

高等教育规划教材

化工过程

分析与综合

鄢烈祥 编著



化学工业出版社

化工过程 分析与综合

HUAGONG GUOCHENG FENXI YU ZONGHE

ISBN 978-7-122-07473-7



定价：22.00 元

9 787122 074737 >

高等 教育 规划 教材

化工过程 分析与综合

邴烈祥 编著



化学工业出版社

· 北京 ·

本书论述了化工过程系统模拟与分析、综合与集成和最优化的基本理论和方法。全书共12章,内容包括:绪论、过程系统模型及其求解方法、序贯模块法、联立方程法、联立模块法、流程模拟系统简介、最优化方法、换热网络综合、能量集成、分离序列综合、质量集成、水系统集成。

本书是作者在总结多年教学和科学研究实践的基础上,吸收了近年来本学科领域在过程综合集成与优化方面的理论研究成果编写而成。全书的编写力求简明、突出重点和逻辑清晰。本书注重理论与实践的统一,书中编入有较多的例题和习题,有助于读者学习。

本书可作为高等学校化工类相关专业的教材,也可供相关领域的科研、设计、生产和管理等科技人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

化工过程分析与综合/鄢烈祥编著. —北京:化学工业出版社, 2010.2
高等教育规划教材
ISBN 978-7-122-07473-7

I. 化… II. 鄢… 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(2009)第243829号

责任编辑:何丽
责任校对:徐贞珍

文字编辑:孙思晨
装帧设计:关飞

出版发行:化学工业出版社(北京市东城区青年湖南街13号 邮政编码100011)

印 装:化学工业出版社印刷厂

787mm×1092mm 1/16 印张11¼ 字数283千字 2010年3月北京第1版第1次印刷

购书咨询:010-64518888(传真:010-64519686) 售后服务:010-64518899

网 址: <http://www.cip.com.cn>

凡购买本书,如有缺损质量问题,本社销售中心负责调换。

定 价: 22.00 元

版权所有 违者必究

前 言

化工过程分析与综合是高等学校化工类专业的必修课。为了适应高等化工类人才培养的需要，作者根据十余年来讲授本门课程的教学实践，在汲取近年来国内外相关教材、专著和文献资料的基础上，编写了本书。

本书内容上，注重吸收本学科领域在过程系统集成与优化方面的理论研究成果，编入了能量集成、质量集成、水系统集成及现代智能优化方法和大系统优化等内容。本书的编写，力求简明、突出重点和知识结构逻辑清晰。本书的编写注重理论与实践的统一，书中编入有较多的应用实例，此外，除少数章节外，都安排了习题。

全书共 12 章：第 1 章为绪论；第 2~6 章为过程系统模型、模拟方法和模拟软件系统简介；第 7 章为最优化方法；第 8、9 章分别为换热网络综合与能量集成；第 10 章为分离序列综合；第 11、12 章分别为质量集成与水系统集成。

本书可作为高等学校化工类相关专业的教材，根据各学校的具体情况，讲授内容可以取舍；也可供相关领域的科研、设计、生产和管理等科技人员参考。

本书承蒙北京化工大学麻德贤教授和大连理工大学姚平经教授审阅，两位教授对书稿提出了许多宝贵意见，在此致以诚挚的感谢！

由于作者水平有限，书中难免有不妥之处，恳请读者给予批评指正。

作者
2009 年 9 月

目 录

1 绪论	1
1.1 本门课程的形成与发展	1
1.2 基本概念	2
1.2.1 过程系统	2
1.2.2 过程系统模拟与分析	2
1.2.3 过程系统综合与集成	2
1.2.4 过程系统优化	3
1.3 本课程的特点	3
参考文献	4
2 过程系统模型及其求解方法	5
2.1 单元模型与自由度	5
2.1.1 单元模型	5
2.1.2 单元的自由度	5
2.2 系统自由度	7
2.3 过程系统的结构模型	9
2.3.1 系统结构的有向图描述	9
2.3.2 系统结构的矩阵表示	10
2.4 过程系统模型的求解方法	11
2.4.1 序贯模块法	11
2.4.2 联立方程法	12
2.4.3 联立模块法	12
本章小结	12
参考文献	13
习题	13
3 序贯模块法	14
3.1 序贯模块法的基本思想	14
3.2 系统的分隔与排序	15
3.2.1 通路搜索法	15
3.2.2 可及矩阵法	18
3.3 再循环的流股断裂	20
3.3.1 Lee-Rudd 断裂法	21
3.3.2 基本断裂法 (数学规划法)	22
3.4 流股变量收敛	23

