和复杂化的化工过程系统,进一步促进过程系统工程学科的发展。

20世纪80年代之后,过程系统工程在化工、石油化工、能源等过程工业中得到了广泛应用,并有利地促进了相关工业生产技术的发展,实现了重大技术突破。

随着20世纪90年代以来,社会对环境问题的日益关注促使节能减排和清洁生产成为可持续发展的前提条件,同时,伴随着近年来大规模供应链和生态工业园大系统的出现等等,都对过程系统工程的研究范围和研究内容提出了新的挑战,尤其是作为目前研究热点的“过程系统的综合”。

化学工程是一类典型的过程系统,因此,关于化工系统工程的研究是较早和较为深入的。其中“化工过程分析与综合”是化工系统工程中重要的研究内容。

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,由一些具有特定功能的单元过程按照一定的方式相互联结组成,功能在于实现工业生产过程中物质和能量的相互转换。过程系统中的单元操作过程(单元过程)主要用于物质和能量的转换、输送和储存,单元过程间通过物料流、能量流和信息流相互联结构成一定的关系。

随着科学技术的发展,过程系统的研究对象已经从传统意义上的化工生产工艺过程逐步朝着两极化延伸:一方面,朝着微观尺度,如分子、原子方向的微型过程系统;另一方面,朝着超大规模系统以及整个企业或工业生态系统等巨型过程系统,如化学工业园区。

1.2.2 过程系统分析

过程系统分析是对一给定系统结构及其中各个单元或子系统的过程系统进行分析,即建立过程系统中各单元或子系统的数学模型,并按照给定的系统结构进行整个过程系统的数学模拟,预测整个系统在不同条件下的特性和行为,借以发现过程系统的薄弱环节并改进。过程系统分析的主要工具是过程系统模拟。

简单来讲,过程系统分析是指在过程系统结构及其中各个单元或子系统特性确定的前提下,借助计算机和系统的数学模型,通过数学模拟的方法,对系统的特性进行评价的方法。

1.2.3 过程系统综合

过程系统综合是指按照规定的系统特性,寻求所需要的系统结构(及其各个子系统的性能),并使系统按照规定的目标进行优化组合。对于给定过程系统的输入参数及输出参数来说,通过过程系统综合,可获得满足输入、输出参数的过程系统。

过程系统综合包括两种决策:一是各种系统结构替换方案的选择,其中系统结构受到相互作用的单元之间的拓扑和特性规定限制;二是组成过程系统中各个单元替换方案的设计。在设计新建装置时,过程系统综合多用于从若干备选方案中选择最优化的工艺流程。

过程系统综合是过程系统工程的核心内容,其主要研究方向有:①反应路径综合;②反应网络综合;③换热网络综合;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。在过程系统综合中,常用的方法主要有分解法、直观推断法、调优法、数学规划法和人工智能法。

1.2.4 过程系统优化

最优化问题是针对一个问题,从众多解决方案中寻求“最优”的解决方案。其主要内容包括最优化模型的建立与求解。对于过程系统来讲,最优化问题主要涉及过程系统的参数优化和过程系统的结构优化。

参数优化是指在已确定的系统流程中,对其中的操作参数,如温度、压力、流量等,进行优选,以满足某些指标,如经济性指标、技术性指标、能耗指标和环境指标等,达到整个过程系统最优。换句话说,对于一给定的工艺流程来讲,若当流程内部的每一个环节、每一个单元都在

最佳状态下操作或运行,则整个流程的总体性能将达到最优。因此,参数优化的主要内容是针对流程中每一个环节、每一个单元的操作条件最优。

结构优化是指通过改变过程系统中设备类型或各单元间的联结,以达到过程系统最优。针对已知原料条件和最终产品要求,结构优化的主要内容是如何找到一个最佳的工艺流程来完成任 务,因此在结构优化中会涉及不同工艺路线、不同制造加工方案的选择,是高一级层面上的优化。

过程系统优化是过程系统工程最核心的内容,贯穿于过程系统设计、操作、控制和管理各个环节。对过程系统进行优化,也就是通过最优化方案获得最优决策,实现过程系统优化设计、优化操作、优化控制和优化管理。

1.3 过程模拟的一般方法

1.3.1 物理模拟和数学模拟

如果化工系统 A 是比较复杂的系统,可能会由于过程较为复杂,而无法预知效果如何。若存在一个比较简单的系统 B,其操作特性与复杂系统 A 相同,但比系统 A 容易进行试验(实验)或求解,在这种情况下,就可以用简单系统 B 来代替复杂系统 A。换言之,用一个更为方便、经济而性能相似的系统 B 模仿系统 A 的性能,这种方法称为模拟,也称为仿真,系统 B 称为系统 A 的模型。

