

高等学校理工科规划教材

过程系统分析与综合

GUOCHENG XITONG FENXI YU ZONGHE

(第二版)

姚平经/主编



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

T18021.8

3=2

高等学校理工科规划教材

过程系统分析与综合

(第二版)

主编	姚平经		
编著	樊希山	都 健	董宏光
	王 瑶	俞红梅	孙亚琴
	姚平经		

大连理工大学出版社

© 姚平经 2004

图书在版编目(CIP)数据

过程系统分析与综合 / 姚平经主编. —2 版. —大连: 大连理工大学出版社, 2004.2

ISBN 7-5611-0603-3

I. 过… II. 姚… III. 化工过程—化学系统工程 IV. TQ021.8

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2003)第 055710 号

大连理工大学出版社出版

地址: 大连市凌水河 邮政编码: 116024

电话: 0411-4708842 传真: 0411-4701466 邮购: 0411-4707961

E-mail: dutp@mail.dlptt.ln.cn URL: <http://www.dutp.cn>

大连理工印刷有限公司印刷 大连理工大学出版社发行

幅面尺寸: 185mm × 260mm 印张: 15 字数: 362 千字

印数: 3001 ~ 5000

1992 年 9 月第 1 版

2004 年 2 月第 2 版

2004 年 2 月第 3 次印刷

责任编辑: 范业婷

责任校对: 李西娜

封面设计: 宋 蕾

定 价: 24.00 元

第 2 版前言

为适应 21 世纪教学内容和课程体系的更新与发展,组织修订编写了新版《化工过程系统工程》,并更名《过程系统分析与综合》。

“过程系统分析与综合”是化工类本科生必修课,该课程需要先修“应用数学”及“化工原理”课程,所以安排在三年级下学期或四年级上学期为宜。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数学模型的方法及流程模拟的基本技能;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。

该课程安排“课程论文”教学环节,要求是: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或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、运用和创造知识是很有益处的。

全书共分 8 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流程模拟的基本技能;过程系统综合与能量集成的基础知识与策略;以及该学科领域的有关发展前沿。作者力求对基本概念

与原理的论述准确,结合工程实际与研究项目,贯穿系统、整体的观点和全局优化的思想进行过程系统的操作分析与设计。

本书由姚平经主编。第1章及第5章由姚平经编写;第2章及第4章由樊希山编写;第3章由都健编写;第6章由俞红梅、孙亚琴、姚平经编写;第7章由董宏光编写;第8章由王瑶编写。

全书由俞裕国教授审阅。

本书可以作为本科生的基本教材,以及研究生和工程技术人员学习的参考书。由于作者水平有限,书中不妥与错误之处在所难免,敬请指正。

编 者

于大连理工大学

2004年2月

第 1 版前言

大连理工大学化工学院(原大连工学院化工系)对 1977 年入学的本科生及 1978 年入学的硕士生,在教学计划中开始安排了“化工过程系统工程”课程,为 3 学分(51 学时)。作者于 1981 年编写了教学讲义《化工过程系统工程》。而后也为石油化工企业、设计院和高等学校等单位多次讲授化工过程系统工程课,并从事科研协作与现场调查,搜集了工程素材。1988 年为化工类研究生开出“化工过程系统综合”课程,为 2 学分(34 学时),同时编写出教学讲义《化工过程系统综合》上、下册。经过 10 多年的教学、以及化工过程系统工程学科方面的科学研究和研究生培养工作,在理论与实践方面有了一定的积累,力求编写出一本简明、适用的教材,以适应教学工作不断发展的需要。

“化工过程系统工程”是化学工程专业本科生必修课,也是化工类其他各专业本科生的选修课。该课程需要先修“应用数学”及“化工原理”课程,所以安排在三年级下学期或四年级上学期为宜(指四年制本科生)。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;熟悉建立化工单元操作及化工过程系统数学模型的步骤及流程模拟的基本方法;掌握过程系统综合与优化设计的基础知识和技能;了解该学科领域的有关发展前沿。