3.4.1	直接迭代法	23
3.4.2	部分迭代法	23
3.4.3	韦格斯坦法 (Wegstein Method)	23
3.5	序贯模块法解设计问题	25
	本章小结	26
	参考文献	26
	习题	26
4	联立方程法	28
4.1	联立方程法的基本思想	28
4.2	方程组的分解	28
4.2.1	不相关子方程组的识别	28
4.2.2	方程组分块	29
4.2.3	不可再分子方程组的切断	31
4.3	线性方程组的求解	32
4.3.1	高斯消去法	32
4.3.2	LU分解法	34
4.4	非线性方程组的求解	36
	本章小结	38
	参考文献	38
	习题	38
5	联立模块法	40
5.1	联立模块法的原理	40
5.2	简化模型的建立方法	41
5.2.1	以过程单元为基本单元的简化模型建立方法	41
5.2.2	以回路为基本单元的简化模型建立方法	43
	本章小结	44
	参考文献	44
	习题	44
6	流程模拟系统简介	46
6.1	发展简史、分类与结构	46
6.1.1	发展简史	46
6.1.2	分类	46
6.1.3	流程模拟系统的结构	47
6.2	国内外流程模拟系统简介	48
6.2.1	Aspen Plus 流程模拟软件	48
6.2.2	ChemCAD 流程模拟软件	49
6.2.3	PRO/II 流程模拟软件	50
6.2.4	ECSS 工程化学模拟软件	51

本章小结	51
参考文献	51
7 最优化方法	52
7.1 基本概念	52
7.1.1 最优化模型与求解方法	52
7.1.2 化工过程的最优化问题	53
7.2 无约束最优化方法	53
7.2.1 一维搜索方法	53
7.2.2 多变量最优化方法	59
7.3 有约束最优化方法	64
7.3.1 转化为无约束优化问题的求解方法	64
7.3.2 转化为线性规划问题的求解方法	66
7.4 现代智能优化方法	70
7.4.1 模拟退火算法	71
7.4.2 遗传算法	72
7.4.3 列队竞争算法	74
7.5 大系统最优化方法	80
7.5.1 大系统最优化策略	80
7.5.2 分解-协调法	80
7.6 过程系统的统计优化方法	87
7.6.1 统计回归法	88
7.6.2 模式识别方法	89
7.6.3 智能可视化优化方法	92
本章小结	96
参考文献	96
习题	97
8 换热网络综合	98
8.1 引言	98
8.2 最小公用工程目标	98
8.2.1 问题表法	98
8.2.2 组合曲线法	100
8.2.3 线性规划法	101
8.2.4 夹点意义	102
8.3 最大能量回收网络	103
8.4 物流分割	105
8.5 换热网络优化	108
8.5.1 最少换热单元数	108
8.5.2 热负荷回路与路径	109
8.6 换热网络改造设计	111

