

西安交通大学

本科毕业设计（论文）

甲醇合成装置能量系统集成优化软件开发及应用

学院（部、中心）：化学工程与技术学院

专 业：化学工程与工艺

班 级：化工 91

学生姓名：张子轩

学 号：2193710663

指导教师：刘桂莲 王天雁

2023 年 06 月

摘 要

煤制甲醇工业对国民经济起着至关重要的作用，及时根据生产条件的变化优化操作对于其节能降耗和稳定生产具有重要研究价值和现实意义。化工流程模拟软件被国外垄断也是掣肘我国化工行业发展的因素之一，开发针对煤制甲醇工业的专业用能分析平台有助于突破国外科技封锁，促进工业互联网的发展。

本文从图论的角度出发，建立了换热网络的有向图模型，分析各有向图矩阵代数意义与物理意义之间的关联。在换热网络有向图的基础上，基于波动传递路径与换热网络全局灵敏度定义了换热网络的扰动度，并利用深度优先遍历（DFS）算法对扰动度进行求解。基于超结构模型，建立了以能量和扰动度为目标的换热网络多目标同步综合数学模型，对 NSGA-II 算法进行改进并用于求解，得到乌托邦解的公用工程用量为 117617.15kW，扰动度为 3.69，年化费用为 26755.88 万元·年⁻¹，分析证明乌托邦解具有较低的公用工程用量与较强的解耦性，在考虑投资费用的条件下具有经济优势，优化结果全面优于 Aspen Energy Analyzer 的求解结果。基于 PyQt5 框架开发了换热网络扰动分析平台，主要实现功能有：夹点分析、不合理换热分析、负荷转移分析以及换热网络设计，对企业用能分析及能量系统设计有重要指导意义。

关 键 词： 甲醇合成；扰动度；多目标优化；软件

ABSTRACT

The coal-to-methanol industry plays an important role in the national economy. It is of great research value and practical significance to optimize the operation according to the change of production conditions. The monopoly of chemical process simulation software by foreign countries is also one of the critical factors that restrict the development of our chemical industry. The development of specialized energy analysis platform for coal-to-methanol industry is enormously helpful to break through foreign technology blockade and flourish the industrial internet.

In this work, the digraph model of heat exchanger network is established based on graph theory, and the relationship between the algebraic and physical meanings of digraph matrixes is analyzed. On the basis of the directed graph of the heat exchanger network, the excitation of the heat exchanger network is defined with the fluctuation transfer path and the global sensitivity. The Depth-first Search (DFS) algorithm is used to solve the excitation. Based on the superstructure model, a multi-objective synchronous comprehensive mathematical model of the heat exchange network with energy and disturbance as objectives is proposed. The NSGA-II algorithm is improved and used to solve this problem. The utility consumption of the Utopia solution is 117617.15kW, the Excitation is 3.69, and the annualized cost is 267 million yuan per year. It is proved that the Utopian solution has low utility consumption and strong decoupling, and has economic advantages considering investment cost. The optimization results are better than the results of Aspen Energy Analyzer. A heat exchange network disturbance analysis platform has been developed based on the PyQt5 framework, which equipped with pinch point analysis modular, unreasonable heat exchange analysis modular, load transfer analysis modular, and heat exchange network design modular. It has considerable guiding significance for enterprise energy consumption analysis and energy system design.

KEY WORDS: Methanol synthesis; Excitation; Multi-objective optimization; Software

目 录

1 绪论	1
1.1 研究背景及意义	1
1.2 国内外研究现状	2
1.2.1 国内外化工流程模拟软件	2
1.2.2 集成优化研究	2
1.2.3 换热网络与离散数学交叉研究	3
1.3 本文主要研究内容	3
2 换热网络的有向图	4
2.1 换热网络有向图的转换	4
2.2 矩阵表达	5
2.2.1 邻接矩阵	5
2.2.2 关联矩阵	7
2.3 参数波动的可达性	7
2.4 不相关子系统	9
2.5 本章小结	11
3 以扰动度及公用工程用量为目标的换热网络综合方法	12
3.1 换热网络的扰动度	12
3.1.1 波动传递路径	12
3.1.2 换热网络全局灵敏度	13
3.1.3 扰动度的定义	14
3.2 基于 DFS 算法的换热网络扰动度求解	14
3.2.1 基本数学模型转化	14
3.2.2 基于 DFS 算法求解换热网络扰动度	17
3.3 超结构模型	18
3.3.1 模型简介与改进	18
3.3.2 目标函数	19
3.3.3 约束条件	19
3.4 改进的 NSGA-II 算法	20
3.5 本章小结	24
4 煤制甲醇工艺节能优化分析	25
4.1 煤制甲醇工艺流程	25
4.2 换热网络设计优化与结果分析	28
4.3 求解结果的经济性分析	35

4.4 煤制甲醇工艺环境分析	38
4.5 本章小结	40
5 换热网络扰动分析平台	41
5.1 化工流程模拟软件的市场分析	41
5.2 换热网络扰动分析平台的开发	42
5.2.1 软件介绍页面	42
5.2.2 企业装置流程图页面	43
5.2.3 数据模块	45
5.2.4 夹点分析模块	46
5.2.5 不合理换热模块	47
5.2.6 负荷转移分析模块	48
5.2.7 换热网络设计模块	49
5.2.8 软件的打包与发布	50
5.3 本章小结	51
6 结论与展望	52
6.1 结论	52
6.2 展望	52
致 谢	54
参考文献	55
附 录	57

1 绪论

1.1 研究背景及意义

能源是人类社会赖以生存和发展的物质基础，在国民经济中具有特别重要的战略地位。我国虽然化石燃料总储量位居世界前列，但人均占有量低，能源利用效率低下。化石燃料不仅仅为化学工业提供能量和动力，还是化学工业重要的原材料。化工行业在中国工业中占据重要地位，主营业务收入在所有行业中占 9-11%左右，利润总额占比 8-10%左右，均位于所有工业行业第一位^[1]。化学工业耗能高，其用能、节能对国民经济尤为重要。

与此同时，我国也是全球气候治理的重要参与者。2020 年 9 月，习近平总书记在第 75 届联合国大会中提出“双碳”战略目标，即 2030 年实现碳达峰，2060 年实现碳中和^[2]。在此背景下，化学工业也参与到绿色经济的大循环当中来，一批“老、旧、高耗能”的工艺被逐渐淘汰或改造，取而代之的是“经济、环保、低耗能、数字化”的新工艺。原本粗放生产的化学工业，也逐渐向集约化、集成化、自动化、信息化、智能化的“五位一体”过渡。

以物联网、云计算、大数据以及 AI 为代表的新一代工业革命的技术正在蓬勃发展。2015 年 5 月，国务院正式印发《中国制造 2025》，部署全面推进实施制造强国战略，迎接“工业 4.0”^[3]。化工行业与新一代信息技术的紧密结合已成为发展的新趋势，自动化、信息化、智能化技术的利用将为化工企业赋予更高的安全性、生产效率以及盈利能力^[4]。

目前，我国使用的化工流程模拟软件基本被国外产品所垄断，如：Aspen Tech 旗下的 Aspen Plus 软件；SIMSCI 公司旗下的 PRO/II 软件和 HEXTRAN 软件；Chemstations 公司旗下的 ChemCAD 软件等等。这些公司通过长期工业数据的积累、用户的依赖以及代理商、服务商的平台化，形成“累积效应”、“锁定效应”和“生态效应”三大壁垒^[6]，使得国产化工软件难以突围。随着近年来美国对华政策的缩紧，我国高科技产业，尤其是化工工业软件存在着被“卡脖子、捏软肋”的巨大风险^[5]。

我国富煤、贫油、少气的能源结构决定了煤作为化石燃料以及化工原料在我国国民经济中的重要性。近年来，我国煤化工产业蓬勃发展，水煤气、煤制烯烃、煤制甲醇等工艺进一步完善。但是煤化工所带来的环境、能源问题也不容忽视，尤其是我国煤化工产业还面临着原料利用效率低、系统集成度低等问题^[7]。

综合上述讨论，对于煤化工产业进行能量系统集成、开发一款用于集成化工工业能量系统的软件就显得十分必要。这不仅仅响应了习近平总书记提出的“双碳”目标，有利于化工企业的节能减排、提高效益；还为打破国外工业软件的生态垄断助力赋能，为中国制造 2025 的顺利推进开出一剂良方。

1.2 国内外研究现状

1.2.1 国内外化工流程模拟软件

在化学工业中最常用的是化工流程模拟软件。目前，主要的化工流程模拟软件为美国 SIMSIC-ESSCOR 公司的 PRO/II、美国 Aspen Tech 公司的 Aspen Plus、Aspen Hysys、英国 PSE 公司的 gPROMS、美国 Chemstations 公司 ChemCAD 和美国 WinSim Inc. 公司的 Design II 和加拿大 Virtual Materials Group 的 VMGSim。PRO/II 在炼油工业应用更为准确些，因其数据库中有大量经验数据；而 Aspen Plus 更多基于机理模型，在化工领域表现更好；Aspen Hysys 主要用于炼油，动态模拟是它的优势。青岛科技大学自主开发了 ECSS 软件，但与国外软件比较无明显优势。以上均为通用模拟软件，可以适用于各种流程工艺的模拟。但相比较于专用软件，对不同的生产系统还需二次建模开发，且可能会出现物性数据不全、模拟不易收敛、结果误差较大等劣势。

针对于过程系统能量集成软件，主要有 Aspen Tech 公司的 Aspen Energy Analyzer 以及美国 SIMSIC-ESSCOR 公司的 HEXTRAN。以上两款都是基于夹点法和数学规划法对换热网络进行集成和综合的通用软件，但是由于实际生产状况的复杂性，对于流股数较多的情况往往不能确定性能较好的换热网络，且对于结构确定的实际系统，也较难预测参数波动的影响、辨识系统的瓶颈。同时，通用型软件对于企业要求的更精确的模型不能进行满足，如：基于非等温混合的换热网络综合、带有分支结构的换热网络综合以及各种多目标换热网络综合模型，这时就需要根据企业的实际需求进行专用软件的设计。

1.2.2 集成优化研究

1983 年英国学者 Linhoff 提出夹点技术，并用于换热网络的设计和综合^[8]。Papoulias 和 Grossmann^[9]于 1983 年提出了一种基于转运模型的混合整数数学规划法，可以设计出具有最小公用工程成本和最小换热单元数的网络，并允许流股分割。Floudas 等^[10]于 1986 年提出一种基于转运模型改进的非线性规划模型，这是一种分步综合换热器网络的数学规划法。Yee^[11]于 1990 年提出一种超结构模型，该模型是混合整数非线性规划模型，可以进行换热网络的同步综合，并基于罚函数法和内点法对模型进行全局优化求解^[12-13]。以上是过程系统集成领域非常经典的模型，之后的学者都是基于以上的工作进行补充或改进。

在具有不确定性参数的过程系统集成研究当中，许多学者也做出了卓越的贡献。Tian 等^[14]将加氢反应器与换热网络进行综合集成，分析了催化剂失活对能耗的影响。Zhang 等^[15]开发了一种基于夹点分析的通用方法，将换热网络与反应器综合集成，优化了反应器的操作工况。Ryu^[16]基于超结构的模型^[11]整合集成了反应器、分离器和换热网络，并对运用粒子群优化算法，实现了产品产量的最大化和公用工程用量的最小化^[17]。对于阈值条件下换热网络和反应器的集成优化，Zhang 等^[18]结合夹点分析和数学规划法，确定了不同转化率下的最大年净收益和相应的反应器操作温度。此外，他

他们还提出了合成反应器-精馏塔序-循环-换热网络系统集成方法^[19]，可以有效地确定最小能耗和相应的参数。

Zhao 等^[20]基于换热网络和反应器耦合的集成优化方法^[15]，考虑催化剂失活对反应器造成的影响和催化剂失活动力学构建了反应器-换热网络耦合图，确定了系统最佳更换催化剂的时间。在此基础上进一步分析了催化剂失活对换热网络的影响、以及不同路径和回路中各换热器的热负荷变化，提出了负荷转移规律^[21]，推导了各换热器负荷变化与温度和热容流率变化的关系，总结了单参数和多参数变动下的负荷转移分析方法^[22]。

以上工作都是基于运筹学、代数推导以及数学规划的方法对换热网络集成优化进行研究。但是上述研究没有认识到换热网络本质上也是图的一类，可以运用图论的观点进行描述和分析。

1.2.3 换热网络与离散数学交叉研究

秦等^[23]将管道网络抽象成拓扑模型，并运用邻接矩阵描述图的拓扑结构，解决了化工过程仿真中管道网络计算的问题，但没有深入到换热网络。Shivakumar 等^[24]将换热网络的超结构模型表示为流程图，将设计问题简化为找到流程图具有最优的回路负载的独立循环的集合，同时要满足热力学可行性约束和最小化年度成本。而如何从图论的观点寻找换热网络中的独立循环由 Zhu 等^[25]提出。Deo^[26]指出了换热网络的图也遵从欧拉公式，即热交换器单元的数量 $U = \text{流股总数 } N + \text{系统中的回路的数量 } L - \text{子系统的数量 } S$ 。冯等^[27-29]提出换热网络结构的图与有限对称群对图的作用，并根据该模型设计了分步优化的遗传算法对换热网络进行求解，缩小了问题的规模，除去了大量含最优解概率很低的可行域，增强了遗传算法的求解效率。

但以上工作都是从以费用最小作为换热网络的优化目标，没有考虑系统中的不确定参数对系统优化的影响，同时也未考虑设计出的换热网络抵抗参数波动能力的强弱。

1.3 本文主要研究内容

本文拟对某企业的甲醇合成及精馏工段进行系统地研究：

- 1) 基于图论观点出发对换热网络进行描述；
- 2) 基于换热网络负荷传递规律^[22]，对换热网络的扰动度进行定义，结合图论开发评价换热网络抵抗参数波动能力的数学模型，设计算法搜寻参数波动路径并求解扰动度；
- 3) 以换热网络扰动度及公用工程用量最小作为优化目标，设计换热网络多目标同步优化模型，并用改进的 NSGA-II 算法求解；

开发一款软件，要求能够实现以下功能：①内置企业流股数据和流程图；②寻找现行网络的不合理换热；③对网络进行夹点分析；④流股数据变化时展示热负荷的迁移路径和负荷变化；⑤以换热网络扰动度最小作为优化目标进行换热网络设计并以可视化方式展示结果。

2 换热网络的有向图

2.1 换热网络有向图的转换

当前，换热网络最常见的表示方法如图 2-1 所示。红色有向线段代表热流股，蓝色有向线段代表冷流股；冷热流股之间的换热则用一条线段连接。这种表示方法可以清晰地分辨流股之间是否存在换热关系以及换热顺序，但是不能很清晰地反应换热网络真实的拓扑结构。

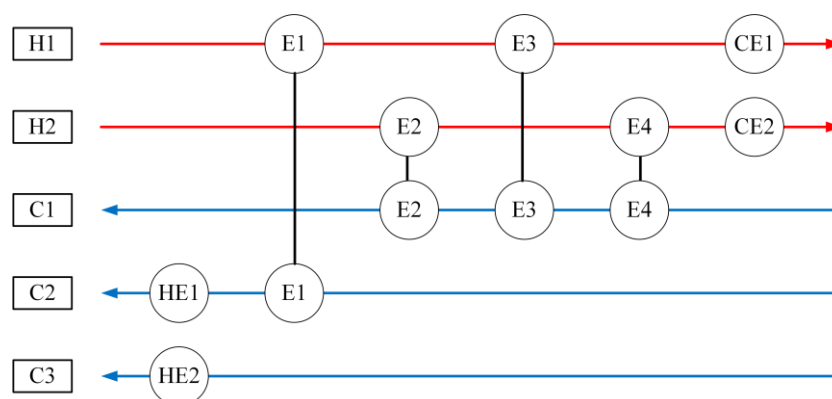


图 2-1 五流股换热网络系统常见表示方法

基于有向图的换热网络表示方法，可以清晰地反应换热器和流股之间真实的拓扑关系，并可以通过代数图论的方法分析换热网络有向图的几何意义与物理意义之间的联系。同时，这种表示方法更有利于将换热网络的结构作为参数参与计算机的存储与求解。