该课程应当安排“课程论文”或相当的课程大作业教学环节,要求是:运用所学基本原理、方法完

成一个适当规模的系统模拟或优化或综合的上机题目(按 20 个机时),并以学术论文形式完成书面报告(3000 字左右)。“课程论文”的题目采自科研项目、工程实际的子题目,或基本原理、方法的验证与应用。教师提出 10 个以上题目清单,由学生自选。这一教学环节很重要,对促进学生掌握运用基本原理、方法,使用计算机,以及培养分析问题能力方面的效果是明显的。

本书共分 4 章,第 1 章化工过程系统工程学科发展概况,第 2 章化工过程系统的稳态模拟分析,第 3 章化工过程系统综合,第 4 章化工过程系统最优化。附录中简要地介绍有关的数学基础知识。

本书可以作为大学生和研究生的基本教材,根据学校具体情况,讲授内容可以增删;也适用于有关工程技术人员继续学习的参考书。

本书由袁一教授审阅,同时也得到俞裕国教授的帮助,在此表示谢意。由于作者水平有限,书中难免有不妥与错误之处,敬请指正。

编 者

1991 年 4 月

目 录

第1章 绪论 /1

1.1 本课程与化学工程学和系统工程学的关系 /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 /3

1.3 本课程的特点 /3

参考文献 /3

第2章 过程系统模拟概论 /4

2.1 过程系统的模拟 /4

2.1.1 过程系统模拟的基本任务 /5

2.1.2 过程系统模拟的基本结构 /6

2.2 过程系统模拟基本方法 /11

2.2.1 序贯模块法 /11

2.2.2 联立方程法 /13

2.2.3 联立模块法 /14

本章符号说明 /16

参考文献 /17

习题 /17

第3章 过程系统自由度分析及系统分解 /18

3.1 自由度分析 /18

3.1.1 单元过程自由度分析 /18

3.1.2 过程系统的自由度分析 /22

3.2 化工过程系统的分解 /24

3.2.1 问题的提出 /24

3.2.2 不相关子系统的识别 /25

3.2.3 对不相关子系统的分隔 /27

3.2.4 最大循环网的断裂 /36

3.3 化工流程模拟计算收敛方法 /49

3.3.1 直接迭代法 /50

3.3.2 部分迭代法 /51

3.3.3 割线法 /51

3.3.4 韦格斯坦法 /51

3.3.5 限界韦格斯坦法 /51

3.3.6 优势特征值法 /52

3.3.7 牛顿-拉夫森法 /52

3.3.8 拟牛顿法 /52

3.3.9 各种计算收敛方法的比较 /53

本章符号说明 /54

参考文献 /54

习题 /54

第4章 化工过程系统模拟与分析 /58

4.1 化工单元过程数学模型及模拟 /58

4.1.1 换热器数学模型及模拟 /58

4.1.2 复杂蒸馏塔数学模型及模拟 /77

4.1.3 反应器数学模型与模拟 /88

4.1.4 通用稳态模拟软件介绍 /102

4.2 过程系统模拟分析实例 /103

4.3 小结 /106

本章符号说明 /106

参考文献 /108

习题 /108

第5章 夹点技术的基础理论 /112

5.1 过程系统的夹点及其意义 /112

5.1.1 $T-H$ 图(温-焓图) /112

5.1.2 组合曲线 /114

5.1.3 在 $T-H$ 图上描述夹点 /115

5.1.4 用“问题表格法”确定夹点 /116

5.1.5 夹点的意义 /120

5.2 准确地确定过程系统的夹点位置 /122

5.2.1 准确地确定夹点位置——操作型夹点计算 /122

5.2.2 合理地设计夹点位置——设计型夹点计算 /124

5.3 过程系统的总组合曲线 /125

5.3.1 总组合曲线的绘制 /125

5.3.2 总组合曲线的意义 /128

5.4 多夹点问题 /129

5.5 无夹点——门槛问题 /130

5.6 平衡的总组合曲线 /131

5.6.1 公用工程总组合曲线 /131

5.6.2 平衡的总组合曲线 /132

5.6.3 平衡的总组合曲线的应用 /132

本章符号说明 /134

参考文献 /134

习题 /134

第6章 换热器网络的综合 /135

6.1 根据温-焓图 综合换热器网络 /136

6.1.1 温-焓图 /136

6.1.2 热力学最小传热面积网络的综合 /137

6.1.3 热力学最小传热面积网络的改进 /140

6.2 夹点设计法 /141