如果系统 B 与系统 A 不仅性能相似,物理化学过程本质也一样,即具有相同的描述系统的数学方程,但两者的规模尺寸大小不同,这种模拟称为“物理模拟”,又叫“相似模拟”。

如果系统 B 和系统 A 只是描述方程相同,而系统 A 是真实的化工过程,系统 B 是计算机所建立的数学描述方程,这种模拟称为“类似模拟”。如果模拟系统 B 所建立的数学描述方程能够准确描述系统 A,则为了方便计算,只要在计算机上对系统 B 进行数学模型计算就可得到实验研究系统 A 的结果,这种方法称为“数学模拟”。

1.3.2 数学模型化的步骤

建立数学模型的目的是要找到尽可能简单的数学描述方法,且该数学描述还可以精确描述所研究过程的特性。在精度足够的前提下,数学描述方程应尽可能简单。

由于过程系统由若干个单元过程组成,因此要想对一个化工过程系统建立数学模型,往往将过程系统模型的建立分解为各个基本单元过程模型的建立。单元过程数学模型建立步骤如图 1-1 所示。

1.3.3 数学模型的类型

数学模型是对过程系统及其各单元过程或流程进行模拟的基础,对模拟结果的可靠性和准确程度具有关键性作用。按照不同分类,可建立不同类型的数学模型。

1. 按数学描述的本质分类

按照所建立数学模型的本质来看,数学模型分为机理模型与经验模型。

机理模型:通过分析化工过程的物理化学本质和机理,利用化学工程学的基本理论,如质量守恒定律、能量守恒定律及化学反应动力学等基本规律所建立的描述过程特性的数学方程

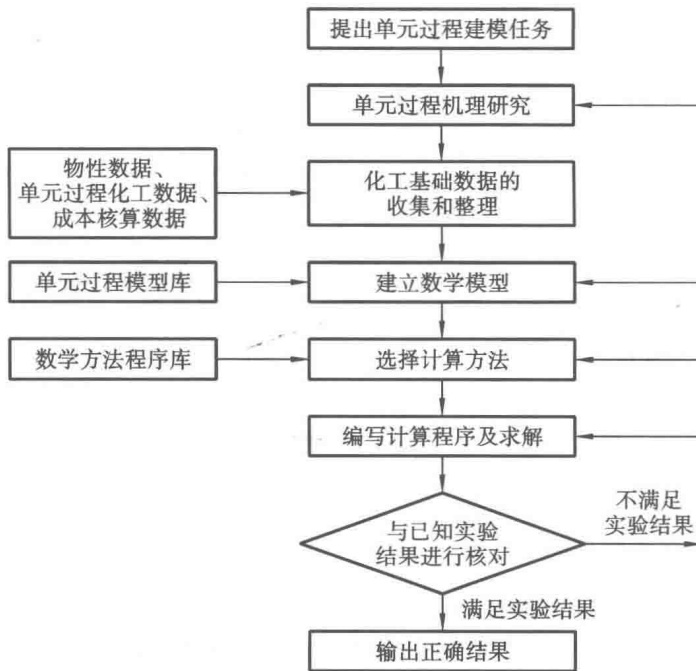


图 1-1 单元过程数学模型建立步骤

式及相应的边界条件,称为机理模型。虽然这种模型具有非常明确的物理意义,但是模型方程往往比较复杂。

经验模型:又称“黑箱模型”,直接以小型试验、中间试验或生产装置的实测数据为依据,仅着眼于变量和自变量之间的输入-输出关系,而不考虑过程本质建立起来的模型。相对于机理模型而言,经验模型的适用范围受到输入、输出数据覆盖范围的限制。然而,对于不能用机理模型描述的实验过程本身来讲,由大量实验数据回归而来的经验模型是十分必要的。

2. 按与时间的关系分类

按照研究对象的本质来看,数学模型分为稳态模型与动态模型。

稳态模型:过程研究对象的参数不随时间变化而变化建立起来的模型为稳态模型。稳态模型建立的方程常为代数方程组,是目前应用最广泛的一种模型。例如,物料及能量平衡模型。

动态模型:考虑过程研究对象的参数随时间变化的关系,采用时间作为主要自变量建立起来的模型为动态模型。动态模型所建立的方程组常为常微分方程组。例如,反应过程在外部干扰作用下的不稳定过程、开停车过程或某些间歇操作过程。