将换热网络转换为有向图之后的图像如图 2-2 所示，转化的基本原则如下：

- 1) 将每个流股的进出口视为一个虚拟节点，每个虚拟节点只允许入度为 1 或出度为 1；
- 2) 将每个公用工程换热器视为一个真实节点，每个公用工程节点的入度为 1 且出度为 1；
- 3) 将如图 2-1 所示的冷热流股间的换热器合并为一个真实节点，每个流股换热节点的入度为 2 且出度为 2；
- 4) 如果两个节点之间有流股流过，则按照流股的流动方向添加一条有向线段。

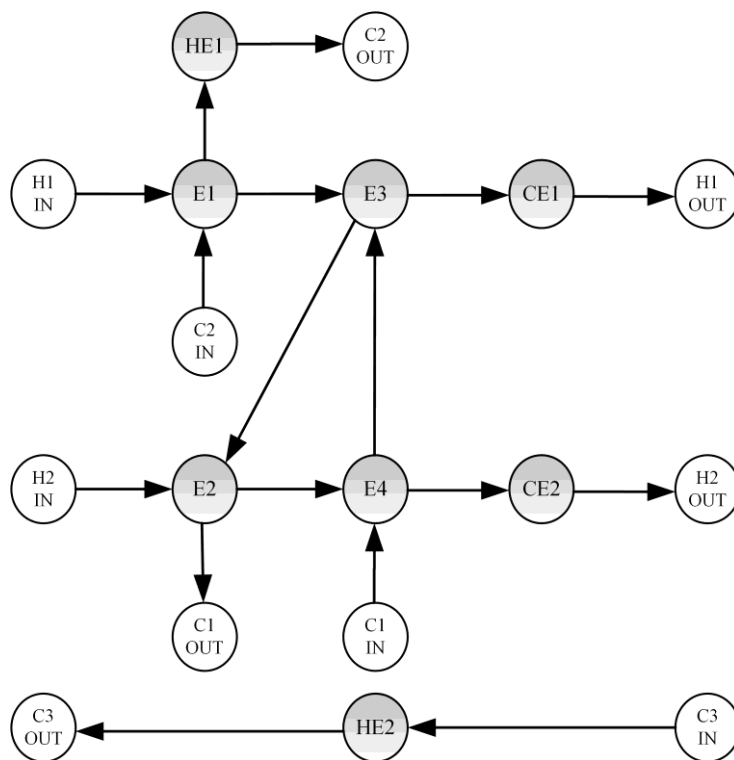


图 2-2 五流股换热网络系统有向图表示方法

2.2 矩阵表达

工艺流程的图论理论已经被广泛用于化工流程模拟领域，但是针对换热网络、系统优化以及不确定性参数分析等领域的图论应用鲜有学者涉及。将换热网络的有向图转化为矩阵的表达形式，对于借助计算机分析换热网络的参数波动是有效且必要的。本节主要介绍有向图的邻接矩阵与相邻矩阵两种表达方式。这两种矩阵表达方式适用于不同的分析场景。

2.2.1 邻接矩阵

设图 $G = \langle V, E \rangle$ ，有点集 $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ ，边集 $E = \{e_1, e_2, \dots, e_m\}$ ，邻接矩阵为 $n \times n$ 的二维矩阵，对于关联矩阵的任意元素有^[26]：

$$Adjacency_{ij} = \begin{cases} 0 & E \text{ 中没有从 } v_i \text{ 到 } v_j \text{ 的边} \\ 1 & E \text{ 中有从 } v_i \text{ 到 } v_j \text{ 的边} \end{cases} \quad (2-1)$$

邻接矩阵中， $\sum_{i=0}^n Adjacency_{ij} = d_j^{(+)}$ 为点 v_j 的出度， $\sum_{j=0}^n Adjacency_{ij} = d_i^{(-)}$ 为点 v_i 的入度。如图 2-2 所示有向图的点集与节点、边与流股的对应关系见表 2-1。将图 2-2 的有向图转化为邻接矩阵如公式(2-2)所示。邻接矩阵储存了换热器之间连接的结构信息，可用以分析参数波动在换热器之间传递的拓扑关系。例如：有从换热器 E1 到换热器 E3 的流股流过，即有从点 v_{15} 到点 v_{17} 的有向边，则 $Adjacency_{15,17} = 1$ 且 $Adjacency_{17,15} = 0$ ；反之，没有流股直接从换热器 E1 流向换热器 E2，即没有从点 v_{15} 直

接到点 v_{16} 的有向边则 $Adjacency_{15,16} = 0$ 。

$$Adjacency = \begin{matrix} & v_1 & v_2 & v_3 & v_4 & v_5 & v_6 & v_7 & v_8 & v_9 & v_{10} & v_{11} & v_{12} & v_{13} & v_{14} & v_{15} & v_{16} & v_{17} & v_{18} \\ \begin{matrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \\ v_5 \\ v_6 \\ v_7 \\ v_8 \\ v_9 \\ v_{10} \\ v_{11} \\ v_{12} \\ v_{13} \\ v_{14} \\ v_{15} \\ v_{16} \\ v_{17} \\ v_{18} \end{matrix} & \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \end{matrix} \quad (2-2)$$

表 2-1 点集、边集对应关系表

点	节点编号	边	对应流股
v_1	H1IN	e_1	H1IN→E1
v_2	H1OUT	e_2	E1→E3
v_3	H2IN	e_3	E3→CE1
v_4	H2OUT	e_4	CE1→H1OUT
v_5	C1IN	e_5	H2IN→E2
v_6	C1OUT	e_6	E2→E4
v_7	C2IN	e_7	E4→CE2
v_8	C2OUT	e_8	CE2→H2OUT
v_9	C3IN	e_9	C1IN→E4
v_{10}	C3OUT	e_{10}	E4→E3
v_{11}	CE1	e_{11}	E3→E2
v_{12}	CE2	e_{12}	E2→C1OUT
v_{13}	HE1	e_{13}	C2IN→E1
v_{14}	HE2	e_{14}	E1→HE1
v_{15}	E1	e_{15}	HE1→C2OUT
v_{16}	E2	e_{16}	C3IN→HE2
v_{17}	E3	e_{17}	HE2→C3OUT
v_{18}	E4		

2.2.2 关联矩阵

对于图 G ，其关联矩阵是 $n \times m$ 的二维矩阵， n 为顶点数量， m 为边数量。对于邻接矩阵的任意元素有^[26]：

$$Incidence_{ij} = \begin{cases} -1 & \text{点 } v_i \text{ 是有向边 } e_j \text{ 的源} \\ 1 & \text{点 } v_i \text{ 是有向边 } e_j \text{ 的阱} \\ 0 & \text{其他} \end{cases} \quad (2-3)$$

将如图 2-2 的有向图转化为关联矩阵如公式(2-4)所示。在关联矩阵中， $\sum_{j=0}^m Incidence_{ij} = d_i^{(-)} - d_i^{(+)}$ 为点 v_i 的入度减出度， $\sum_{i=0}^m Incidence_{ij} = 0$ 。表示关联矩阵储存了边与点之间的连接信息，可以提供换热器进出口流股的物理信息，同时也揭示了造成参数波动的流股在换热网络中的拓扑位置。例如：有流股从换热器 E1 直接流向换热器 E3 且中间不流经 E2，即边 e_2 的源为点 v_{15} 、阱为点 v_{17} 、点 v_{16} 不相关，则 $Incidence_{2,15} = -1$ ， $Incidence_{2,17} = 1$ ， $Incidence_{2,16} = 0$ 。

$$Incidence = \begin{matrix} & e_1 & e_2 & e_3 & e_4 & e_5 & e_6 & e_7 & e_8 & e_9 & e_{10} & e_{11} & e_{12} & e_{13} & e_{14} & e_{15} & e_{16} & e_{17} \\ \begin{matrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \\ v_5 \\ v_6 \\ v_7 \\ v_8 \\ v_9 \\ v_{10} \\ v_{11} \\ v_{12} \\ v_{13} \\ v_{14} \\ v_{15} \\ v_{16} \\ v_{17} \\ v_{18} \end{matrix} & \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \end{bmatrix} \quad (2-4)$$

2.3 参数波动的可达性

参数波动会通过换热器直接或间接地传播到下游流股当中，并可能导致系统的换热负荷出现盈余或亏损。探究一个流股源头的波动是否能传递到下游流股，并影响下游换热器的负荷是十分重要的。在本文中，通过引入并计算可达矩阵来判断一个流股源头的参数波动是否会传递给下游流股。

对于相同的图 G ，其可达矩阵为 $n \times n$ 的二维矩阵，对于任意 $\{v_i, v_j\} \in V$ ，存在一条

通路连接 v_i 和 v_j 则称 v_i 和 v_j 是可达的。 v_i 对于 v_j 可达则说明参数波动可以从 v_j 传递到 v_i 。对于可达矩阵的任意元素有：

$$Accessibility_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{无从 } v_i \text{ 到 } v_j \text{ 的通路存在} \\ 1 & \text{有从 } v_i \text{ 到 } v_j \text{ 的通路存在} \end{cases} \quad (2-5)$$

考虑到有时换热网络十分复杂，不能通过直接观察得出两点之间是否存在通路，可以通过邻接矩阵求解可达矩阵。主要的算法有连乘法、幂乘法、Warshall 算法^[30]以及 Tarjan 算法^[31]。

图 2-2 的可达矩阵如公式(2-6)所示，通过连乘法计算可达矩阵的伪代码如表 2-2 所示。

$$Accessibility = \begin{matrix} & \begin{matrix} v_1 & v_2 & v_3 & v_4 & v_5 & v_6 & v_7 & v_8 & v_9 & v_{10} & v_{11} & v_{12} & v_{13} & v_{14} & v_{15} & v_{16} & v_{17} & v_{18} \end{matrix} \\ \begin{matrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \\ v_5 \\ v_6 \\ v_7 \\ v_8 \\ v_9 \\ v_{10} \\ v_{11} \\ v_{12} \\ v_{13} \\ v_{14} \\ v_{15} \\ v_{16} \\ v_{17} \\ v_{18} \end{matrix} & \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \end{matrix} \quad (2-6)$$

表 2-2 连乘法计算可达矩阵算法

Input: Adjacency Matrix(Adj)	
Output: Accessibility Matrix(Acc)	
1	$S = Adj + I$ //S 为自乘矩阵, I 为单位阵
2	While (M 迭代前后不同):
3	If (第一次迭代):
4	$M = S \odot S$ // \odot 为布尔运算
5	Else :
6	$M = M \odot S$
7	$Acc = M - I$

2.4 不相关子系统

在过程系统工程中，不相关子系统被定义为子系统之间没有任何联系。对于换热网络，如果两个子系统之间没有热量及物质的交换就可以认为是不相关子系统，不相关子系统之间的参数波动不会互相传递。

在图论中，连通分量被定义为极大连通子图，即同一连通分量中的任意两点至少是单向可达的，不同连通分量之间没有共用点，也没有边互相连接。对于换热网络的有向图，边代表着物质的传递，点代表着能量的传递，也就是说换热网络有向图的连通分量之间没有热量与物质的交换，即换热网络有向图的连通分量之间可以视为换热网络的不相关子系统。对于换热器数量一定的换热网络来说，不相关子系统越多，意味着：换热网络的复杂程度越低、网络的解耦程度越高、参数波动对换热网络的影响越小。

在本文中，通过引入度矩阵及拉普拉斯矩阵来求解换热网络的不相关子系统。只有无向图中存在度矩阵和拉普拉斯矩阵，但是将有向图转变为无向图不会影响其不相关子系统，因此本文首先将有向图的邻接矩阵转化为无向图的邻接矩阵，即：

$$Adjacency' = Adjacency \vee Adjacency^T \quad (2-7)$$

其中， \vee 为或运算符号， $Adjacency^T$ 为 $Adjacency$ 的转置矩阵。

对于图 G ，度矩阵为 $n \times n$ 的二维对角线矩阵，对于度矩阵的对角线元素有：

$$Degree_{ii} = \sum_{j=0}^n Adjacency'_{ij} \quad (2-8)$$

例如图 2-2 的度矩阵为：

$$Degree = \begin{matrix} & \begin{matrix} v_1 & v_2 & v_3 & v_4 & v_5 & v_6 & v_7 & v_8 & v_9 & v_{10} & v_{11} & v_{12} & v_{13} & v_{14} & v_{15} & v_{16} & v_{17} & v_{18} \end{matrix} \\ \begin{matrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \\ v_5 \\ v_6 \\ v_7 \\ v_8 \\ v_9 \\ v_{10} \\ v_{11} \\ v_{12} \\ v_{13} \\ v_{14} \\ v_{15} \\ v_{16} \\ v_{17} \\ v_{18} \end{matrix} & \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4 \end{bmatrix} \end{matrix} \quad (2-9)$$

对于图 G ，拉普拉斯矩阵为 $n \times n$ 的二维矩阵：

$$Laplacian = Degree - Adjacency' \quad (2-10)$$

例如图 2-2 的拉普拉斯矩阵如公式(2-11)所示。拉普拉斯矩阵的行和和列和均为 0。

$$Laplacian = \begin{matrix} & \begin{matrix} v_1 & v_2 & v_3 & v_4 & v_5 & v_6 & v_7 & v_8 & v_9 & v_{10} & v_{11} & v_{12} & v_{13} & v_{14} & v_{15} & v_{16} & v_{17} & v_{18} \end{matrix} \\ \begin{matrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \\ v_5 \\ v_6 \\ v_7 \\ v_8 \\ v_9 \\ v_{10} \\ v_{11} \\ v_{12} \\ v_{13} \\ v_{14} \\ v_{15} \\ v_{16} \\ v_{17} \\ v_{18} \end{matrix} & \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 4 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & 4 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & 4 \end{bmatrix} \end{matrix} \quad (2-11)$$

对于方程 $Laplacian \cdot x = 0$ 求 x 的一个基础解系，可得：

$$x = A\alpha_1 + B\alpha_2 \quad (2-12)$$

其中 A 、 B 为任意实数，

$$\alpha_1 = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}^T \quad (2-13)$$

$$\alpha_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}^T \quad (2-14)$$

则可知对于图 2-2 的换热网络有向图共有两个不相关子系统，包括的点集分别为 $\{v_1, v_2, v_3, v_4, v_5, v_6, v_7, v_8, v_{11}, v_{12}, v_{13}, v_{14}, v_{15}, v_{16}, v_{17}, v_{18}\}$ 和 $\{v_9, v_{10}, v_{12}\}$ ，如图 2-3 所示。

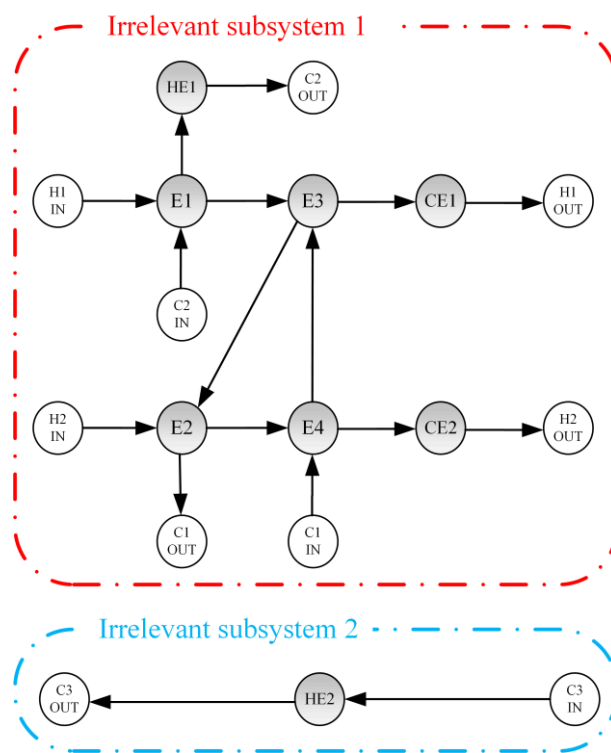


图 2-3 五流股换热网络系统不相关子系统示意图

2.5 本章小结

本章将换热网络抽象为有向图的表达形式，分析建立了换热网络有向图的邻接矩阵和关联矩阵用以储存换热网络的结构信息；考虑参数波动在换热网络结构中的传递特点，利用连乘法计算可达矩阵，可判断波动能否由一个换热器传递到另一个换热器，对于大型复杂换热网络的波动传递分析困难的痛点，给出了一种分析方案；建立了换热网络有向图的度矩阵和拉普拉斯矩阵，用于分析求解换热网络的不相关子系统，对于同一换热网络，不相关子系统越少，网络结构越复杂。