6.2.1 夹点处物流间匹配换热的可行性规则 /141

6.2.2 物流间匹配换热的经验规则 /144

6.3 换热器网络的调优 /149

6.3.1 最少换热设备个数与热负荷回路 /149

6.3.2 热负荷回路的断开 /151

6.3.3 热负荷路径及能量松弛 /154

6.3.4 采用计算机识别及断开热负荷回路 /165

6.4 用于换热器网络综合的结构优化法 /168

6.4.1 转运模型 /168

6.4.2 最小公用工程费用问题 /169

6.4.3 最少换热设备个数问题 /173

6.4.4 综合的步骤 /174

本章符号说明 /174

参考文献 /174

习题 /175

第7章 分离序列综合 /176

7.1 分离序列综合基本概念 /176

7.1.1 过程节能 /176

7.1.2 问题定义 /178

7.1.3 组合数学 /178

7.1.4 算法分析 /180

7.1.5 方案评价 /180

7.2 分离序列综合经典方法 /181

7.2.1 直观推断 /181

7.2.2 渐进调优 /183

7.2.3 数学规划 /187

7.3 分离序列综合启发方法 /193

7.3.1 软计算智能 /193

7.3.2 基于模拟退火的渐进调优 /194

7.4 小结 /199

参考文献 /199

习题 /200

第8章 过程系统能量集成 /201

8.1 蒸馏过程与过程系统的能量集成 /201

8.1.1 分离器在系统中的合理设置 /202

8.1.2 蒸馏过程与过程系统的能量集成 /203

8.2 公用工程与过程系统的能量集成 /208

8.2.1 热机、热泵在系统中的合理放置 /208

8.2.2 热机在热集成过程中热负荷及温位的限制 /209

8.3 夹点分析在过程系统能量集成中的应用 /210

8.3.1 过程用能的一致性原则 /210

8.3.2 过程流股的提取及参数的确定 /212

8.3.3 过程系统用能诊断——操作型夹点分析 /214

8.3.4 过程系统用能调优——设计型夹点分析 /216

8.4 工业应用实例 /216

本章符号说明 /230

参考文献 /230

第 1 章 绪 论

1.1 本课程与化学工程学和系统工程学的关系

化学工程学是以化学、物理和数学原理为基础,研究物料在工业规模条件下,它所发生物理或化学状态变化的工业过程及这类过程所用装置的设计和操作的一门技术科学^[1],通用于一切化工类型的生产行业(统称过程工业),如化学工业,石油工业,塑料、聚合物和合成纤维的制造和加工,织物的印染,食品生产,制药和核工业以及包括炼钢和稀有金属分离的冶金工业等。随着生命科学、信息技术、材料科学以及环境科学的迅速发展,化学工程学研究领域不断深化和扩展,从微观的原子、分子的合成到宏观的全球环境变化的分析。

系统工程学是以系统(特别是大系统)为对象的一门跨学科的边缘科学。它是根据总体协调的需要,把自然科学和社会科学中的某些思想、理论、方法、策略和手段等从横的方面有效地组织起来应用于人类实践中,是应用现代数学和计算机等工具对系统的构成要素、组织结构、信息交换和自动控制等功能进行分析研究,而达到最优设计、最优控制和最优管理的目标,是为更加合理地研制和运用系统而采取的各种组织管理技术的总称,归根结底是一种工程学的方法论^[2]。

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,要求实现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、可靠和对环境污染最小的状况下运行,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,在系统工程学、运筹学、化学工程学、过程控制以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——过程系统工程学。

过程系统工程学是将系统工程学的理论和方法应用于化工过程领域的一门边缘学科,是化学工程学的一个分支^[3],它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。

一般来讲,化学工程学科包括化工热力学、传递过程、分离过程、反应工程和过程系统工程等分支学科,本课程“过程系统分析与综合”讲授的内容是“过程系统工程”分支学科的主要组成部分,其关系如图 1-1 所示。