3. 按过程属性分类

按照研究对象属性的不同,数学模型可分为确定模型和随机模型。

确定模型:每个变量对于任意一组给定的条件取一个确定的值或一系列确定值的模型为确定模型。即输入-输出关系存在确定关系则为确定模型。

随机模型:用来描述一些不确定性随机过程的模型为随机模型。在随机模型中,其过程服从统计概率规律,且描述这一过程的输入-输出关系变量或参数取值是无法确切知道的。例如,含有气泡的聚式流化床中气泡的生成运动及颗粒运动,聚合反应中高分子聚合物的生成等,均为典型的随机模型。相比于确定模型,随机模型更难以处理。

4. 按过程研究对象的数学描述方法分类

按照过程研究对象数学描述方法的不同,数学模型分为集中参数模型和分布参数模型。

集中参数模型:在过程参数随空间位置不同而变化被忽略的情况下,过程系统的各参数都被看作在整个系统中是均一的模型,为集中参数模型。因此,在该模型中,各参数数值与空间位置无关。集中参数模型的数学方程组常为代数方程组或常微分方程组,例如,理想混合反应器等。

分布参数模型:研究过程参数在整个系统空间从一个点到另一个点上性能的变化,即过程参数为空间位置函数的模型为分布参数模型。分布参数模型所建立的数学方程组常为常微分方程组或偏微分方程组。例如,对于平推流反应器,在稳态时为常微分方程,在动态时为偏微分方程。

值得注意的是:对于同样一个过程研究对象,根据研究目的的不同,有可能建立的模型方程各不相同。例如,对于一块塔板,若只研究板效率,则视为集中参数模型;若要研究点效率,则就要采用分布参数模型了。

1.4 本课程的特点

“化工过程分析与综合”是过程系统工程的主要研究内容。20世纪70年代,化工过程分析与合成(综合)课程在我国少数重点大学开始开设。进入21世纪后,为了适应新世纪化工类专业人才培养的需求,教育部将该课程与化工热力学、化工原理和化学反应工程一并列入《高等教育面向21世纪“化学工程与工艺”专业人才培养方案》中的核心课程。

本课程注重基本概念、原理、方法和策略的论述,将理论和应用紧密结合。本课程重点是研究解决过程系统问题的方法,以便使学生掌握系统知识和提升其综合能力。

本课程采用的研究方法是系统的方法论,即把研究对象体系看作一个整体,研究构成系统各个部分的组织、结构和协调关系,以使整体达到全局最优,而不是局部优化。

本课程具有很强的实用性,通过学习,所掌握的基本原理、方法和策略可应用于过程系统的设计、操作和管理的实践。

本章小结

1. 基本概念

(1)过程系统:对原料进行物理的或化学的加工处理的系统,由一些具有特定功能的单元过程按照一定的方式相互联结组成。

(2)过程系统分析:对于系统结构及其中各个单元或子系统均已给定的过程系统进行分析。采用的主要方法是通过建立各单元或子系统的数学模型,并按照给定的系统结构进行整个过程系统的数学模拟。通过分析结果可预测整个系统在不同条件下的特性和行为;过程系统分析的目的是发现系统的薄弱环节并改进。

(3)过程系统优化:在过程系统优化中涉及两大类的优化问题——参数优化和结构优化。参数优化是在已确定的系统流程中,对其中的操作参数,如温度、压力、流量等,进行优选,以满足所设立的目标函数;结构优化是通过改变过程系统中设备类型或各单元间的联结结构,以达到过程系统最优。

2. 数学模型的类型

按照过程系统研究对象的不同,数学模型有四种分类:①机理模型与经验模型;②稳态模型与动态模型;③确定模型与随机模型;④集中参数模型与分布参数模型。

3. 过程系统研究方法和重点

本课程采用的研究方法是系统的方法论,重点是研究解决过程系统问题的方法。

参 考 文 献

- [1] 王基铭. 过程系统工程辞典[M]. 2版. 北京:中国石化出版社,2011.
- [2] 杨友麒,成思危. 现代过程系统工程[M]. 北京:化学工业出版社,2003.
- [3] 姚平经. 过程系统工程[M]. 上海:华东理工大学出版社,2009.
- [4] 都健. 化工过程分析与综合[M]. 大连:大连理工大学出版社,2009.
- [5] 杨友麒,项曙光. 化工过程模拟与优化[M]. 北京:化学工业出版社,2006.