3 以扰动度及公用工程用量为目标的换热网络综合方法

3.1 换热网络的扰动度

本文针对高度耦合的换热网络系统，定义了换热网络的扰动度来衡量换热器之间的耦合程度及参数波动对换热网络系统的影响。扰动度越大代表着换热器之间的耦合程度越高，参数波动对整个系统的影响也就越大。本章将利用相邻矩阵和可达矩阵判断波动是否可达，在此基础上利用邻接矩阵中储存的换热网络节点信息，求解波动传递路径。

3.1.1 波动传递路径

探究参数波动对换热网络的影响首先要明确波动在换热网络中传播的路径。在换热网络扰动传递理论中，决策变量是指直接受到扰动的变量，状态变量是指受决策变量影响的变量，从决策变量到状态变量的扰动传播被定义为下游路径传播^[32]。热流路径是指连接换热网络中的加热器和冷却器的路线，包括该路线的所有热交换器^[33]。

Zhao 等^[21]根据热流路径定义了干扰迁移的路径/方向、关键设备和回路，阐明了单变量及多变量变化负荷迁移的计算公式及规律。然而，在真实的化工系统中，由于受到换热面积裕度的限制，负荷及波动转移的路径往往并不是单一的。本文针对 Zhao 等提出的模型做出了相应改进，以确保模型更加符合真实情况。图 2-2 所示的五个流股的系统将作为分析波动转移的一个说明性例子，以 H1 入口流股作为决策变量的波动迁移路径如图 3-1 所示。

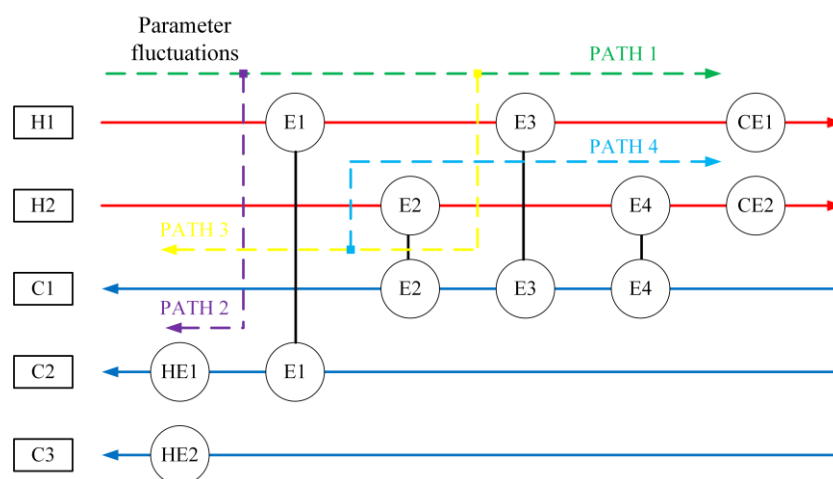


图 3-1 五流股换热网络系统参数波动传递路径图

寻找参数波动的所有传递路径的基本原则如下：

- 1) 从参数波动起点到每一个流股出口的所有热流通路均为一条潜在的波动传递路径；
- 2) 热流通路应符合下游路径规律，即只能按照流股流动的方向传播，不能逆向传播；

- 3) Shivakumar 等^[24]已经证明热负荷环路始终满足节点焓平衡, 因此波动传递路径中不应存在热负荷回路, 也就是说同一条波动传递路径中每个换热器只允许被经过一次;
- 4) 波动传递路径通常不考虑公用工程换热器, 因为在换热网络的设计性问题中通常认为公用工程温度和换热面积随网络需要而定, 不受到参数波动的影响。

3.1.2 换热网络全局灵敏度

当某一流股入口发生参数变动时, 对波动传递路径上的换热器的影响往往是不同的。为了衡量具体的影响程度大小, 本文引入灵敏度及灵敏度系数作为权值。灵敏度系数的大小反映了状态变量随决策变量波动的变化程度, 如果状态变量对决策变量的参数波动十分敏感, 即灵敏度系数很大, 获得一个稳定的操作系统是很困难的。

对于有 n 个决策变量、 m 个状态变量的系统。用 s 代表状态变量, d 代表决策变量; 状态变量相对于决策变量的一阶灵敏度系数由公式(3-1)表示:

$$Sensitivity_d^s = \frac{\Delta s / s^*}{\Delta d / d^*} \quad (3-1)$$

当 $\Delta d \rightarrow 0$ 时, $Sensitivity_d^s = \left(\frac{\Delta s}{\Delta d} \right)_d^*$, 则多维一阶灵敏度系数的矩阵可以用如下偏导数矩阵表示:

$$Sensitivity_D^S = \begin{bmatrix} \frac{\partial s_1}{\partial d_1} & \cdots & \frac{\partial s_n}{\partial d_1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial s_m}{\partial d_1} & \cdots & \frac{\partial s_m}{\partial d_n} \end{bmatrix}_{m \times n} \quad (3-2)$$

其中, \mathbf{S} 和 \mathbf{D} 分别为状态向量和决策向量:

$$\mathbf{S} = [s_1 \quad s_2 \quad \cdots \quad s_m]_m \quad (3-3)$$

$$\mathbf{D} = [d_1 \quad d_2 \quad \cdots \quad d_n]_n \quad (3-4)$$

对于一个由许多个换热单元组成的换热网络来说, 每一个换热单元模型都可以用一个热平衡方程和一个传热方程来描述:

$$Eq_{balance} = F_c C_{p_c} (t_c^{out} - t_c^{in}) - F_h C_{p_h} (t_h^{in} - t_h^{out}) = 0 \quad (3-5)$$

$$Eq_{transfer} = Q - AK \cdot LMTD \quad (3-6)$$

$$LMTD = \frac{(t_h^{in} - t_c^{out}) - (t_h^{out} - t_c^{in})}{\ln \left[(t_h^{in} - t_c^{out}) / (t_h^{out} - t_c^{in}) \right]} \quad (3-7)$$

其中, F ——流股流率/ $\text{kg} \cdot \text{h}^{-1}$; C_p ——流股热容/ $\text{kW} \cdot \text{h} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot ^\circ\text{C}^{-1}$; Q ——换热量/ kW ; K ——总传热系数/ $\text{kW} \cdot \text{m}^{-2} \cdot ^\circ\text{C}^{-1}$; A ——换热面积/ m^2 ; $LMTD$ ——对数平均换热温差/ $^\circ\text{C}$,

t ——流股温度/ $^{\circ}\text{C}$ ；上标 in 表示进口，上标 out 表示出口，下标 H 表示热流股，下标 C 表示冷流股。

对于有 n 个决策变量、 m 个状态变量、 i 个换热单元的换热网络有：

$$\mathbf{Eq} = f(\mathbf{S}, \mathbf{D})_{2i} = 0 \quad (3-8)$$

公式(3-8)是由所有换热单元模型方程组成的方程组。显而易见的是， \mathbf{S} 和 \mathbf{D} 之间具有一定的函数关系，因此可以表达为：

$$\mathbf{S} = g(\mathbf{D}) \quad (3-9)$$

令公式(3-8)左右两侧对 \mathbf{D} 求偏导，则有：

$$\left(\frac{\partial f(g(\mathbf{D}), \mathbf{D})}{\partial g(\mathbf{D})} \right) \left(\frac{\partial g(\mathbf{D})}{\partial \mathbf{D}} \right) + \left(\frac{\partial \mathbf{Eq}}{\partial \mathbf{D}} \right) = 0 \quad (3-10)$$

即，

$$\text{Sensitivity}_{\mathbf{D}}^{\mathbf{S}} = - \left(\frac{\partial \mathbf{Eq}}{\partial \mathbf{S}} \right)^{-1} \left(\frac{\partial \mathbf{Eq}}{\partial \mathbf{D}} \right) \quad (3-11)$$

其中， $\left(\frac{\partial \mathbf{Eq}}{\partial \mathbf{S}} \right)^{-1}$ 表示 $\left(\frac{\partial \mathbf{Eq}}{\partial \mathbf{S}} \right)$ 的左逆矩阵。由于 $\left(\frac{\partial \mathbf{Eq}}{\partial \mathbf{S}} \right)$ 是 $2i \times n$ 的二维矩阵，且 $2i > n$ ，因此 $\left(\frac{\partial \mathbf{Eq}}{\partial \mathbf{S}} \right)$ 左侧必然存在 Moore-Penrose 广义逆矩阵。

3.1.3 扰动度的定义

单个流股上的扰动度定义为：流股参数变化对其波动迁移路径的所有换热器的出口温度的灵敏度系数的绝对值之和乘参数波动区间。整个换热网络的扰动度即为单个流股的扰动度之和。

本文主要考虑温度波动的变化。假设一换热网络共有 P 条流股，每条流股入口对应的波动传递路径储存在嵌套序列 \mathbf{R} 中， $\mathbf{R} = [\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots]$ ，每条流股入口的参数波动区间为 \mathbf{W} 。取每条流股的入口温度 T^{in} 为决策变量，沿当前热流路径的换热器下游温度 t 为状态变量，定义换热网络扰动度为：

$$\text{Excitation} = \sum_{i=1}^P \mathbf{W}_i \sum_{j=1}^{\text{len}(\mathbf{R}_i)} \sum_{k \in \mathbf{R}_i(\mathbf{r}_j)} \left| \frac{\partial t_k}{\partial T_i^{in}} \right| \quad (3-12)$$

其中， $\text{len}()$ 表示获取序列长度的函数。

3.2 基于 DFS 算法的换热网络扰动度求解

3.2.1 基本数学模型转化

求解换热网络扰动度的关键之一为求解换热网络所有的波动传递路径。如图 2-1 所示的五流股换热网络系统，用常规表示方法难以实现利用计算机求解所有的波动传

递路径，因此将其转化为有向图表示是十分有必要的。将图 3-1 所示的五流股系统参数波动传递路径图转化为有向图的表达形式如图 3-2 所示。所有波动传递路径的节点都应在同一不相关子系统之中。将寻找参数波动的所有传递路径的基本原则转化为图论的语言描述为：

- 1) 从流股进口节点到流股出口节点之间的所有通路均为一条潜在波动传递路径；
- 2) 通路必须严格按照有向边的方向连接，即起点出度为 1 且入度为 0、终点入度为 1 且出度为 0、每个路径中的节点入度为 1 且出度为 1；
- 3) 通路中不允许存在环路，且每个节点只允许被访问一次；
- 4) 公用工程节点不纳入通路。

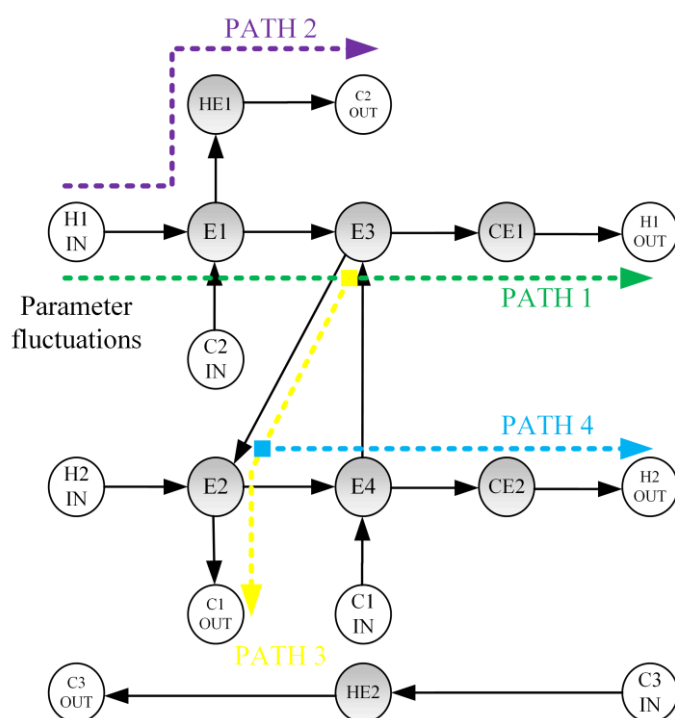


图 3-2 五流股换热网络系统参数波动传递路径的有向图

在图论中，有向图的简单路径被定义为：按照有向边连接的方向，所有顶点均不相同的路径。因此每个有向图的简单路径都应存在于同一连通分量当中。寻找换热网络所有波动传递路径，就等价于寻找换热网络有向图以流股入口节点为起点、以流股出口节点为终点的所有简单路径。

求解换热网络扰动度的另一关键即为求解状态变量关于决策变量的偏导数，即灵敏度系数矩阵。而求解灵敏度系数矩阵的关键为求解过程方程对决策变量及状态变量的偏导数矩阵。在本文中，将每条流股的进口温度视为决策变量，每个换热器的出口温度视为状态变量，针对换热网络设计性问题可以将每个换热器的热负荷及冷热公用工程的进出口温度视为常数。

对于任意一个换热器单元，将公式(3-8)对 t_H^{in} 、 t_H^{out} 、 t_C^{in} 、 t_C^{out} 求偏导，如公式(3-13)至公式(3-16)所示。表 3-1 汇总了过程方程对于决策变量及状态变量的偏导数计算公式。

$$\frac{\partial Eq_{transfer}}{\partial t_H^{in}} = -KA / \log \left(\frac{-t_C^{out} + t_H^{in}}{-t_C^{in} + t_H^{out}} \right) + \frac{KA \times (t_C^{in} - t_C^{out} + t_H^{in} - t_H^{out})}{(-t_C^{out} + t_H^{in}) \times \log \left(\frac{-t_C^{out} + t_H^{in}}{-t_C^{in} + t_H^{out}} \right)^2} \quad (3-13)$$

$$\frac{\partial Eq_{transfer}}{\partial t_H^{out}} = -KA / \log \left(\frac{-t_C^{out} + t_H^{in}}{-t_C^{in} + t_H^{out}} \right) - \frac{KA \times (t_C^{in} - t_C^{out} + t_H^{in} - t_H^{out})}{(-t_C^{in} + t_H^{out}) \times \log \left(\frac{-t_C^{out} + t_H^{in}}{-t_C^{in} + t_H^{out}} \right)^2} \quad (3-14)$$

$$\frac{\partial Eq_{transfer}}{\partial t_C^{in}} = -KA / \log \left(\frac{-t_C^{out} + t_H^{in}}{-t_C^{in} + t_H^{out}} \right) + \frac{KA \times (t_C^{in} - t_C^{out} + t_H^{in} - t_H^{out})}{(-t_C^{in} + t_H^{out}) \times \log \left(\frac{-t_C^{out} + t_H^{in}}{-t_C^{in} + t_H^{out}} \right)^2} \quad (3-15)$$

$$\frac{\partial Eq_{transfer}}{\partial t_C^{out}} = -KA / \log \left(\frac{-t_C^{out} + t_H^{in}}{-t_C^{in} + t_H^{out}} \right) - \frac{KA \times (t_C^{in} - t_C^{out} + t_H^{in} - t_H^{out})}{(-t_C^{out} + t_H^{in}) \times \log \left(\frac{-t_C^{out} + t_H^{in}}{-t_C^{in} + t_H^{out}} \right)^2} \quad (3-16)$$

表 3-1 过程方程对决策变量与状态变量的计算公式汇总表

			平衡方程				传热方程			
			t_H^{in}	t_H^{out}	t_C^{in}	t_C^{out}	t_H^{in}	t_H^{out}	t_C^{in}	t_C^{out}
$\frac{\partial Eq}{\partial \mathbf{D}}$	路径首个换热器	决策变量为冷流股入口温度	0	0	-FC _{pC}	0	0	0	Eq (3-15)	0
		决策变量为热流股入口温度	FC _{pH}	0	0	0	Eq (3-13)	0	0	0
		决策变量为冷热流股入口温度	FC _{pH}	0	-FC _{pC}	0	Eq (3-13)	0	Eq (3-15)	0
		路径非首个换热器	0	0	0	0	0	0	0	0
$\frac{\partial Eq}{\partial \mathbf{S}}$	路径首个换热器	决策变量为冷流股入口温度	FC _{pH}	FC _{pH}	0	-FC _{pC}	Eq (3-13)	Eq (3-14)	0	Eq (3-16)
		决策变量为热流股入口温度	0	FC _{pH}	-FC _{pC}	-FC _{pC}	0	Eq (3-14)	Eq (3-15)	Eq (3-16)
		决策变量为冷热流股入口温度	0	FC _{pH}	0	-FC _{pC}	0	Eq (3-14)	0	Eq (3-16)
		路径非首个换热器	FC _{pH}	FC _{pH}	-FC _{pC}	-FC _{pC}	Eq (3-13)	Eq (3-14)	Eq (3-15)	Eq (3-16)