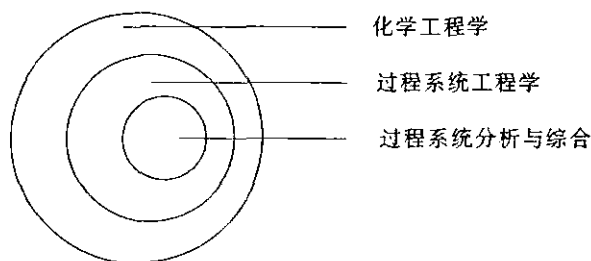


图 1-1 本课程与化学工程学的关系

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着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;过程单元是用于进行物质和能量的转换、输送和储存;单元间借物料流、能量流和信息流相联而构成一定的关系^[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)。

1.2.2 过程系统分析

过程系统分析,或过程分析,系指: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,按着给定的系统结构进行整个系统的数学模拟,预测在不同条件下系统的特性和行为,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 and 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。

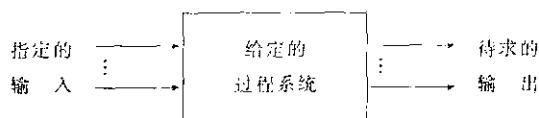


图 1-2 过程系统分析示意图

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,叫作综合。过程系统综合或过程综合,是过程系统工程学的核心内容,系指:按着规定的系统特性,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。

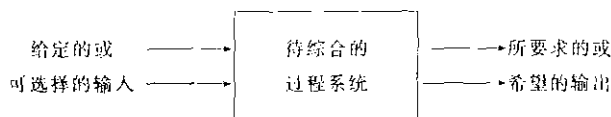


图 1-3 过程系统综合示意图

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)直观推判法;(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,以满足某些指标(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^[5]。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

作为一门课程,应当注重基本概念、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作一个整体,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. 简明不列颠百科全书. 北京:中国大百科全书出版社,1986. 4~27
2. 郑春瑞. 系统工程学概述(第二版). 北京:科学技术文献出版社,1985
3. 中国大百科全书——化工. 北京:中国大百科全书出版社,1989. 3:44
4. 格隆等著,陆震维译. 过程系统工程(上册). 北京:化学工业出版社,1983
5. Westerberg A W, Hutchison H P, Motard R L, and Winter P. Process Flowsheeting. Cambridge University Press, England, 1979

第2章 过程系统模拟概论

2.1 过程系统的模拟^[1~3]

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。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,来进行研究和设计原型过程的方法。这里所指模型可是一小型或微型实验装置,也可是一描述原型的数学方程组。前者称之为模型装置,后者称数学模型。故称采用实验模型装置进行研究为实验模拟,采用数学模型进行研究则称之为数学模拟。数学模拟可视为在计算机上进行实验研究,且具有明显优势。与实验装置上的模拟相比显得经济、灵活得多。可以减少中间放大实验,缩短了开发周期,同时能够获得难以在实验条件得到的重要信息,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,则是含有若干化工单元过程的化工过程系统。这些化工单元过程则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,按着一定方式相互联结所形成的网络。它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极大关系。由于不同的过程具有不同的性能,则需建立不同类型的模型,不同类型的模型则求解方法不同。

(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,可采用稳态模型描述。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,根据化学工程学科与其他相关学科的理论与方法,对过程进行分析研究建立的模型。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,可将对象当作“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之内,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,称其为集中参数模型,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。例如,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 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。当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。

综上所述,化工过程系统的模拟首先应将研究对象,即化工过程系统,模型化,然后寻求该模型快捷、适宜的求解方法,以实现化工过程系统的模拟。国际上比较通用的化工过程模拟软件有:ASPEN PLUS,PRO/Ⅱ,HYSYS以及DYNAPLUS等,具有模拟、优化功能。本章主要介绍化工过程系统的稳态模拟。

2.1.1 过程系统模拟的基本任务

稳态模拟是化工过程系统或化工流程模拟研究中开发最早,并且使用最为普遍的一种重要技术,它包括:物料和能量的衡算,设备尺寸和费用计算以及过程的技术经济评价。通过过程模拟可以用于完成以下三方面的基本任务。