本章小结	113
参考文献	113
习题	113
9 能量集成	116
9.1 公用工程与过程系统的能量集成	116
9.1.1 公用工程的配置	116
9.1.2 热机、热泵与过程系统的集成	117
9.2 蒸馏过程与过程系统的能量集成	119
9.2.1 蒸馏塔之间的热集成	119
9.2.2 蒸馏系统与全过程的热集成	121
9.3 全局能量集成	122
9.3.1 全局系统热回收目标	123
9.3.2 全局系统能量集成的加/减原则	124
本章小结	126
参考文献	126
习题	126
10 分离序列综合	129
10.1 引言	129
10.2 直观推断法	130
10.2.1 直观推断的规则	130
10.2.2 有序直观推断法	132
10.3 数学规划法	133
10.3.1 动态规划法	133
10.3.2 有序分支搜索法	134
10.3.3 基于超结构的优化方法	135
本章小结	139
参考文献	139
习题	139
11 质量集成	141
11.1 引言	141
11.2 最小外部质量分离剂目标	141
11.2.1 相平衡与组成标度	142
11.2.2 组成区间图法	142
11.2.3 组合曲线法	145
11.2.4 质量交换夹点的意义	148
11.3 最小外部 MSA 的质量交换网络	148
11.4 质量交换网络优化	151
11.4.1 质量交换器的最小数目	151
11.4.2 质量负荷回路和质量负荷路径	152
本章小结	152
参考文献	153
习题	153

12 水系统集成	155
12.1 引言	155
12.2 最小新鲜水目标	155
12.2.1 组合曲线法	155
12.2.2 累计负荷区间法	158
12.2.3 水夹点意义	159
12.3 新鲜水最小的水网络	160
12.3.1 源-阱图法	160
12.3.2 源-阱图法的应用	161
12.4 数学规划法	162
12.4.1 水网络超结构模型	162
12.4.2 优化数学模型	163
12.5 用水网络与水处理网络的集成	165
12.5.1 问题描述	165
12.5.2 优化模型	165
本章小结	168
参考文献	169
习题	169

1 绪论

1.1 本门课程的形成与发展^[1,2]

“化工过程分析与综合”是过程系统工程学科的核心内容，过程系统工程学科是 20 世纪 60 年代初形成的，经过 40 多年的发展，它已成为化学工程学的的一个重要分支学科。

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所发生的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，通用于一切化工类的生产行业（统称过程工业），如化学工业、石油化学工业、冶金工业、制药工业、食品工业等。在 20 世纪 20 年代提出的“单元操作”概念，奠定了化学工程学的基础，在 20 世纪 60 年代提出的动量、热量和质量传递以及反应工程学，丰富和发展了化学工程学的理论体系。

进入 20 世纪 50 年代后，以石油化工为代表的过程工业得到了蓬勃发展，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，并要求在安全、可靠和对环境污染最小的状况下运行。在能源紧张，竞争日益加剧的情况下，以传统的单元操作概念为基础的化学工程方法已不能适应时代的发展，迫切需要企业实现生产装置的最优设计、最优控制和最优管理。

系统工程学是一门研究系统的组织、协调、控制与管理的工程技术学科。产生于 20 世纪 40 年代，它是以运筹学、系统分析和现代控制理论为基础以及计算机为工具而发展起来的。系统工程学一经出现，就被有效地应用于科学技术以及经济管理的各个领域。

系统工程学的出现正好适应了化学工业亟须技术创新的要求。20 世纪 60 年初，在化学工程、系统工程、过程控制、运筹学及计算机技术等学科的基础上，产生和发展起来了一门新兴的技术学科——过程系统工程，这是继 20 世纪 20 年代单元操作技术和 60 年代传递现象理论后，化学工程学的第三次重大发展。

过程系统工程学科诞生至今，它在实践和理论两个方面都得到了飞跃式的发展。在实践上，它已从当初在化工、石油化工领域的广泛应用，推广到了过程工业的其他领域，如冶金、轻工业、医药、食品等，有力地促进了这些领域的生产技术进步和经济的飞跃发展。相应地，随着应用领域不断扩大和新的技术需求不断出现，又进一步促进了过程系统工程学科在理论、方法和内容的发展。进入 20 世纪 90 年代后，环境问题备受关注，节能减排和清洁生产成为可持续发展的前提条件，以及供应链和生态工业园区大系统概念的相继出现。这些又为过程系统工程学科提出了新的命题，又进一步促进了在过程集成和大系统理论方面的发展。