3.2.2 基于 DFS 算法求解换热网络扰动度

Tarjan^[31]于 1972 年提出了深度优先遍历算法，是一种用于遍历或搜索树或图的算法，沿着图的生成树，尽可能深的搜索树的分支。该算法栈深最大为树的高度 h ，所以空间复杂度是 $O(h)$ ，其时间复杂度仅跟节点数 n 相关，为 $O(n)$ 。Deep-First Search (DFS) 算法的流程图如图 3-3 所示，本文将利用 DFS 算法求解换热网络所有可能的波动迁移路径，这是求解换热网络扰动度的必要前序工作。

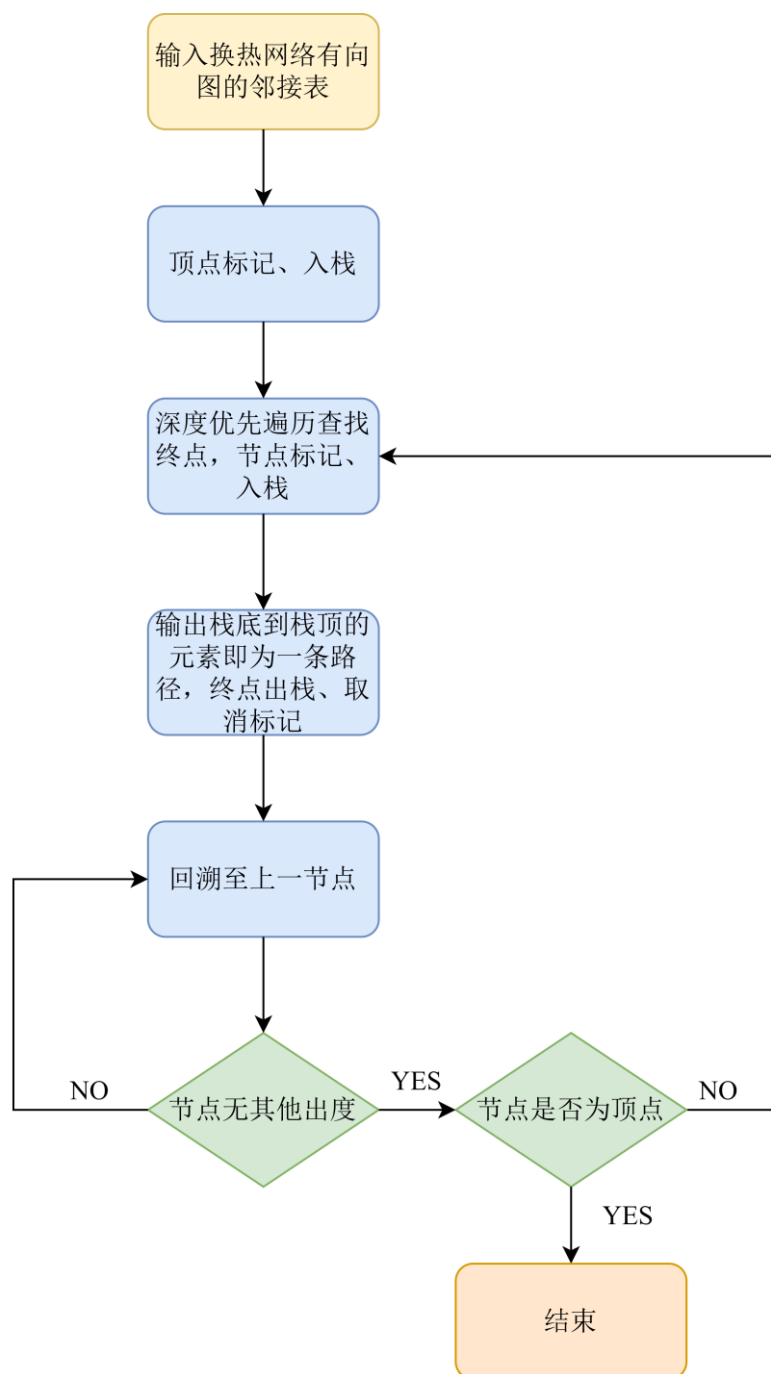


图 3-3 DFS 算法流程图

利用 DFS 算法求解换热网络扰动度的具体流程如下：

Step1. 初始化数据。输入算法所必要数据，包括：流股的温度、热容流率、公用工程温度、流股波动范围以及可行解的结构、能量和温度数据。

Step2. 对流股分配节点。首先按照可行解的结构信息，对每个流股的进出口、公用工程换热器以及冷热流股换热器按照流股顺序及流向分配节点及序号，每个节点的序号都是独特的，不允许重复。由于在可行解的结构信息里，每个冷热流股换热器是两个节点，但在利用 DFS 算法寻找潜在波动转移路径时应该视为一个节点，因此要对重复分配过的节点进行合并。

Step3. 查找波动迁移路径。将换热网络的连接信息储存到邻接矩阵中，并按照表 2-2 用连乘法计算可达矩阵。以每一个流股入口为起点，并以每个流股出口为终点，如果两点之间不可达，则输出空集合；如果两点之间可达，则通过如图 3-3 所示的 DFS 算法查找所有潜在的波动迁移路径。

Step4. 计算灵敏度系数矩阵。首先获取流股温度及换热器热负荷数据，根据公式(3-6)和公式(3-7)计算每个换热器的 KA 。第二步根据表 3-1 计算过程方程向量对决策变量的偏导数矩阵。第三步根据表 3-1 和公式(3-13)至公式(3-16)计算过程方程向量状态变量的偏导数矩阵。第四步，根据公式(3-11)计算灵敏度系数矩阵。特别需要注意的是，在这一步的计算中，冷热流股换热器对应的出口温度有两个，对应的节点序号只有一个，但是一个节点序号要储存两个决策变量的信息是不可能的。在 **Step2** 中实际上每个节点被分配了两个序号，但是其中一个没有被用到，因此可以利用这个多余的序号来储存另一个决策变量的信息。

Step5. 计算扰动度。根据上述步骤得到的波动迁移路径、灵敏度系数矩阵以及公式(3-12)可以计算得到整个换热网络的扰动度。

3.3 超结构模型

3.3.1 模型简介与改进

本文建立的模型是基于 Yee 和 Grossmann^[11]提出的无分流的分级超结构模型。基于这种方法提出的换热网络综合超结构通常为混合整数非线性规划问题，是一种存在多个局部最优解的、不连续、非凸、非线性的数学模型。这种带有整数变量、高度非凸非线性的特点给优化造成了很大的难度。因此，对于超结构模型进行改进是十分必要的。

Yee 和 Grossmann^[11]提出的超结构模型的基本形式如图 3-4 所示。所有热流股流动方向从左向右，冷流股流动方向从右向左；冷热公用工程放在流股最末端。对于有 N_H 个热流股， N_C 个冷流股的系统，超结构级数为 $N_s = \max\{N_H, N_C\}$ 。流股混合假设为等温混合。Yee 和 Grossmann^[11]提出的目标函数包括公用工程费用、换热器固定费用

及换热单元面积费用。在本文中，为了降低模型的非凸性及非线性，仅考虑公用工程用量作为目标之一，从而避免了传热方程必须满足的非线性约束。

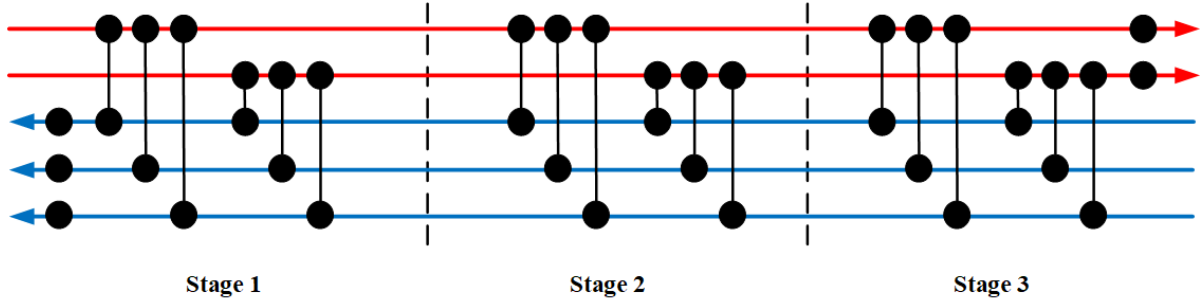


图 3-4 Grossmann 超结构模型基本形式

冯等^[27]从群论的角度出发，构建了换热网络图的模型，证明了属于同一等价类的图度数相同，属于不同等价类的图度数不相同，即图 3-5(a)和图 3-5(b)虽然从物理意义上是不同的两个换热网络，但从拓扑结构的角度来说是一样的，都可以抽象成图 3-5(c)，因此他们属于同一等价类，且顶点连接的边数和相等。基于这种思想，本文将换热网络的每一级视为一个子图，约束子图的度数最大为 $N_G = \min \{N_H, N_C\}$ ，即每条流通股最多存在一个换热器。对于整个换热网络，最多存在 $N_S \times N_G = N_H \times N_C$ 个换热器。这种约束可以大大减小问题的规模，除去大量含最优解概率很低的可行域。

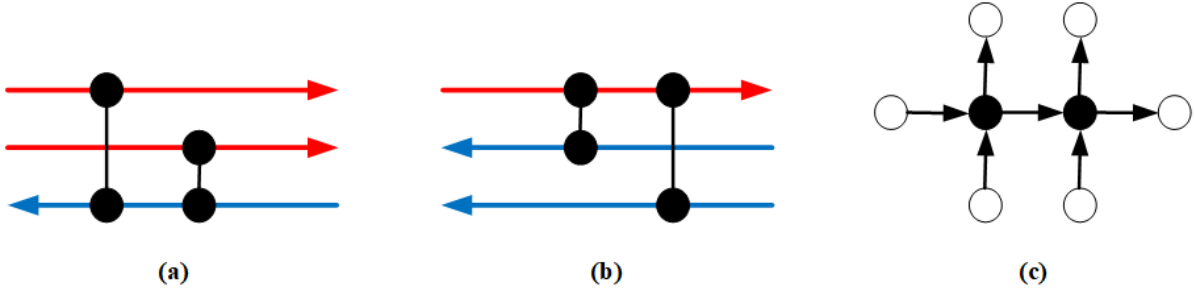


图 3-5 等价类示意图

3.3.2 目标函数

$$\min Excitation = \sum_{i=1}^P W_i \sum_{j=1}^{len(R_i)} \sum_{k \in R_i(r_j)} \left| \frac{\partial t_k}{\partial T_i^{in}} \right| \quad (3-17)$$

$$\min Energy = \sum_{i=1}^{N_H} Q_{CU,i} + \sum_{j=1}^{N_C} Q_{HU,j} \quad (3-18)$$

3.3.3 约束条件

1) 流通股热平衡方程

$$(T_i^{in} - T_i^{out}) \cdot F_i \cdot Cp_i = \sum_{k=1}^{N_S} \sum_{j=1}^{N_C} Q_{i,j,k} + Q_{CU,i} \quad i \in N_H \quad (3-19)$$

$$(T_j^{out} - T_j^{in}) \cdot F_j \cdot Cp_j = \sum_{k=1}^{N_S} \sum_{i=1}^{N_H} Q_{i,j,k} + Q_{HU,j} \quad j \in N_C \quad (3-20)$$

2) 超结构分级热平衡

$$\begin{aligned} Q_{i,j,k} &= F_i \cdot Cp_i \cdot (t_{i,k}^{in} - t_{i,k}^{out}) \\ &= F_j \cdot Cp_j \cdot (t_{j,k}^{out} - t_{j,k}^{in}) \end{aligned} \quad i \in N_H, j \in N_C, k \in N_S \quad (3-21)$$

3) 换热器平衡方程

$$Q_{CU,i} = F_i \cdot Cp_i \cdot (t_{i,N_S}^{out} - T_i^{out}) \quad i \in N_H \quad (3-22)$$

$$Q_{HU,j} = F_j \cdot Cp_j \cdot (T_j^{in} - t_{j,1}^{in}) \quad j \in N_C \quad (3-23)$$

4) 温度可行性约束

$$t_{i,k} \geq t_{i,k+1} \quad i \in N_H, k \in N_S - 1 \quad (3-24)$$

$$t_{j,k} \geq t_{j,k+1} \quad j \in N_C, k \in N_S - 1 \quad (3-25)$$

$$t_{i,N_S}^{out} \geq T_i^{out} \quad i \in N_H \quad (3-26)$$

$$T_j^{out} \geq t_{j,1}^{out} \quad j \in N_C \quad (3-27)$$

5) 换热温差约束

$$t_{i,k}^{in} - t_{i,k}^{out} \geq \Delta t_{\min} \quad i \in N_H, j \in N_C, k \in N_S \quad (3-28)$$

$$t_{i,k}^{out} - t_{j,k}^{in} \geq \Delta t_{\min} \quad i \in N_H, j \in N_C, k \in N_S \quad (3-29)$$

6) 换热器个数约束

$$\sum_{i=1}^{N_H} Z_{i,j,k} \leq 1 \quad j \in N_C, k \in N_S \quad (3-30)$$

$$\sum_{j=1}^{N_C} Z_{i,j,k} \leq 1 \quad i \in N_H, k \in N_S \quad (3-31)$$

7) 0-1 约束

$$Z_{i,j,k} = \begin{cases} 0 & k \text{ 级中 } i, j \text{ 流股之间无换热} \\ 1 & k \text{ 级中 } i, j \text{ 流股之间有换热} \end{cases} \quad i \in N_H, j \in N_C, k \in N_S \quad (3-32)$$

其中， T ——流股温度/ $^{\circ}\text{C}$ ， t ——超结构级的温度/ $^{\circ}\text{C}$ ； F ——流量/ $\text{kg} \cdot \text{h}^{-1}$ ； Cp ——热容/ $\text{kW} \cdot \text{h} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot ^{\circ}\text{C}^{-1}$ ； Q ——热负荷/ kW ； Z 为 0-1 变量，表示换热器是否存在。下标 H 表示热流股；C 表示冷流股，CU 表示冷却公用工程，HU 表示加热公用工程。上标 in 表示入口，out 表示出口。

3.4 改进的 NSGA-II 算法

NSGA-II 算法于 2002 年由 Deb 等^[34]提出，这种算法模仿自然界中种群基因选择、交叉及变异，被广泛认为是一种优秀的多目标优化算法。改进的 NSGA-II 算法总体流程图如图 3-6 所示。