(1)过程系统的模拟分析

过程系统的模拟分析常称之为标准型问题或操作型问题(Operating Problem),该问题首先应给定过程系统的结构,即过程系统及设备结构参数向量,给定输入流股向量,求解输出流股向量。对于过程系统,可获得系统内各单元过程输出流股向量,如图2-1所示。然后,由获得输出流股的各种信息,对过程系统及单元过程各种工况进行分析,以指导操作和过程的改造。如对一生产装置,通过模拟计算,获得所需要的信息,对实际生产的故障进行分析诊断。对装置的操作状况进行评价,对不同操作条件下运行工况进行预测,这对保证装置的正常运行是十分必要的。

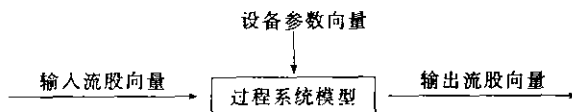


图 2-1 过程系统模拟分析

(2)过程系统的设计

在实际生产中,若新建一生产装置,或对现有装置进行改造,均离不开过程系统及单元过程的设计,此类问题为设计型问题(Design Problem)。

设计型问题的表达如图2-2所示。设计型问题是首先给定部分输入流股向量与设备参数向量。同时,指定输出流股中产品的特性要求。

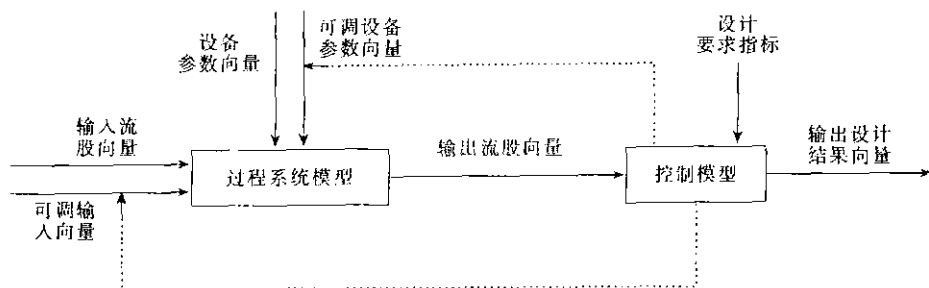


图 2-2 设计型问题

在求解过程中,通过调整另一部分输入向量和设备参数向量使产品达到规定的特性指标。从而获得过程系统中各物流、能流及特性等信息,为过程系统及单元设备设计提供设计的基础数据。在实际工程设计中,通常是经过广泛调查研究和充分论证之后,确定一个或几个初步的工艺流程方案。然后,分别对各流程进行严格的模拟计算,对系统单元过程、设备以及操作条件进行调节,使之满足规定的工艺要求,并将方案进行比较,确定一比较适宜方案为最终方案。由最终方案的计算结果,作为基础设计的依据。

(3) 过程系统的优化

化工过程系统的优化问题,即应用优化的模型或方法,求解过程系统的数学模型,确定一组关于某一目标函数为最优的决策变量的解(优化变量的解),以实现过程系统最佳工况。

优化问题与设计型问题相似,如图 2-3 所示。优化问题是通过不断调整有关的决策变量,即相关的可调的输入流股条件与设备参数,使目标函数在规定的约束条件下达到最佳。而调整决策变量是通过优化程序实现的。当优化目标涉及到经济评价时,还必须提供描述经济指标的经济模型。