相对于化学工程学的其他分支学科，过程系统工程学科属于“年轻”的学科，它仍

处于发展阶段，其基本理论、方法和内容也在不断的演化中。虽然如此，但作为核心内容的“过程分析与综合”是相对成熟的。20世纪70年代，《过程分析与综合》课程在我国的少数重点大学开始开设。进入21世纪后，为适应新世纪化工类专业人才培养的需求，教育部将本课程列入《高等教育面向21世纪“化学工程与工艺”专业人才培养方案》中作为核心课程。之后，教育部又将本课程列为了“化学工程与工艺”专业评估的主干课程。

1.2 基本概念^[1,2]

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，它由一些具有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；单元间借物流、能量流和信息流相联而构成一定的关系。“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供应链。

1.2.2 过程系统模拟与分析

模拟是指在模型上做实验，以寻求原型规律性的过程。模拟有物理模拟和数学模拟两种方法。两者的区别在于，前者用物理模型做实验，而后者用数学模型在计算机上做实验。本课程所应用的模拟方法是指数学模拟，简称模拟。过程分析是指在过程系统的结构及其子系统特性已确定的前提下，借助计算机和系统模型，通过数学模拟的方法，推断特定系统的特性，确定其各部位信息和总体技术经济指标的方法。

过程系统模拟与分析的研究对象正从传统的过程系统（如单元设备和装置），向两头延伸，一方面向以产品设计为代表的微观尺度的原子/分子模拟延伸，另一方面向以供应链的超大规模系统延伸，以及向以整个企业，甚至于一个地区工业生态系统的延伸。

过程模拟根据系统输入与输出的状态随时间变化与否，可分为稳态模拟和动态模拟两种。从数学上讲，稳态模拟为求解代数方程组；而动态模拟为求解微分方程组。

过程模拟与分析是过程系统工程学的基础内容，它的应用贯穿于过程系统的设计、操作、控制和管理等各个环节和阶段，是过程优化、过程综合与集成的有力工具。

1.2.3 过程系统综合与集成

过程系统综合或过程综合，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。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连接关系。由此可见，过程系统综合包括两种决策：一是由相互作用的单元之间的拓扑和特性而规定的各种系统结构替换方案的选择；二是组成该系统的各单元的替换方案的设计。从数学上讲，第一种决策是整数规划问题；第二种决策是非线性规划问题。因此，过程系统综合是一个高维的混合整数非线性规划问题。

过程系统综合的主要内容有：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。

过程系统综合的方法可归纳成五种基本方法：①分解法；②直观推判法；③调优法；④数学规划法；⑤人工智能方法。

过程系统集成是相对于过程综合而言的一个范畴,研究对象比过程综合的范围更大、层次和结构更复杂。目前,对过程集成尚没有统一的定义,从实际应用的角度考虑,不妨采用如下的定义:过程集成是在完成过程之间的信息集成和协调后,进一步消除过程中各种冗余和非增值的子过程,以及由人为因素和资源问题等造成的影响过程效率的一切障碍,使企业过程总体达到最优^[3]。

这个定义表明,过程集成是以过程之间的信息集成为基础的,通过过程之间的协调(过程重构)以消除过程中各种冗余和非增值的子过程。过程之间的协调说明过程之间存在相互影响和相互作用,通过协调处理好相互间的关系,使过程总体达到最优。过程集成的目的是全局最优,而非局部过程优化。

过程集成的主要内容有:能量集成和质量集成。

过程集成的主要方法有:①直观推判法;②夹点分析法;③人工智能法;④数学规划法。

过程集成是一个大规模的混合整数非线性规划问题,也是一个多目标优化问题,目标包括:系统的经济性、操作性、可控性、安全性、可靠性,面临 21 世纪可持续发展的要求,还要把清洁生产和环境保护等考虑进来。

1.2.4 过程系统优化

最优化是对一个问题从许多解决方案中选取“最优”解决方案的一种方法。从数学上讲,是在满足某种类型的约束下(例如:等式约束或不等式约束,线性约束或非线性约束,代数方程或微分方程约束)使给定的目标取极值(极小值或极大值)。

在过程系统中,优化的对象可从层次和功能结构两个方面划定。从层次方面考虑有:单元设备、装置、工厂、企业、供应链。从功能结构方面考虑有:反应器网络系统、分离序列系统、换热网络系统、公用工程系统、质量交换网络系统等。功能结构方面的优化实际上是过程综合问题。