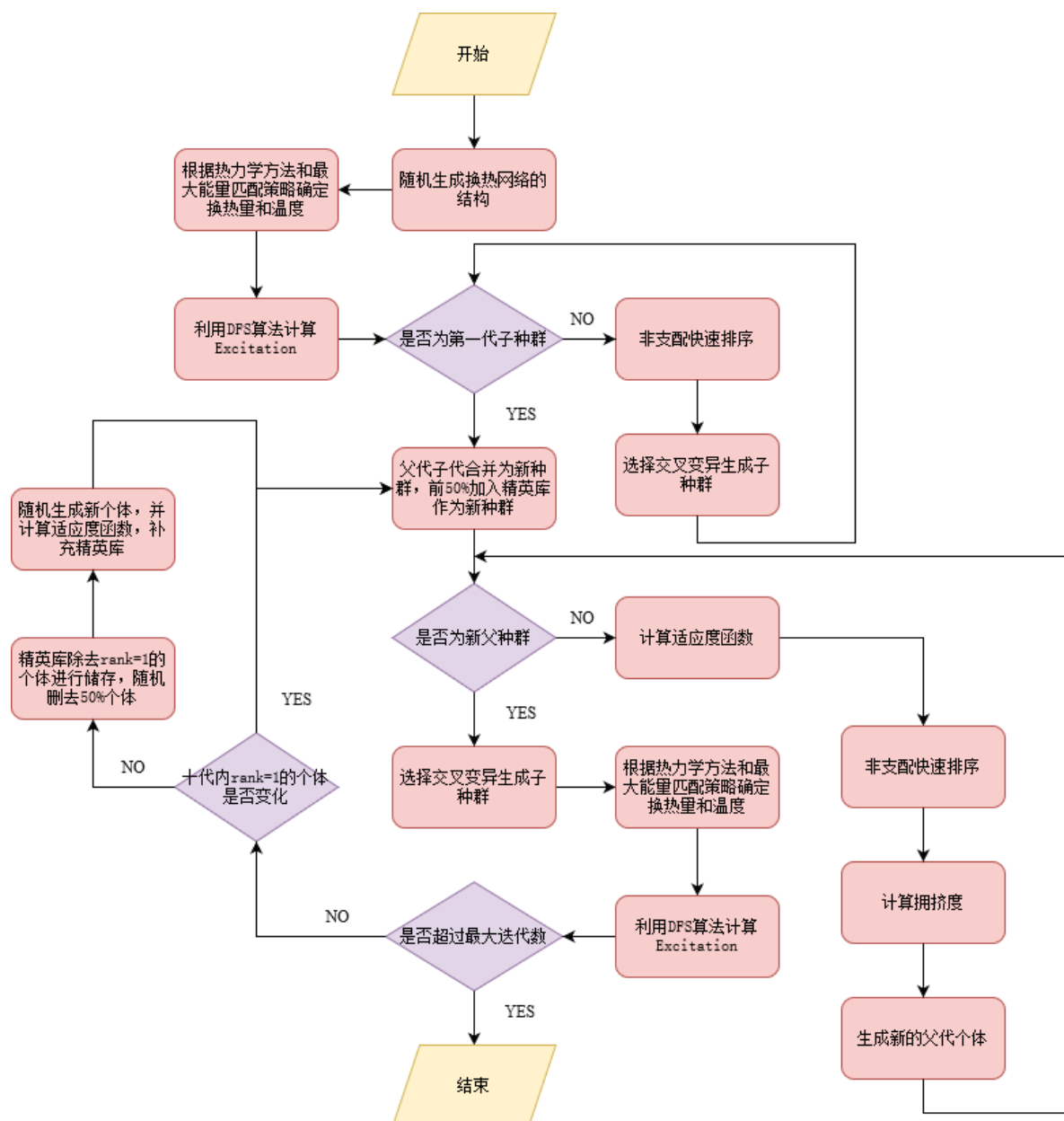


图 3-6 改进的 NSGA-II 算法流程图

1) 禁止匹配与最大能量匹配策略

由于换热网络的超结构模型是一个有极为苛刻约束条件的数学模型，因此随机生成的初始解几乎百分之百是不可行解。如果一个种群大部分解都是不可行的，进化得到的结果是不能保证其可行性与最优性的。鉴于约束条件的严苛性，本文提出了禁止匹配策略和最大能量匹配策略，确保在初始解的生成过程中可以生成足够量的可行解。

换热网络超结构模型约束条件的苛刻性主要体现在温度约束。两个流股之间的可能温度关系有三种,如图 3-7 所示。如图 3-7 (a)所示,热流股进口温度大于冷流股进口温度,且热流股出口温度大于冷流股出口温度,符合约束条件,允许两个流股之间存在换热器。如图 3-7 (b)所示,热流股进口温度大于冷流股进口温度,但热流股出口温度小于冷流股出口温度,符合部分约束条件,在温度交叉之前允许两个流股之间存在

在换热器。如图 3-7 (c)所示，热流股进口温度小于冷流股进口温度，且热流股出口温度小于冷流股出口温度，不符合约束条件，因此两个流股之间应该设置禁止匹配，即 $Z_{i,j,k}$ 恒等于 0。虽然禁止匹配策略不能保证得出的所有解全部为可行解，但是可以为计算除去大量不可行解，提高解的质量，为下一步工作提供铺垫。

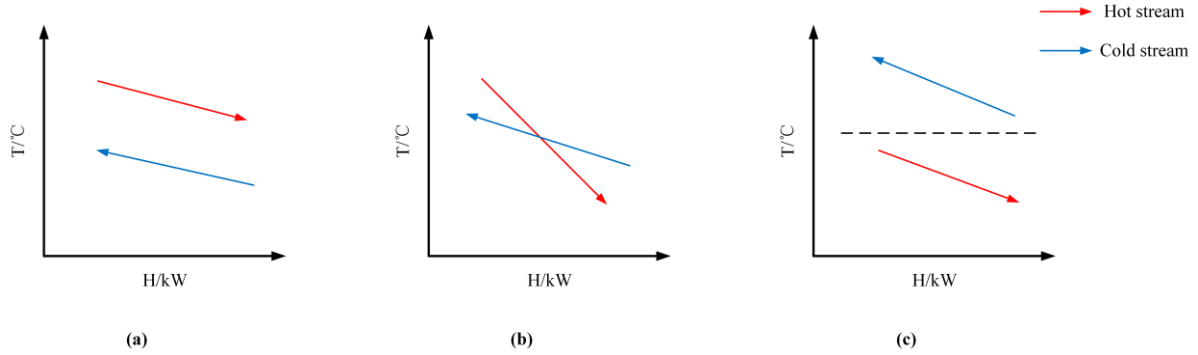


图 3-7 流股温度匹配关系示意图

换热网络超结构模型约束条件的苛刻性其次体现在换热负荷与温度约束之间相互掣肘。随机生成换热器负荷可能会导致温度约束不满足，因此本文设计了一种最大能量匹配策略解除两者之间的制约关系。

首先通过禁止匹配策略生成可行解结构，此结构应只存在如图 3-7(a)及图 3-7(b)之间的匹配，并且每个超结构级中每条流股至多存在一个换热器。最大能量匹配策略是指在分配换热器负荷时，设置其所交换的能量为其所能交换能量的最大值。对于一个换热器其变量是否可行分为两种情况：如图 3-8(a)所示的情况为仅受流股最大换热量的约束，如图 3-8(b)所示的情况即受到流股最大换热量和温度同时的约束。

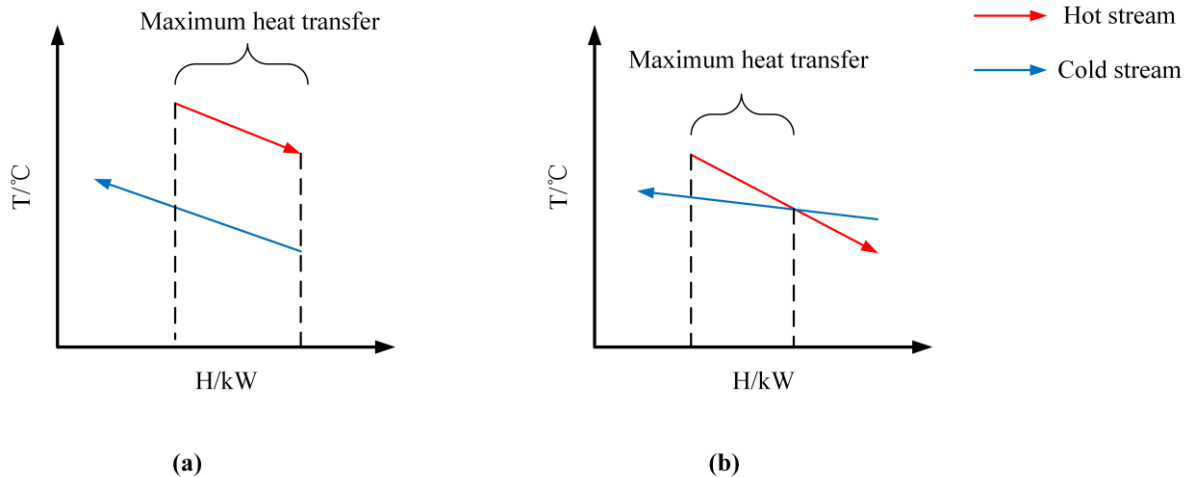


图 3-8 流股最大能量匹配示意图

最大能量匹配算法可行的关键是不不断更新流股的进出口温度。如果从换热网络左侧开始计算，则将换热器热流股出口温度设置为下一超结构级热流股的入口温度，换热器的冷流股进口温度设置为下一超结构级冷流股出口温度。因为每一级超结构每个流股只存在一个换热器，因此经过最大能量匹配算法得到的换热器负荷是完全符合约束条件的。在进行最大能量匹配之后要对没有完全换热的流股添加公用工程，并去除

换热量为 0 的换热器。添加公用工程会导致换热器进出口温度变化，由于公用工程设置在冷热流股末端，添加热公用工程会使换热器冷流股进出口温度降低，添加冷公用工程会使换热器热流股进出口温度升高，因此并不影响解的可行性。添加公用工程后换热器温度变化可行性示意图如图 3-9 所示。

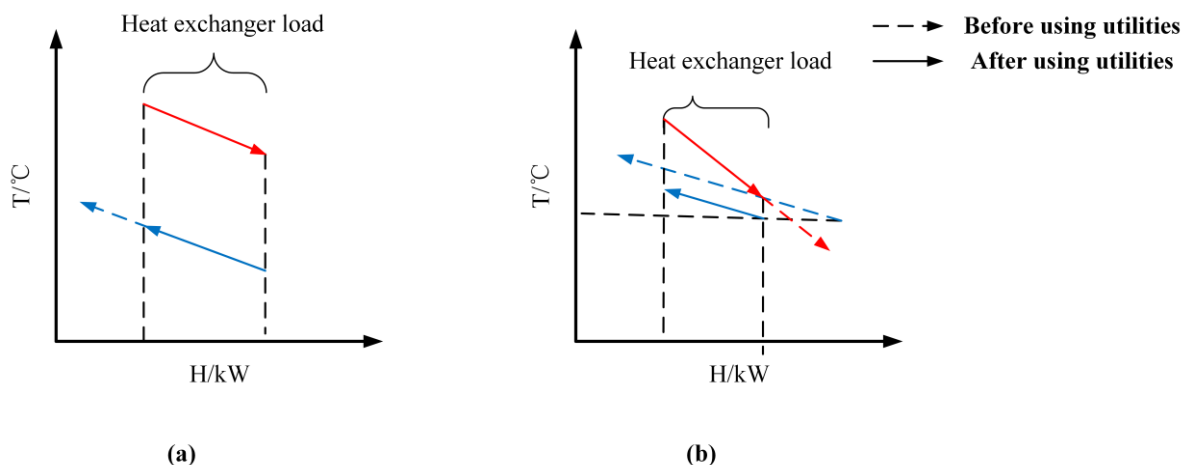


图 3-9 添加公用工程后换热器温度变化可行性示意图

2) 算子改进策略

Strategy1 选择策略：合理的选择策略是种群能向全局最优进化的关键，本文采用的是轮盘赌和二元锦标赛相结合的策略进行选择，同时考虑了解之间的支配关系及拥挤度。先利用轮盘赌选择作为亲代个体的级别，再在这一级别中随机选择两个个体，利用二元锦标赛选出较优的个体作为亲本之一。轮盘赌的概率计算如公式（4-20）所示：

$$P(i) = \frac{\sum_{k=0}^{len(rank_i)} (obj_{1,max} - obj_{1,k}) + \sum_{k=0}^{len(rank_i)} (obj_{2,max} - obj_{2,k})}{\sum_{j=0}^{len(pop)} (obj_{1,max} - obj_{1,j}) + \sum_{j=0}^{len(pop)} (obj_{2,max} - obj_{2,j})} \quad (3-33)$$

其中，rank 表示拥有相同支配关系级别的解集，pop 表示整个种群。

Strategy2 去顶灾变策略：由于本文提出的模型具有高度的非凸性，在进化计算的过程中容易陷入局部最优，因此在进化计算的过程中需要进行一定的策略使种群跳出局部最优。本文模仿自然界及社会中的常见规律设计了一种去顶及灾变策略。当种群的帕累托解集超过三代不发生变化时，意味着种群不能通过进化产生更多样的个体，因此会引发过多基因相近的个体交配，这种现象会放大基因缺陷导致种群疾病、畸形等等，从而引发种群的生态崩塌。当触发去顶及灾变策略时，种群的帕累托前沿将会被剔除出种群，其余个体会因为灾变消减 50%。最后通过随机生成新个体来补充种群缺失的个体数。这种策略能使种群进化在陷入局部最优时跳出局部最优解。

Strategy3 人口迁移策略：对于一个正常的人类社会来说，人口是不断流动的，对于一个种群来说，人口的迁移能为其带来更丰富的基因。本文提出一种人口迁移策略，即每代种群都会有 10% 的人口流出，又会有相同数量的人口迁入。通过随机剔除 10%

的种群个体，再随机生成相同数量的个体，以保证种群基因的丰富度。

Strategy4 基因库策略：由于在进化过程中局部最优解是否为全局最优解是未知的，因此将局部最优解完全剔除是不正确的。本文建立了基因库策略，将储存每代进化过程中的帕累托解集。当引发去顶灾变策略或人口迁移策略时局部最优解将不再参与进化迭代，确保种群进化方向是跳出局部最优解、同时保留局部最优解基因的关键，可确保全局最优解不会因此被剔除。在进化达到迭代次数跳出循环时，将基因库与最终种群合并，选出最终的帕累托解集。

3.5 本章小结

本章首先通过负荷迁移路径及换热网络灵敏度定义了换热网络的扰动度，并提出一种基于 DFS 的算法用于求解换热网络扰动度；基于超结构模型，运用禁止匹配原则与最大能量匹配原则转化了约束条件，形成了以扰动度与能量为目标的数学规划法结合热力学的多目标优化模型；对于 NSGA-II 算法做出了四个改进策略：轮盘赌结合二元锦标赛的选择策略、去顶灾变策略、人口迁移策略以及基因库策略。

4 煤制甲醇工艺节能优化分析

煤是我国重要的能量来源，但煤炭直接燃烧利用会造成严重的环境污染，由煤制甲醇可以促进煤的清洁利用。甲醇也是我国战略性的化工原料之一，可以作为合成橡胶、甲醛、醋酸等重要化工产品的原料。除此之外，甲醇也在有机液体储氢、汽车燃料电池等新兴领域扮演着重要角色。2022 年，我国煤制产能超 7500 多万吨，约占全中国总产能 77%^[35]。但煤制甲醇能耗高，焦炉煤气制甲醇单位产品能耗准入值为 $1350\text{kgce}\cdot\text{t}^{-1}$ ，单位产品能耗先进值为 $1250\text{kgce}\cdot\text{t}^{-1}$ ^[36]。针对煤制甲醇工艺进行能量、经济以及环境性分析十分有必要。

4.1 煤制甲醇工艺流程

本文选取某年产 551880 吨精甲醇的煤制甲醇工厂采用煤气化制甲醇工艺进行分析。气化工段采用水煤浆气化技术，生成的粗合成气经脱酸和低温甲醇洗得到洁净的合成气；洁净的合成气进入甲醇合成工段，经过甲醇精馏工段生成精甲醇，副产异丁基油； H_2S 去硫回收工段，生成单质硫。甲醇合成与甲醇精馏工段是关键工段，其流程图分别如图 4-1 和图 4-2 所示。

根据厂方提供的温度、压力以及流量、组成等数据，利用 Aspen Plus 进行模拟，确定了当前换热器的实际换热量，甲醇合成及精馏工段的源阱物流数据如表 4-1 所示。本装置采集和模拟所得物料数据与装置实际生产情况基本相符，能反映装置的实际生产情况。

换热网络的分析主要考虑流经换热器、冷却器和加热器等的物流。统计知，现行换热网络共有热物流 10 股，冷物流 7 股；冷热流股换热器 3 个，冷却公用工程换热器 9 个，加热公用工程换热器 4 个，现行换热网络图像如图 4-3 所示。