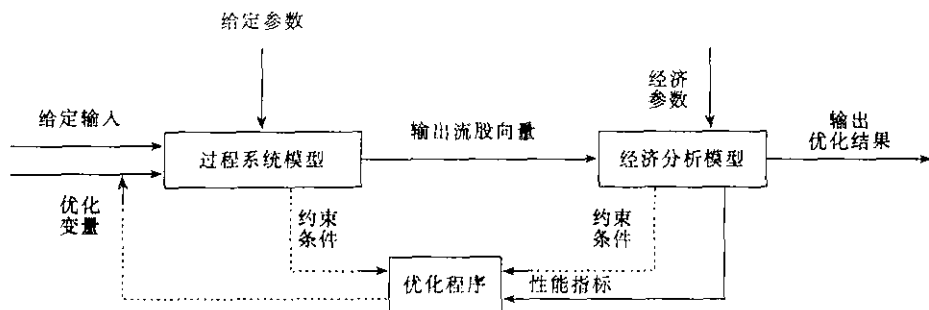


图 2-3 过程系统优化

2.1.2 过程系统模拟的基本结构

化工过程系统模拟的基本结构,如图 2-4 所示。输入模块提供模拟计算中所需的所有信息,其中包括过程系统的拓扑结构信息。输入方式可以是批处理或一次输入形式,或用户人机对话的形式。必要时,用户还可以进行输入数据的检查、核对与修正,以控制过程的模拟。

单元过程模块是过程系统模拟的重要组成部分。单元过程模块是根据输入流股及单元结构的信息,通过过程速率或平衡级的计算,对过程进行物流及能流的衡算,获得所有输出流股的信息。例如换热器模拟计算,是根据给定冷热流股输入条件及换热器结构尺寸,通过

对换热器内两流股间传热计算,使之同时满足过程的传热速率方程与热衡算方程,获得冷、热流股输出温度等信息。如给定进料条件及理论板数、进料位置、操作回流比等,可进行精馏塔分离过程的模拟计算。

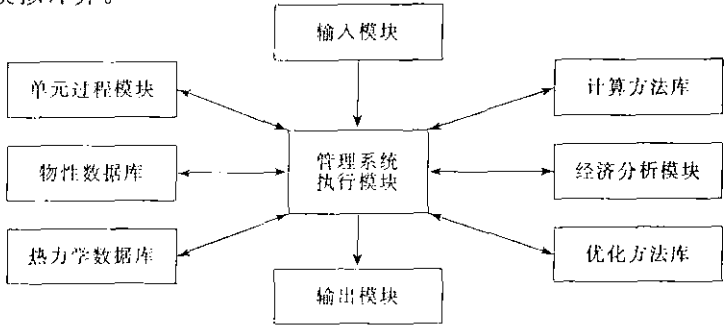


图 2-4 过程系统模拟的基本结构

物性及热力学数据库及计算方法库是为单元模块求解提供基础数据和求解方法。优化方法库是系统模拟需要进行优化时,提供优化计算方法。经济分析模块则是将生产操作费用与设备投资费用与市场联系起来,对系统生产进行经济评价的模块。管理系统执行模块是过程系统模拟的核心,用以控制计算顺序及整个模拟过程。输出模块是按照过程单元或流股输出用户所需的中间结果或最终结果等。

为了建立管理系统的执行模块,实现对模拟计算过程的有效管理,执行适宜的计算顺序,使软件具有一定的通用性,必须研究过程系统结构的表达方式,便于计算机识别和执行。过程系统的模型主要由其单元过程模型和系统结构的数学模型构成。化工过程系统的结构常表示为一化工生产系统的工艺流程图,如图 2-5 所示。

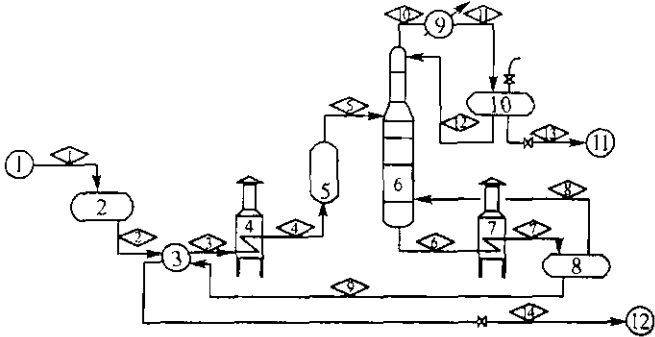


图 2-5 工艺流程图

图 2-5 为一过程系统的流程,图中每个设备标有设备序号,流股从一个设备流出而又流入另一设备,并标有方向和序号。流股每通过一设备常会引起流股部分信息的变化,故视为一新的流股,即流股序号发生变化。