最优化问题的主要内容包括最优化模型的建立与求解。不同的最优化问题,最优化模型的性态是不同的,但都可以划分为两大类:参数优化与结构优化。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(如经济性指标、技术性指标及环境指标等)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。从数学上讲,前者归结为(非)线性规划问题;而后者归结为混合整数(非)线性规划问题。

最优化是过程系统工程最核心的内容之一。它贯穿于过程系统的设计、操作、控制和管理各个环节或阶段,通过最优化优选出最佳方案,作出最优决策,从而实现过程系统的优化设计,优化操作,优化控制和优化管理。

1.3 本门课程的特点

本门课程作为化工类的专业基础课程,与其他基础课程的区别:本门课程的重点是研究解决过程系统问题的方法,而不是阐述构成系统的基本单元的原理、规律和特性。换句话说,本门课程是应用知识的集成来解决过程系统的问题。

本门课程采用的研究方法是系统的方法论,即把研究的对象作为一个整体来对待,研究构成系统的各个部分的组织、结构和协调,以使整体达到全局最优,而不是局部优化。

本门课程中的过程系统模拟与分析、综合集成与最优化,大多需要对建立的模型用计算机进行求解。因此,学习本门课程需要学生具备一定的数值计算、计算机编程和应用软件的能力。

本门课程具有很强的实用性,通过学习,掌握本课程的基本原理、方法和策略后,可应用于过程工业的设计、操作和管理的实践。

参考文献

- [1] 姚平经. 过程系统工程. 上海: 华东理工大学出版社, 2009.
- [2] 杨友麒, 成思危. 现代过程系统工程. 北京: 化学工业出版社, 2003.
- [3] 陈禹六, 李清, 张锋. 经营过程重构 BPR 与系统集成. 北京: 清华大学出版社, 2001.

2

过程系统模型及其求解方法

过程系统模型是由单元模型和系统结构模型所组成的，本章内容先对单元模型和系统结构模型进行描述，之后，对过程系统模型的求解作出简单介绍。

2.1 单元模型与自由度

2.1.1 单元模型

图 2-1 所示为一般单元模型的示意图。

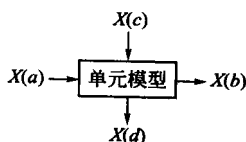


图 2-1 单元模型示意图

其中， $X(a)$ 为输入流股变量向量（包括热力学状态、流量和组成）， $X(b)$ 为输出流股变量向量， $X(c)$ 为设备参数（或单元模块参数）， $X(d)$ 为其他输出（如热量和功）。一般后面两项并非每个模块所必需。单元模型输入与输出的关系可表示为

$$X(b) = G_1[X(a), X(c)] \quad (2-1)$$

$$X(d) = G_2[X(a), X(c)] \quad (2-2)$$

式中， G_1 和 G_2 为单元模型的函数向量，它们的具体表达形式由特定过程单元的物料、能量、化学平衡方程、物性方程等确定。

2.1.2 单元的自由度

单元的自由度是指能够独立变化的变量数目。自由度定义：描述一个系统的 m 个变量数目与 n 个独立方程的数目之差，称为此系统的自由度，用 d 表示。

$$d = m - n \quad (2-3)$$

当 $m > n$ 时，则系统有 d 个自由度。说明在模型求解前，必须从 m 个变量中选出其中的 d 个并赋值，使模型变成 n 个变量与 n 个方程有定解的情况。

设计变量与状态变量：从 m 个变量中选取的 d 个变量称为设计变量，其他的 n 个变量称为状态变量，很明显， d 个变量的取值不同，模型求解的难易程度亦不同。由于 d 个变量的取值对模型的求解结果有影响，需要进行决策，也称为决策变量。

物流自由度：根据杜赫姆（Duhem）定理，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，或换一种说法，已知 $(C+2)$ 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和压力，则该流股就确定了。