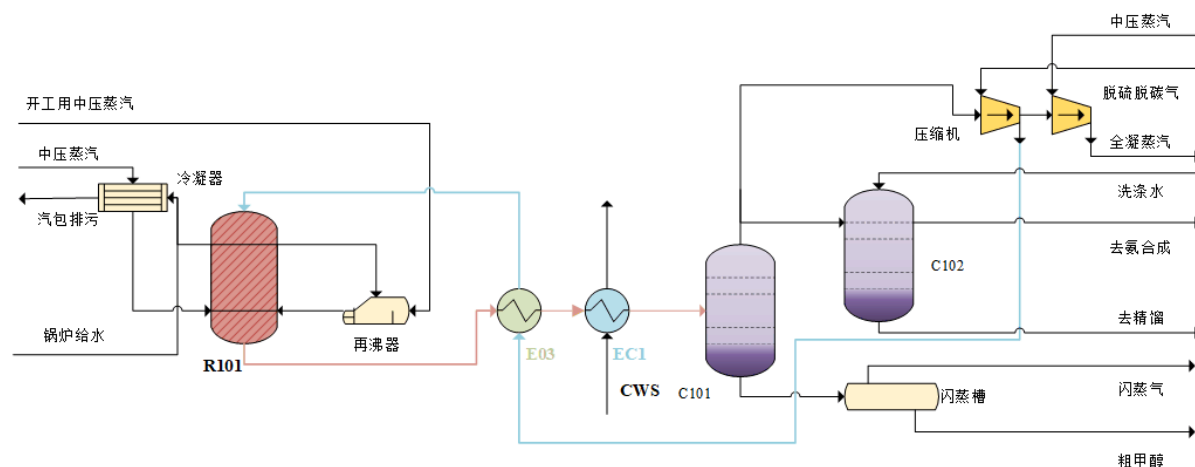


图 4-1 煤制甲醇装置甲醇合成工段工艺流程图

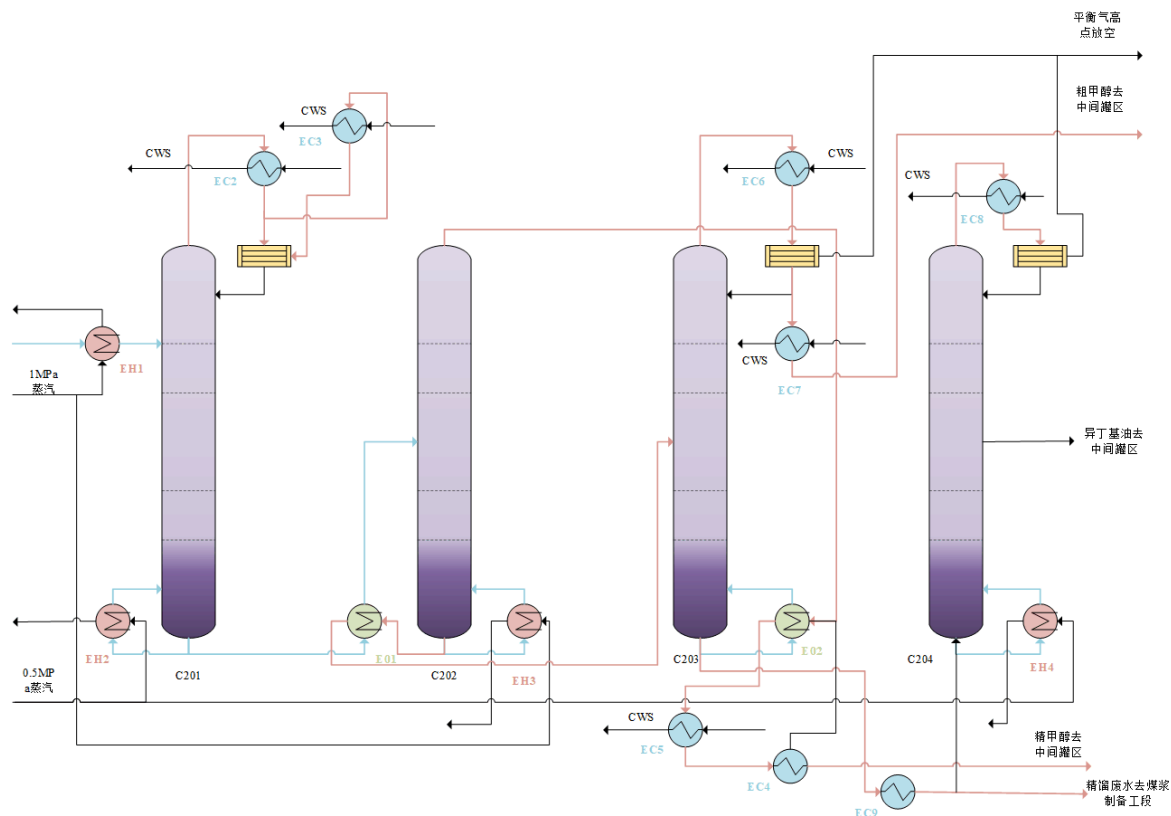


图 4-2 煤制甲醇装置甲醇精馏工段工艺流程图



图 4-3 甲醇合成及精馏工段现行换热网络图像

表 4-1 甲醇合成及精馏工段源阱物流数据

流股 编号	流股描述	换热器编 号	温度/℃		流量 /kg·h ⁻¹	平均热容流率 /kW·℃ ⁻¹	热负荷 /kW	换热介质
			出口	进口				
H1	反应器 R101 出料	E03	102	242	279623	284.67	39854	物料
H2	换热器 E01 出料	EC1	30	102	279623	25.64	1846	CW
H3	预塔 C201 塔顶出料	EC2	57	72	47000	983.07	14746	CWS
H4	EH2 出料	EC3	54	57	2480	28.33	85	CWS
H5	加压塔 C202 塔釜出料	E01	102	125	41978	52.35	1204	物料
H6	精甲醇	EC4	44	112.6	34800	33.01	2278	CWS
H7	加压塔 C202 塔顶出料	E02	117.3	117.4	133000	359810	35981	物料
H8	E02 出料	EC5	112.6	117.3	133000	144.47	679	CWS
H9	常压塔 C203 塔顶出料	EC6	53	68	119517	2529	37935	CWS
H10	塔顶冷凝器出料	EC7	31	51	32500	27.65	553	CWS
H11	回收塔 C204 塔顶出料	EC8	49	69	3502	56.3	1126	CWS
H12	常压塔 C203 塔釜出料	EC9	40	109	8114	9.75	673	CWS
C1	反应器 R101 进料	E03	208	43	279623	241.54	39854	物料
C2	粗甲醇	EH1	61	40	70715	63.81	1340	1Mpa 低压蒸汽
C3	C201 塔釜再沸	EH2	73.8	73	127449	20300	16240	0.5Mpa 低压蒸汽
C4	加压塔 C202 进料	E01	89	74.3	76778	81.9	1204	物料
C5	加压塔 C202 塔釜再沸	EH3	126	123	171184	13090	39270	1Mpa 低压蒸汽
C6	常压塔 C203 塔釜再沸	E02	109.3	109.2	67191	359810	35981	物料
C7	C204 再沸	EH4	105.1	105		10680	1068	0.5Mpa 低压蒸汽

4.2 换热网络设计优化与结果分析

将相同流股合并后的源阱流股数据如表 4-2 所示。通过夹点法分析，该系统理论最小公用工程用量为 109206kW，在全部使用公用工程换热时有理论最小扰动度——0。

表 4-2 合并流股后源阱物流数据表

流股编号	流股描述	温度/℃		流量 /kg·h ⁻¹	平均热容 流率 /kW·℃ ⁻¹	热负荷/kW
		进口	出口			
H1	反应器 R101 出料	242	30	279623	284.67	39854
H2	预塔 C201 塔顶出料	72	57	47000	983.07	14746
H3	EH2 出料	57	54	2480	28.33	85
H4	加压塔 C202 塔釜出料	125	102	41978	52.35	1204
H5	精甲醇	112.6	44	34800	33.01	2278
H6	加压塔 C202 塔顶出料	117.4	112.6	133000	359810	35981
H7	常压塔 C203 塔顶出料	68	53	119517	2529	37935
H8	塔顶冷凝器出料	51	31	32500	27.65	553
H9	回收塔 C204 塔顶出料	69	49	3502	56.3	1126
H10	常压塔 C203 塔釜出料	109	40	8114	9.75	673
C1	反应器 R101 进料	43	208	279623	241.54	39854
C2	粗甲醇	40	61	70715	63.81	1340
C3	C201 塔釜再沸	73	73.8	127449	20300	16240
C4	加压塔 C202 进料	74.3	89	76778	81.9	1204
C5	加压塔 C202 塔釜再沸	123	126	171184	13090	39270
C6	常压塔 C203 塔釜再沸	109.2	109.3	67191	359810	35981
C7	C204 再沸	105	105.1		10680	1068

设定遗传算法的相关参数为：种群进化代数共 15 代，种群规模共 100 个个体，交叉率 50%，变异概率 5%，每代生成子代 30 个。用于优化换热网络扰动度与能量的改进 NSGA-II 算法是基于 Python3.7 编写的，电脑处理器型号为 Inter(R)Core(TM)i5-9300H CPU @2.40GHz，运行内存(RAM)为 8.00G。求解时间为 101.97s，最小能量目标进化曲线和最小扰动度目标进化曲线分别如图 4-4 和图 4-5 所示，求解得到的帕累托前沿如图 4-6 所示。

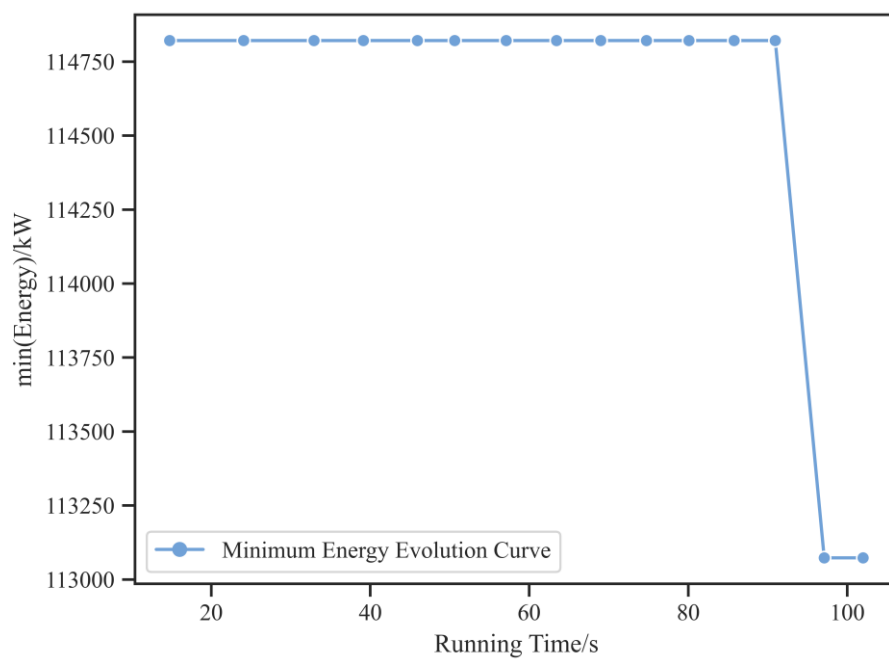


图 4-4 最小能量目标进化曲线

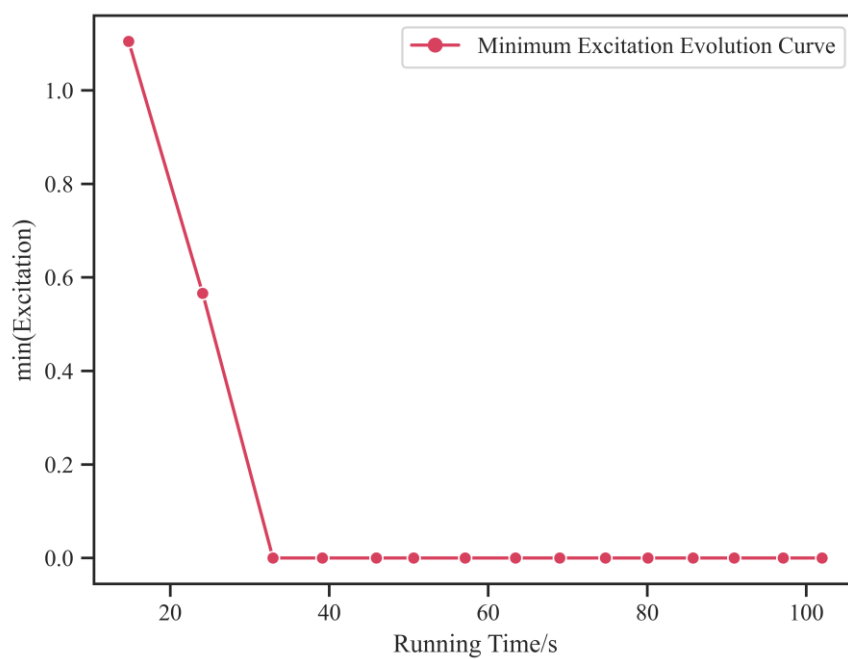


图 4-5 最小扰动度目标进化曲线

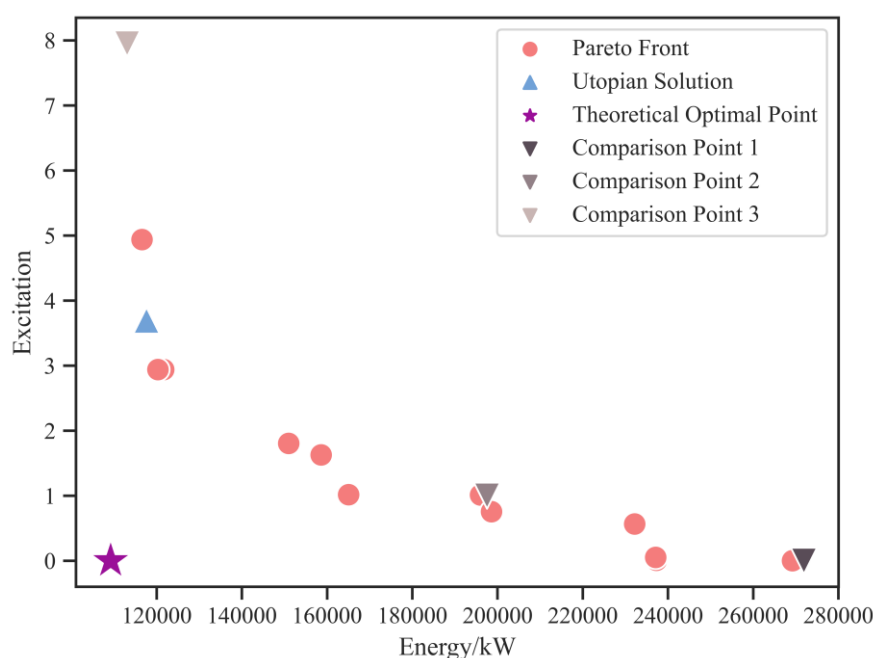


图 4-6 帕累托前沿

其中，乌托邦解是指距离理论最优点 $obj = (109206 \text{ kW}, 0)$ 的归一化欧式距离最小的点。归一化距离的经验计算公式(4-1)所示。

$$Distance_i = \sqrt{\left(\frac{Excitation_i - 0}{Excitation_{\max} - 0} \right)^2 + \left(8 \times \frac{Energy_i - 109206}{Energy_{\max} - 109206} \right)^2} \quad (4-1)$$

本文选取了乌托邦解及另外三个点作为比较进行分析，四个点的目标函数值及描述如表 4-3 所示。同时，为了验证算法及模型的优越性，本文将利用 Aspen Energy Analyzer 对换热网络进行设计，并与本文算法得到的结果进行比较。对比点 1 对应的扰动度为 0，能量目标为 271903.77kW，即全为公用工程换热。以该点作为一个参照，说明本算法可以搜索到扰动度最优的点，寻优能力较好。

表 4-3 分析点信息表

序号	描述	能量 /kW	扰动 度	不相关 子系统 个数	冷热流 股换热器 个数	最大不相关子系统		次大不相关子系统	
						流通股数	冷热流 股换热器 器数	流通股数	冷热流 股换热器 器数
1	乌托邦解	117617	3.69	13	4	3	2	2	1
2	对比点 1	271904	0.00	17	0	1	0	1	0
3	对比点 2	197534	1.00	15	2	2	1	2	1
4	对比点 3	113073	7.95	10	7	3	2	3	2
5	Aspen 结果	152490		10	7	8	7	1	0

乌托邦解的详细流股信息如表 4-4 所示，换热网络图像如图 4-7 所示。乌托邦解中共有 4 个冷热流股换热器，包含有 13 个不相关子系统，其中最大不相关子系统包含