来自原料罐区的原料流股 1 进入中间罐②,然后,经预热器③预热和加热炉④进一步加热,使原料流股温度升至规定的温位,流出流股序号为 4。流股 4 进入反应器⑤,反应后生成产物的混物流股 5 进入精馏塔⑥进行分离。加热炉⑦将釜液流股 6 加热,流股 7 部分气化,气相流股 8 返回塔⑥,液相流股 9 经换热器③回收热量后排出去装置⑫。塔顶蒸气流股经冷凝器⑨全部冷凝后成为流股 11,进入回流罐⑩中,回流罐⑩中凝液一部分作为塔顶回

流为流股 12, 另一流股 13 作为塔顶产品采出去装置⑪。表示以上系统中各单元设备之间的相互联系, 可由系统结构来描述。而系统结构常由有向图或信息流图以及矩阵形式表示。过程系统中各单元之间的联系, 即系统结构可表示为以下的关系。

$$y_i^m = x_j^n \quad (2.1)$$

式中: y_i^m ——单元 i 的第 m 个输出流股;

x_j^n ——单元 j 的第 n 个输入流股;

i, j ——单元序号;

m, n ——流股的序号。

式(2.1)说明单元 i 的输出流股 m 为单元 j 的输入流股 n , 实际上联系两单元的输出与输入流股为同一股, 故式(2.1)表示单元 i, j 之间的联系。称式(2.1)为联结方程。。

(1) 图形表示

许多现象或事物之间的联系可以用一类图形来描述, 此类图形由一点集合和连接该点集合中某些点的线段所构成。例如用一个点表示车间, 用线表示连接两车间的道路。或一点表示过程系统中的一个单元设备, 用一线表示连接设备的管线, 其线的长短并不重要, 主要表达了两点的联系, 这样的数学抽象产生了图论的概念。由此产生了离散数学中图论这一分支。图论在解决网络结构的表示和分析运算中有着广泛的应用。在图论中, 网络结构可以抽象成一个图, 以图作为一定逻辑关系的一种特定的表达形式。而一化工工艺流程图就较易抽象成这样的图, 以表达各单元设备间的逻辑关系。现将图 2-5 所示工艺流程中的每个单元设备用节点表示, 并将各节点编上序号且与设备单元号对应。单元设备间的流股(含物流、能量流、信息流)用一边表示, 编上序号与物流流股号对应, 流动方向以箭头表示, 即得图 2-5 工艺流程图的有向图或信息流图(Information flow diagram), 如图 2-6 所示。

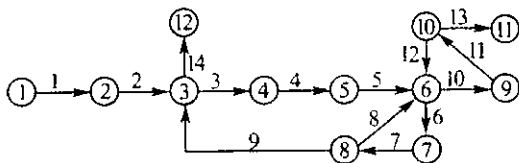


图 2-6 信息流图

图 2-5 中含 12 个单元和 14 个流股, 则有向图或信息流图 2-6 中含节点为 $X(x_1, x_2, \dots, x_{12})$, 边为 $E(e_1, e_2, \dots, e_{14})$, 该图可用以下集合形式表示。

$$G = (X, E)$$

图 2-6 可分解为若干个子图, 其中含有两种典型的子图。其一是以相同方向联结的有向边, 即每个边的终节点为后续边的起节点(路径的两端节点例外), 如图 2-6 中节点 x_1, x_2, x_3, x_4 等所示, 称此子图为路径。其二是一路径方向一致, 首尾节点重叠在一起, 形成一封闭的路径, 称此子图为一个循环回路或环路。如图 2-6 中节点 x_6, x_7, x_8, x_9 及 $x_3, x_4, x_5, x_6, x_7, x_8, x_3$ 所示。图中每一边对应一对节点, 每个节点对应一单元设备及相关的一定数量的边, 表达了一过程系统中各单元设备间逻辑关系。由此可见, 用图来描述化工过程系统是十分方便的。

(2) 矩阵表示

当一化工过程系统流程经过拓扑, 抽象成信息流图之后, 各单元设备和各股物流各种性能和信息已经数值化, 则根据图论中关于网络结构表达的概念, 即可用一定形式的矩阵表达系统的结构。表示系统结构的矩阵有多种形式, 常用的矩阵形式有过程矩阵、关联矩阵和邻