第二章 单元过程的模拟



本章学习要点

- (1) 掌握自由度的概念和本质, 单元过程、装置和过程系统的自由度分析;
- (2) 了解单元过程稳态模拟过程及应用;
- (3) 了解单元过程稳态模拟与动态模拟之间的区别。

化工过程是将指定的原料经过一系列物质和能量转换步骤, 最终转变为规定要求的一种或几种化学产品的过程。通常一个化工过程由若干个单元过程组成, 每个单元过程均有明确的物质和/或能量转换任务, 而且单元过程也是化工过程的基本加工步骤。

单元过程的模拟既包括过程系统中基本单元模块的模拟, 也包括独立单元(过程)模块的模拟。而过程系统模拟则是对由若干个不同单元过程构成的过程系统进行模拟。

2.1 自由度

自由度是描述系统状态所需的变量数与建立这些变量之间关系的独立方程数之差, 如果用 n 和 m 分别表述变量数和独立方程数, 则自由度的表达式为

$$d = n(\text{变量数}) - m(\text{独立方程数}) \quad (2-1)$$

2.1.1 独立流股的自由度

根据 Duhem 定理(杜赫姆定理): 对于一个已知每个组分初始质量的封闭体系而言, 不论该体系有多少相、多少组分或多少化学反应, 体系的平衡状态完全取决于两个独立变量, 温度 T 和压力 p 。

从 Duhem 定理可知: 要想确定一个独立流股, 则需要知道流股中所包含的组分数 C 和两个独立变量: 流股的温度 T 和压力 p , 即规定了流股中 C 个组分的摩尔流量、流股的温度 T 和压力 p , 则该独立流股就可以被确定下来。换句话说, 一个独立流股具有的自由度为 $(C+2)$ 。

2.1.2 自由度的实质

一个化工过程系统中, 若有 n 个变量, 所建立的数学模型中涉及 m 个独立方程(彼此独立且不相互矛盾), 一般会出现下面三种情况。

(1) $n > m$, 则系统的自由度为 $n - m$ 。在这种情况下, 要想使系统模型具有唯一解, 则必须提前给这多出来的 $n - m$ 个变量赋值。需要提前赋值的 $n - m$ 个变量: 一方面在变量的选取上具有一定的自由; 另一方面, 在变量取值上不受方程的约束, 仅来源于过程系统中其他方面的考虑, 具有一定的自由。上述两方面的自由, 是自由度概念的实质。

(2) $n = m$, 过程系统中不存在多余变量, 系统有唯一解。

(3) $n < m$, 过程系统中变量数少于独立方程数, 系统无解。

2.1.3 自由度分析的目的

在对过程系统建立数学模型并对模型进行求解时,根据过程系统的变量数和所建立的独立方程组数,进行自由度分析,从而确定设计变量或决策变量的数目。而后,根据任务的需要和实际情况,选取设计变量,使过程系统建立的数学模型具有唯一定解。

因此,自由度分析的目的在于系统模型进行求解之前,需要确定提前给多少个变量赋值,才能使系统有唯一定解。

2.1.4 设计变量与状态变量

1. 设计变量

在 n 个变量中如何选取其中 d 个变量,具有一定的自由,若是对这 d 个变量赋以不同的数值,模型方程得到的解也不相同。因此,改变 d 个变量的取值,正是控制系统设计方案的一种手段。因此,这些变量称为“设计变量”,也称为“决策变量”。

2. 状态变量

在设计变量被选定和赋值之后,系统模型由 m 个独立方程组成。当 m 个变量通过 m 个方程求解出来之后,就确定了系统的一个状态。因此, m 个彼此独立的方程也称为“状态方程”,所求解出来的 m 个变量称为“状态变量”。

2.1.5 设计变量确定的原则

从数学求解的角度来看,若要使模型方程有解,需要确定哪些变量作为设计变量是可以“自由”选择和“自由”确定赋值的。然而,对于化学工业生产过程系统而言,设计变量选择上的自由是有“一定限度”的自由,需要遵循一定的原则。

原则 1:针对不同工程实际问题进行不同处理。对于模拟型问题,首先选择输入流股变量和设备变量;对于设计型问题,首先选择设计规定方程中各设计规定变量,再选择输入流股变量和设备变量。