有 3 条流股和 2 个冷热流股换热器，次大不相关子系统包含有 2 条流股和 1 个冷热流股换热器。

表 4-4 乌托邦解流股详细信息

换热器编号	连接的流股	进口温度/ $^{\circ}\text{C}$	出口温度/ $^{\circ}\text{C}$	热容流率/ $\text{kW}\cdot^{\circ}\text{C}^{-1}$	热负荷/ kW	公用工程用量/ kW	
E01	H1	242.00	43.00	196.70	39143.30		
	C1	43.00	205.06	241.54			
E02	H6	117.40	114.73	7637.50	20420.00		
	C6	109.20	109.26	359810.00			
E03	H2	72.00	70.64	983.07	1340.01		
	C2	40.00	61.00	63.81			
E04	H6	114.73	112.60	7637.50	16240.00		
	C3	73.00	73.80	20300.00			
EH1	C1	205.06	208.00	241.54	710.80	57813.73	
EH2	C4	74.30	89.00	81.90	1203.93		
EH3	C5	123.00	126.00	13090.00	39270.00		
EH4	C6	109.26	109.30	359810.00	15561.00		
EH5	C7	105.00	105.10	10680.00	1068.00		
EC1	H1	43.00	30.00	196.70	2557.10	59803.42	117617.15
EC2	H2	70.64	57.00	983.07	13406.04		
EC3	H3	57.00	54.00	28.33	84.99		
EC4	H4	125.00	102.00	52.35	1204.05		
EC5	H5	112.60	44.00	33.01	2264.49		
EC6	H7	68.00	53.00	2529.00	37935.00		
EC7	H8	51.00	31.00	27.65	553.00		
EC8	H9	69.00	49.00	56.30	1126.00		
EC9	H10	109.00	40.00	9.75	672.75		

对比点 2 的详细流股信息如表 4-5 所示，换热网络图像如图 4-8 所示。对比点 2 中共包含 1 个冷热流股换热器，共有 16 个不相关子系统，其中最大不相关子系统含有 2 条流股和 1 个冷热流股换热器，次大不相关子系统也含有 2 条流股和 1 个冷热流股换热器。

如 2.4 节中所分析，系统中冷热流股换热器数量越多，不相关子系统数量越少，单个不相关子系统内换热器数量越多，网络就越复杂，耦合性也就越强。相应的，换热网络抵抗参数波动的能力也就越弱，扰动度也就会越大。将乌托邦解与对比点 2 进行对比分析，可以看到是符合上述规律的。虽然对比点 2 扰动度小于乌托邦解，但其消耗的公用工程用量远高于乌托邦解，这是不可接受的。而乌托邦解虽然有 5 个换热器，但其互相之间解耦性较强，扰动度在可以接受的范围内，因此乌托邦解优于对比点 2。

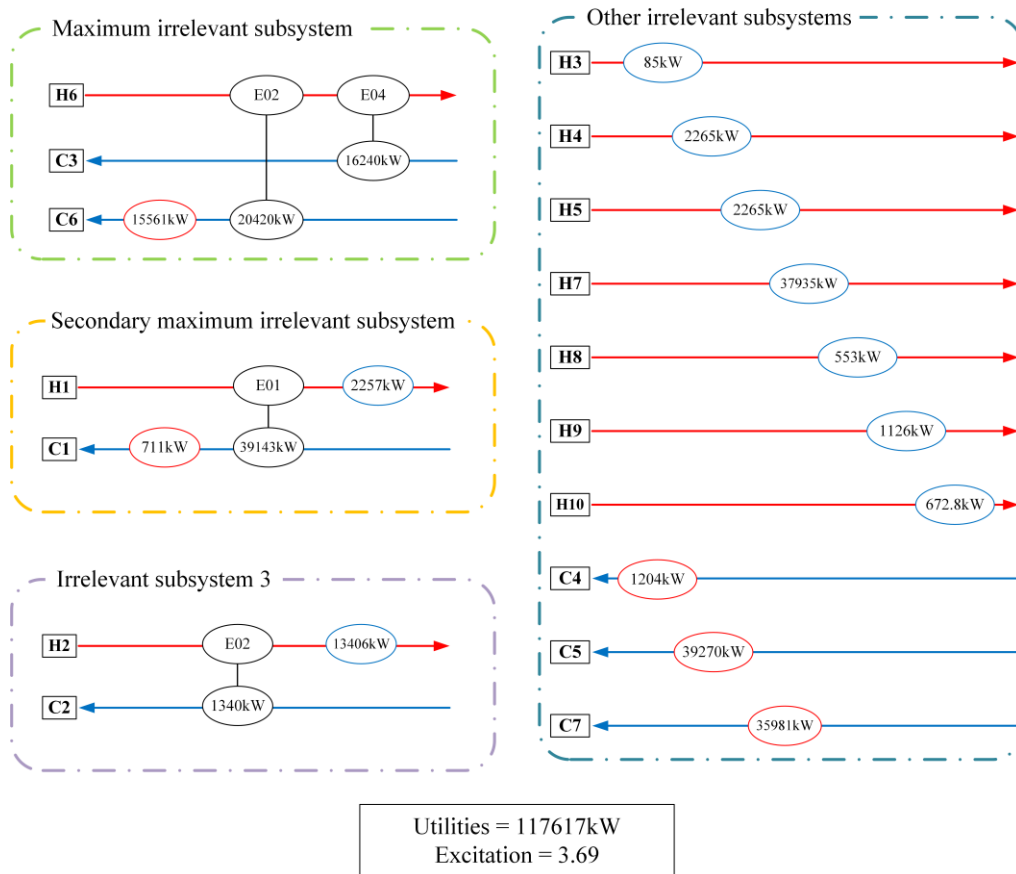


图 4-7 乌托邦解换热网络图像

表 4-5 对比点 2 详细流股信息

换热器编号	连接的流股	进口温度 /°C	出口温度 /°C	热容流率 /kW·°C ⁻¹	热负荷 /kW	公用工程用量/kW	
E01	H1	242.00	235.88	196.70	1203.80	97772.11	
	C4	74.30	89.00	81.90			
E02	H6	117.40	112.69	7637.50	35972.63		
	C6	109.20	109.30	359810.00			
EH1	C1	43.00	208.00	241.54	39854.10		
EH2	C2	40.00	61.00	63.81	1340.01		
EH3	C3	73.00	73.80	20300.00	16240.00		
EH4	C5	123.00	126.00	13090.00	39270.00		
EH5	C7	105.00	105.10	10680.00	1068.00		
EC1	H1	235.88	30.00	196.70	40496.47		
EC2	H2	72.00	57.00	983.07	14746.05		
EC3	H3	57.00	54.00	28.33	84.99		
EC4	H4	125.00	102.00	52.35	1204.05		
EC5	H5	112.60	44.00	33.01	2264.49		
EC6	H6	112.69	112.60	7637.50	679.00		
EC7	H7	68.00	53.00	2529.00	37935.00		
EC8	H8	51.00	31.00	27.65	553.00		
EC9	H9	69.00	49.00	56.30	1126.00		
EC10	H10	109.00	40.00	9.75	672.75	99761.80	197533.91

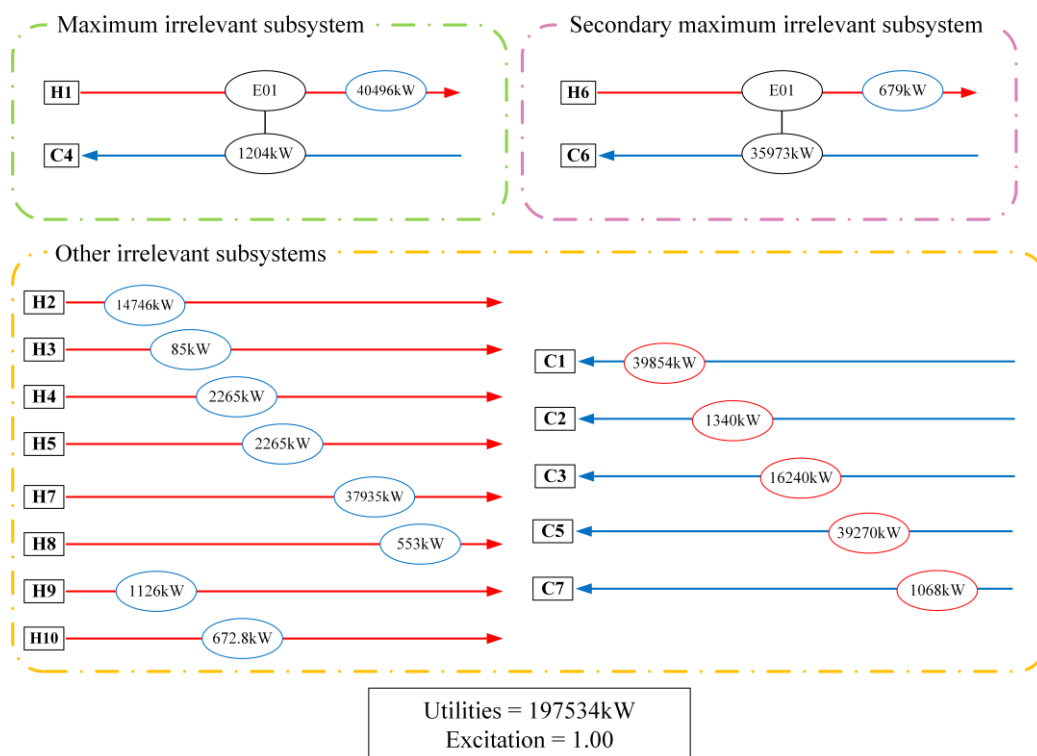


图 4-8 对比点 2 换热网络图像

对比点 3 的流股详细信息如表 4-6 所示, 换热网络图像如图 4-9 所示。对比点 3 中共有 7 个冷热流股换热器, 共有 10 个不相关子系统, 其中最大不相关子系统包含有 3 条流股和 2 个冷热流股换热器, 次大不相关子系统也包含有 3 条流股和 2 个冷热流股换热器。同理, 对比点 3 相较于乌托邦解有更多的冷热流股换热器及更少的不相关子系统, 这使换热器之间的耦合性大大加强, 因此对比点 3 的扰动度大于乌托邦解。但从能量目标考虑, 乌托邦解与对比点 3 相差不大。在扰动度可以接受的范围内, 乌托邦解要优于对比点 3。

表 4-6 对比点 3 的流股详细信息

换热器编号	连接的流股	进口温度/ $^{\circ}\text{C}$	出口温度/ $^{\circ}\text{C}$	热容流率/ $\text{kW}\cdot^{\circ}\text{C}^{-1}$	热负荷/ kW	公用工程用量/ kW
E01	H2	72.00	70.64	983.07	1340.01	
	C2	40.00	61.00	63.81		
E02	H1	242.00	43.00	196.70	39143.30	
	C1	43.00	205.06	241.54		
E03	H5	112.60	76.13	33.01	1203.93	
	C4	74.30	89.00	81.90		
E04	H6	117.40	115.27	7637.50	16240.00	
	C3	73.00	73.80	20300.00		
E05	H10	109.00	106.85	9.75	21.00	
	C7	105.10	105.10	10680.00		
E06	H6	115.27	112.60	7637.50	20420.00	
	C6	109.20	109.26	359810.00		

续表 4-6 对比点 3 的流股详细信息

换热器编号	连接的流股	进口温度 /°C	出口温度 /°C	热容流率 /kW·°C ⁻¹	热负荷 /kW	公用工程用量/kW	
E07	H4	125.00	105.00	52.35	1047.00	55541.80	
	C7	105.00	105.10	10680.00	1047.00		
EH1	C1	205.06	208.00	241.54	710.80		
EH2	C5	123.00	126.00	13090.00	39270.00		
EH3	C6	109.26	109.30	359810.00	15561.00		
EC1	H1	43.00	30.00	196.70	2557.10		
EC2	H2	70.64	57.00	983.07	13406.04		
EC3	H3	57.00	54.00	28.33	84.99		
EC4	H4	105.00	102.00	52.35	157.05		
EC5	H5	76.13	44.00	33.01	1060.56	57531.49	113073.29
EC6	H7	68.00	53.00	2529.00	37935.00		
EC7	H8	51.00	31.00	27.65	553.00		
EC8	H9	69.00	49.00	56.30	1126.00		
EC9	H10	106.85	40.00	9.75	651.75		

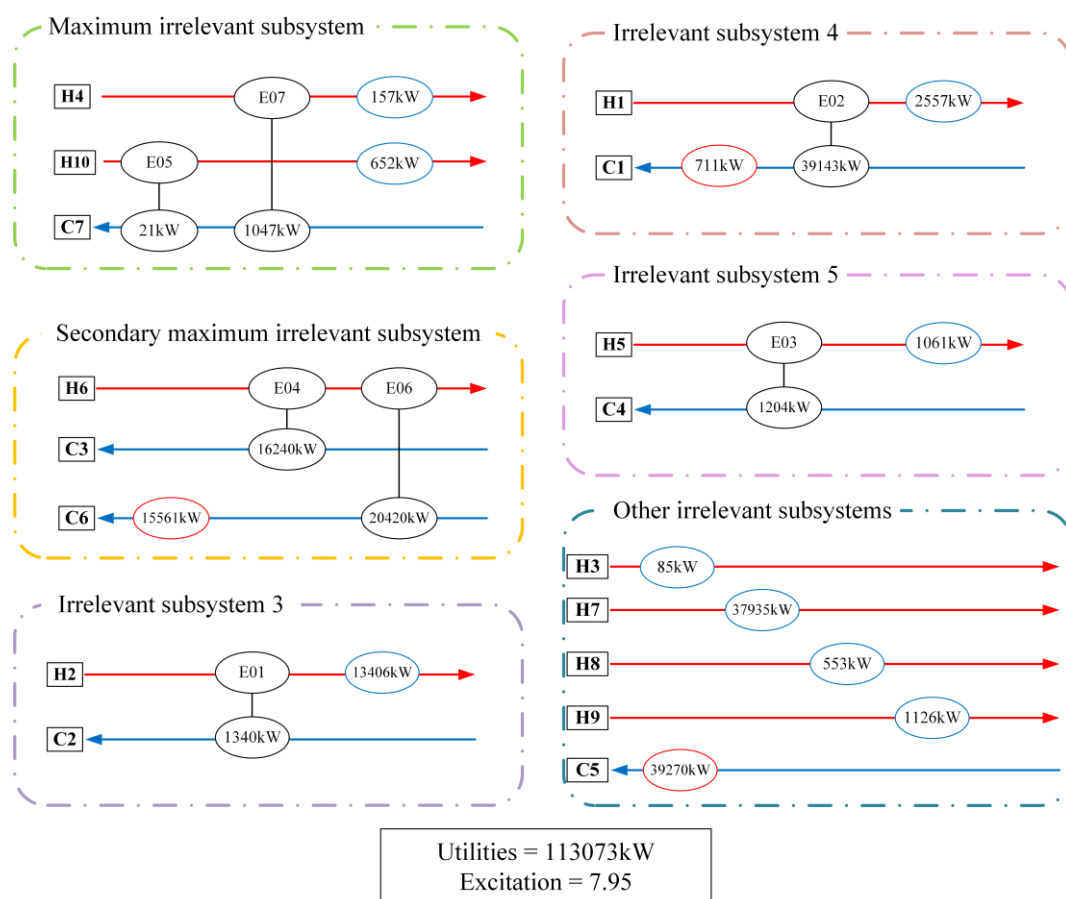


图 4-9 对比点 3 换热网络图像

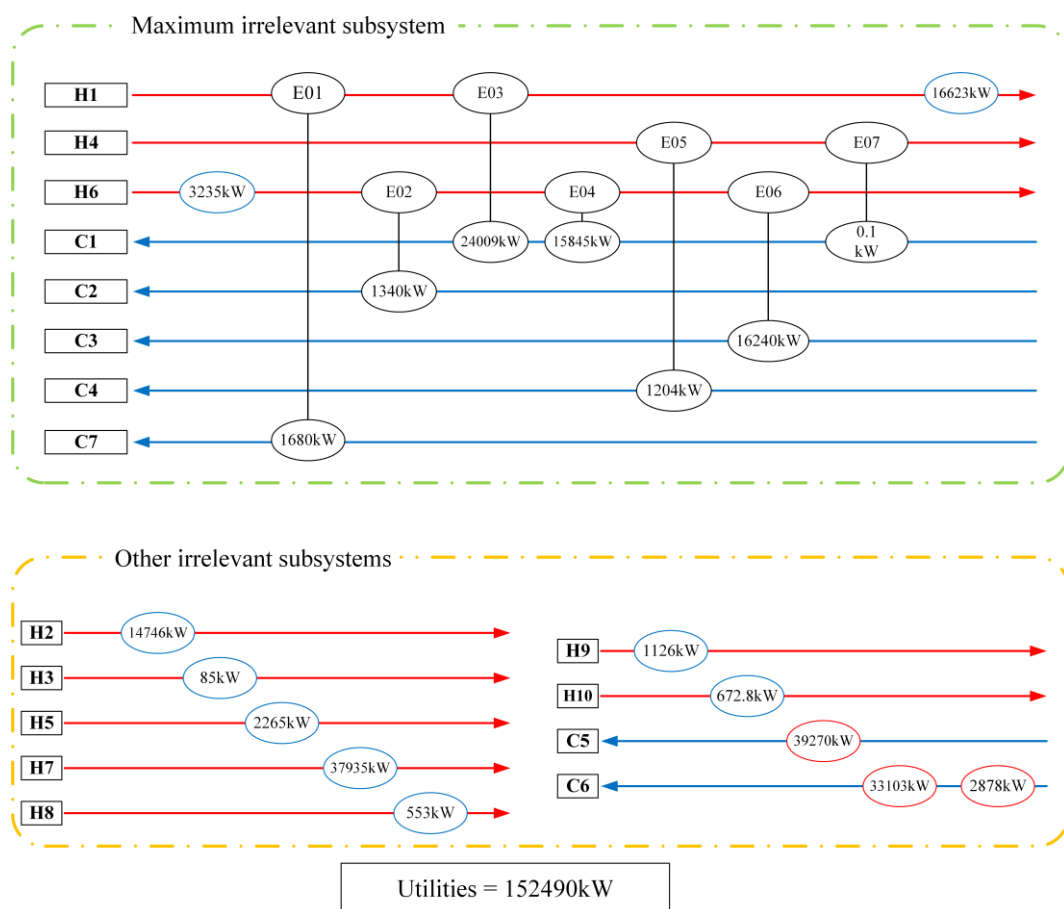


图 4-10 Aspen 求解结果换热网络图像

利用 Aspen Energy Analyzer 对换热网络进行设计的结果如图 4-10 所示。Aspen 所得结果共包含 7 个冷热流股换热器和 10 个不相关子系统。其中，最大不相关子系统包含 8 条流股和 7 个冷热流股换热器。因此，该结果换热器之间的耦合性比对比点 3 还要强，因此扰动度也一定大于对比点 3。此外，该结果的能量目标也大于对比点 3。因此，Aspen 设计结果全面劣于本文得到的对比点 3，自然也全面劣于本文得到的乌托邦解。