对系统自由度和物流自由度进行定义后，下面对几个典型的单元作自由度分析。

2.1.2.1 混合器

图 2-2 为一混合器示意图，两个流股混合成一个流股，每个流股有 $(C+2)$ 个独立变量，该单元的独立变量数为

$$m = 3(C+2)$$

该混合器的独立方程有：

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

式中， p 为压力； F 为流股的摩尔流量； x 为流股中组分的摩尔分数； H 为流股的比摩尔焓。

上述混合器的独立方程数

$$n = C+2$$

混合器的自由度为

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

可见两个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。

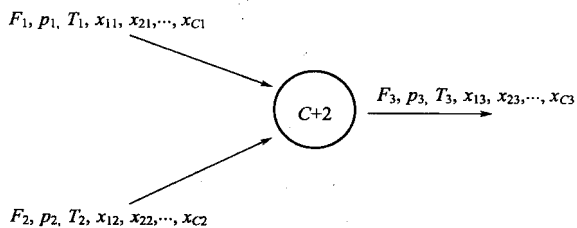


图 2-2 混合器示意图

2.1.2.2 闪蒸器

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 作为设备参数。故变量总数为 $3(C+2)+1$ ，闪蒸器的独立方程有：

$$\begin{aligned} \text{物料衡算方程} & \quad F_1 x_{i1} = F_2 x_{i2} + F_3 x_{i3} \quad (i=1, 2, \dots, C) \\ \text{热量衡算方程} & \quad F_1 H_1 + Q = F_2 H_2 + F_3 H_3 \\ \text{温度平衡方程} & \quad T_2 = T_3 \\ \text{压力平衡方程} & \quad p_2 = p_3 \\ \text{相平衡方程} & \quad x_{i2} = k_i x_{i3} \quad (i=1, 2, \dots, C) \end{aligned}$$

这里共有 $2C+3$ 个独立方程。故闪蒸器的自由度为

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

说明在进行闪蒸器计算时，除应给定输入流股的 $(C+2)$ 个变量外，还需规定输出流股的

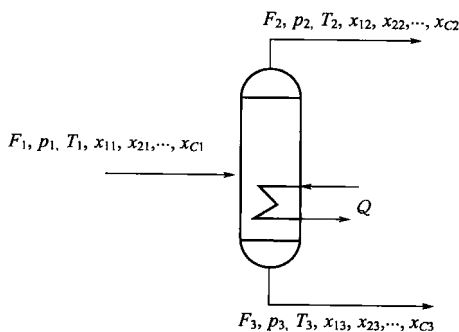


图 2-3 闪蒸器示意图

两个变量，例如，闪蒸温度 T_2 和闪蒸压力 p_2 。

2.1.2.3 反应器

如图 2-4 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

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

说明在进行反应器计算时，除应给定输入流股的 $(C+2)$ 个变量外，还需要给定 $r+2$ 个设备单元参数。

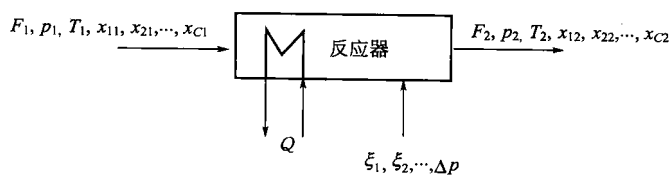


图 2-4 反应器单元示意图

通过对上述典型过程单元自由度的分析，我们可以归纳出过程单元的自由度计算公式为

$$d^{(U)} = \sum_{i=1}^n (C_i + 2) + (s-1) + e + r + g$$

式中， $d^{(U)}$ 为过程单元的自由度； n 为输入流股数； C_i 为第 i 个输入流股的组分数； s 为通过衡算区时出现分支的输出流股数； e 为与物料流无关的能量流和压力变化引入的自由度； r 为反应单元的独立反应数； g 为几何自由度。对于模拟与控制，设备是给定的，几何变量是常数，故 $g=0$ 。

2.2 系统自由度

过程系统的自由度可在过程单元自由度分析的基础上，用下式确定：

$$d^{(S)} = \sum_i d_i^{(U)} - \sum_j k_j^{(L)} \quad (2-4)$$