原则 2:模块中需求解出的模块参数不能选择为设计变量。

原则 3:应选择受限制较多的变量。

原则 4:所选择的设计变量,当其获得赋值后,可使系统模型方程的求解最方便和容易。

2.2 过程系统自由度分析

过程系统由单元过程和过程装置组成,因此,过程系统自由度分析以单元过程自由度分析和过程装置自由度分析为基础。

2.2.1 单元过程自由度分析

单元过程自由度分析的基本步骤如下。

步骤 1:写出单元过程所有输入、输出流股的独立变量数、各设备参数等的变量数总和 n 。

步骤 2:写出单元过程的独立方程数 m 。

步骤 3:求解自由度 $d=n-m$ 。

变量 n 类型主要有输入流股变量、输出流股变量、设备参数和寄存变量等。

独立方程 m 类型主要有物料衡算方程、热量衡算方程、相平衡方程、温度与压力平衡方程、化学反应方程式、内在关系式等。

下面以混合器、闪蒸器和换热器为例介绍典型单元过程自由度分析。

(1) 混合器。

混合器的作用是将两个独立流股混合成一个独立流股,其示意图如图 2-1 所示。

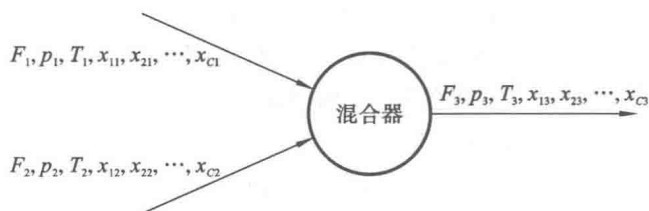


图 2-1 混合器示意图

独立变量数: 总共涉及 3 股独立流股, 根据 Dehum 定律, 每个流股的独立变量数为 $C+2$ 。因此, 混合器的独立变量数: $n=3(C+2)$ 。

独立方程数: 混合器所涉及的独立方程有物料衡算方程、热量衡算方程、压力平衡方程, 其中:

$$\begin{aligned} \text{物料衡算方程:} & \quad F_1 x_{i1} + F_2 x_{i2} = F_3 x_{i3} \quad i=1, 2, 3, \dots, C & \quad C \text{ 个} \\ \text{热量衡算方程:} & \quad F_1 H_1 + F_2 H_2 = F_3 H_3 & \quad 1 \text{ 个} \\ \text{压力平衡方程:} & \quad p_3 = \min\{p_1, p_2\} & \quad 1 \text{ 个} \end{aligned}$$

式中: F 为流股的摩尔流量; x 为摩尔分数; H 为流股的比摩尔焓; p 为压力。

因此, 混合器的独立方程数: $m=C+2$ 。

由混合器的独立变量数和独立方程数, 可得混合器自由度为 $d=n-m=2(C+2)$, 恰好等于两个独立流股自由度之和。

综上所述, 对混合器而言, 当确定了两股输入独立流股变量之后, 其出口流股变量就可通过所建立的混合器数学模型进行计算。

类似的, 若 S 股物流通过混合器合并为一股物流, 则该混合器自由度为 $S(C+2)$ 。

(2) 闪蒸器。

在工业生产过程中, 常见的闪蒸器有绝热闪蒸和一般闪蒸两种类型。在闪蒸器单元操作过程中, 闪蒸塔塔顶气相和塔底液相达到相平衡。图 2-2 为一独立流股通过减压阀后进入闪蒸器单元示意图。

图 2-2 中所示闪蒸器的自由度分析如下。

独立变量数: 图 2-2 所示闪蒸器单元示意图中除了三个独立流股之外, 还存在一个设备参数: 闪蒸器加热量 Q , 因此, $n=3(C+2)+1$ 。

独立方程数: 闪蒸过程中所涉及的独立方程有物料衡算方程、热量衡算方程、温度平衡方程、压力平衡方程、相平衡方程。

$$\begin{aligned} \text{物料衡算方程:} & \quad F_1 x_{i1} = F_2 x_{i2} + F_3 x_{i3} \quad i=1, 2, 3, \dots, C & \quad C \text{ 个} \\ \text{热量衡算方程:} & \quad F_1 H_1 + Q = F_2 H_2 + F_3 H_3 & \quad 1 \text{ 个} \end{aligned}$$

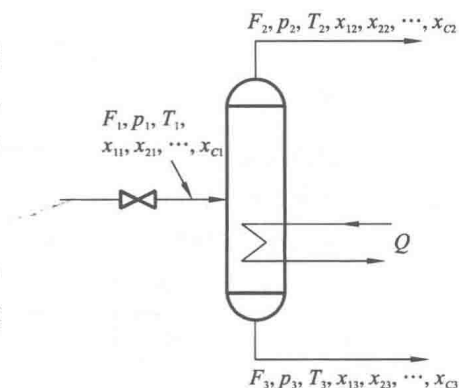


图 2-2 闪蒸器单元示意图