4.3 求解结果的经济性分析

为进一步说明乌托邦解的优越性，针对乌托邦解与对比点 3 进行经济性分析。

换热网络的总费用为：

$$COST_{total} = \sum_{i=1}^n COST_{investment,i} + \sum_{j=1}^m COST_{utility,j} \quad (4-2)$$

其中， $COST_{total}$ ——换热器年化总费用/元·年⁻¹； $COST_{investment}$ ——换热器的年化投资费用/元·年⁻¹； $COST_{utility}$ ——公用工程年操作费用/元·年⁻¹， n ——换热器个数， m ——公用工程换热器个数。

单个换热器的年化投资费用为：

$$COST_{investment,i} = \frac{\alpha Area_i}{Year} \quad (4-3)$$

其中, $COST_{fixed}$ ——换热器的固定费用/元; $Area$ ——换热器的换热面积/ m^2 ; α ——面积费用投资系数/元· m^2 ; $Year$ ——换热器折旧年限/年。

每个公用工程换热器的年操作费用为:

$$COST_{utility,j} = Hour \times \gamma Q_j \quad (4-4)$$

其中, $Hour$ ——换热器年运行时间/小时·年 $^{-1}$; Q ——公用工程用量/ kW , γ ——公用工程费用系数/元· kJ^{-1} 。

公用工程费用参数计算公式为:

$$\gamma = \frac{C}{C_p \times \Delta T} \quad (4-5)$$

其中, C ——介质费用/元· kg^{-1} ; C_p ——介质热容或潜热/ $kJ \cdot ^\circ C^{-1} \cdot kg^{-1}$, ΔT ——介质进出口温差/ $^\circ C$ 。

根据文献^[37]取换热器的总传热系数如表 4-7 所示。折旧年限取 20 年, 年操作时间取 8760 小时, 公用工程费用系数相关参数如表 4-8 所示。换热器投资费用按单位换热积消耗钢材 $200kg \cdot m^{-2}$, 钢材价格按 3 万元·吨 $^{-1}$ 计, 即 $\alpha=6000$ 元· m^{-2} , 乌托邦解和对比点 3 的费用明细一览表分别如表 4-9 及表 4-10 所示。

表 4-7 总传热系数数据表

总传热系数/ $kW \cdot ^\circ C^{-1} \cdot m^2$		
冷热流股换热器	冷公用工程换热器	热公用工程换热器
0.5	0.714	0.667

表 4-8 公用工程费用系数相关参数表

介质名称	费用/元· kg^{-1}	热容或潜热/ $kJ \cdot ^\circ C^{-1} \cdot kg^{-1}$	进出口温差/ $^\circ C$
20 $^\circ C$ 冷却水	1.668×10^{-4}	4.183	10
2MPa 蒸汽	9.174×10^{-2}	1902.1	1

表 4-9 乌托邦解费用明细

换热器编号	热负荷/ kW	换热面积/ m^2	换热器投资费用/万元	公用工程操作费用/万元
E01	39143.30	17408.26	104449568.22	
E02	20420.00	6040.89	36245322.45	
E03	1340.01	139.72	838302.28	
E04	16240.00	806.57	4839390.41	
EH1	710.80	370.96	2225760.10	
EH2	1203.93	14.13	84782.84	727.02
EH3	39270.00	692.60	4155624.85	

4 煤制甲醇工艺节能优化分析

续表 4-9 乌托邦解费用明细

换热器编号	热负荷/kW	换热面积/m ²	换热器投资费用/万元	公用工程操作费用/万元
EH4	15561.00	232.76	1396565.95	
EH5	1068.00	15.33	91970.67	
EC1	2557.10	311.68	1870105.21	
EC2	13406.04	483.31	2899874.66	
EC3	84.99	3.91	23470.52	
EC4	1204.05	19.08	114460.00	
EC5	2264.49	66.83	400967.04	9096.16
EC6	37935.00	1496.67	8980023.27	
EC7	553.00	49.92	299501.98	
EC8	1126.00	46.65	279872.31	
EC9	672.75	21.92	131491.55	
年化单项合计/ 万元·年 ⁻¹			16932.71	9823.18
年化总合计/ 万元·年 ⁻¹			26755.88	

表 4-10 对比点 3 费用明细

换热器编号	热负荷/kW	换热面积/m ²	换热器投资费用/万元	公用工程操作费用/万元
E01	1340.01	139.72	838302.28	
E02	39143.30	17408.26	104449568.22	
E03	1203.93	282.33	1693987.06	
E04	16240.00	756.34	4538065.21	
E05	21.00	15.60	93602.64	
E06	20420.00	8888.08	53328492.41	
E07	1047.00	799.27	4795622.31	
EH1	710.80	370.96	2225760.10	
EH2	39270.00	692.60	4155624.85	698.45
EH3	15561.00	232.76	1396565.95	
EC1	2557.10	311.68	1870105.21	
EC2	13406.04	483.31	2899874.66	
EC3	84.99	3.91	23470.52	
EC4	157.05	2.80	16810.05	
EC5	1060.56	43.79	262751.77	8750.60
EC6	37935.00	1496.67	8980023.27	
EC7	553.00	49.92	299501.98	
EC8	1126.00	46.65	279872.31	
EC9	651.75	21.59	129550.31	
年化单项合计/ 万元·年 ⁻¹			19227.76	9449.04
年化总合计/ 万元·年 ⁻¹			28676.80	

通过经济性分析得到乌托邦解的年化费用为 26755.88 万元·年⁻¹，而对比点 3 的年化费用为 28676.80 万元·年⁻¹，虽然对比点 3 相较于乌托邦解所需的公用工程用量较少，但在考虑投资费用的条件下其经济性不如乌托邦解。

4.4 煤制甲醇工艺环境分析

由于环境影响指标具有复杂性和全局性，其可操作性与复杂性存在同增减关系，即指标体系越复杂，评价的标准性和实用性越高^[38]，在已有研究的基础上，项目考虑了 7 种环境评价影响。

计算各个环境性能指标的量化值，其计算公式为^[38]：

$$I_j = \sum_i \varphi_{i,j} \cdot m_i \quad (4-6)$$

式中， $\varphi_{i,j}$ ——第 i 个化合物的第 j 类影响潜值，计算公式如表 4-11 所示； m_i ——第 i 个化合物的排放量/kg·h⁻¹； I_j ——第 j 类影响的影响潜值； j 包括温室效应、臭氧层损耗、酸化、人体摄入毒性、水生态毒性、陆生态毒性、水体富营养化。

表 4-11 各环境性能指标量化值计算公式表

性能指标	计算公式	注
温室气体	IPCC 定义的温室效应计算方法 ^[40]	
臭氧层损耗 ^[41]	$DOP = \frac{\text{单位质量目标物质引起的臭氧层损耗}}{\text{单位质量CFC-11引起的臭氧层损耗}}$	(4-7) CFC-11 为 CCl ₃ F
酸化 ^[42]	$AP_x = \frac{\alpha}{2} \times \frac{MW_{SO_2}}{MW_x}$	(4-8) x——化合物， α ——1mol 的 x 分解生成氢离子量，MW——分子量
人体摄入毒性 ^[43]	$HTPI_x = \frac{1}{(LD_{50})_x}$	(4-9) x——化合物， LD_{50} ——鼠类摄入半致死量/mg·kg ⁻¹
水生态毒性 ^[43]	$ATP_x = \frac{1}{(LC_{50})_x}$	(4-10) x——化合物， LC_{50} ——鱼类摄入半致死浓度/mg·m ⁻³
陆生态毒性 ^[43]	$TTP_x = \frac{1}{(LD_{50})_x}$	(4-11) x——化合物， LD_{50} 为鼠类摄入半致死量/mg·kg ⁻¹
水体富营养化 ^[44]	$EP_x = 0.022ThOD_x \text{ or } n_N \times \frac{MW_{PO_4^{3-}}}{16MW_x} \text{ or } n_P \times \frac{MW_{PO_4^{3-}}}{MW_x}$	(4-12) x——化合物， $ThOD_x$ ——理论需氧量，MW——分子量，n——化合物中某元素个数

环境性能指数 $EPI^{[38]}$:

$$EPI = \sum_j I_j \cdot w_j \quad (4-13)$$

式中, I_j ——第 j 类影响的影响潜值, w_j ——第 j 种影响潜值的相对重要性权值; 参考美国环境保护局科学咨询专家组研究成果^[39]为本文的相对重要性赋权, 见表 4-12。

表 4-12 环境影响指标相对重要性权值表

子指标		相对重要性权重
高风险指标	温室效应、臭氧层损耗、人体摄入毒性、水生态毒性、陆生态毒性	3
中等风险指标	酸化、水体富营养化	1

表 4-13 煤制甲醇系统环境影响潜值表

物质	流量 /kg·h ⁻¹	温室 气体	臭氧 层损 耗	酸 化	人体 摄入 毒性	陆生 态毒 性	水生 态毒 性	水体 富营 养化
能量排 放因子 /kg· kW ⁻¹ ·h ⁻¹	CO ₂ : 8.63×10 ⁻⁴	98.85	1	0	1.45	0	0	0
	SO ₂ : 8.13×10 ⁻⁶	0.93	0.75	0	1	1.52 ×10 ⁻⁴	1.52 ×10 ⁻⁴	1.52 ×10 ⁻⁴
	NO ₂ : 3.96×10 ⁻⁶	0.45	1.01	0.94	0.65	7.94 ×10 ⁻³	7.94 ×10 ⁻³	7.94 ×10 ⁻³
	CO	4.56	1.07	0	0	4.83 ×10 ⁻⁴	4.83 ×10 ⁻⁴	0
	H ₂	0.21	8.77	0	0	0	0	0
	CO ₂	88.47	1	0	1.45	0	0	0
	H ₂ O	1.57×10 ⁵	2.12	0	0	0	0	0
灰水槽 及放空	H ₂ S	2.06	0.92	0	1.88	1.54 ×10 ⁻³	1.54 ×10 ⁻³	1.54 ×10 ⁻³
	NH ₃	3.27	2.56	0	0	5.00 ×10 ⁻⁴	5.00 ×10 ⁻⁴	5.00 ×10 ⁻⁴
	HCl	50.25	5.07	1.26	0.88	2.13 ×10 ⁻⁴	2.13 ×10 ⁻⁴	2.13 ×10 ⁻⁴
	COS	1.60	0.83	0	0	4.41 ×10 ⁻⁴	4.41 ×10 ⁻⁴	0

针对煤制甲醇工艺流程, 本文同时考虑其灰水槽排污、除氧器放空及能量排放对

环境造成的影响，详细数据如表 4-13 所示，综合评价得到环境影响指数为 1902.35。该方法可以横向对比同一工艺不同流程下的环境影响大小。

4.5 本章小结

本章首先介绍了煤制甲醇工艺在国民经济中的重要性，提取了甲醇合成工段与甲醇精馏工段的流股信息；针对甲醇合成工段与甲醇精馏工段，以扰动度及公用工程用量最小为目标进行多目标优化，通过分析不相关子系统数与扰动度之间的关系及年化投资费用分析，证明所得乌托邦解具有较好的解耦性与经济性；针对煤制甲醇工艺流程建立了环境性分析模型。

5 换热网络扰动分析平台

5.1 化工流程模拟软件的市场分析

在中美竞争愈发激烈的时代背景下，掌握科技的自主权，防止关键技术被“卡脖子”对国家发展和国防安全至关重要的。当前化工流程模拟软件基本被国外大型公司所垄断。此外，在中国制造 2025 的大背景下，传统工业向数字化、信息化转型、工业与互联网的深度融合成为大势所趋，工业软件以及信息化服务的需求持续增加；2016-2021 年中国工业软件市场保持持续增长态势^[45]，工业软件产值占行业 GDP 比重如图 5-1 所示。据资料显示，2021 年我国工业软件产品收入完成 2414 亿元，同比 2020 年增长 22.29%^[45]，市场潜力巨大，工业软件市场规模及同比增长如图 5-2 所示。

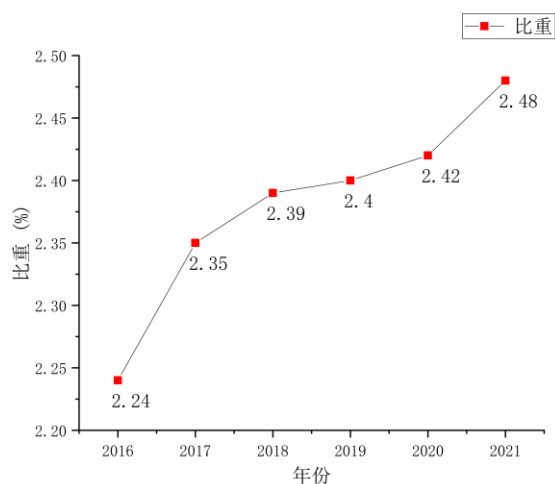


图 5-1 工业软件产值占 GDP 比重

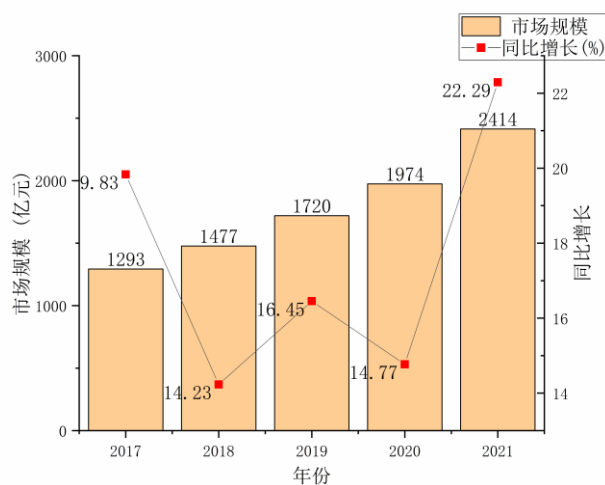


图 5-2 工业软件市场规模及同比增长

现有化工系统能量集成软件有 Aspen Energy Analyzer、Simsci PRO/II、Pinch 等等，

但都仅针对换热网络进行分析和优化，不能考虑不确定参数波动对系统集成造成的影响。本文基于 Zhao 等^[20]建立的换热网络负荷迁移机理开发了专用的分析软件，将夹点分析、不合理换热分析、负荷迁移分析以及换热网络设计集成于同一软件，助力化工生产系统的用能分析及优化。

5.2 换热网络扰动分析平台的开发

本文针对第 4 章中介绍的化工系统进行软件设计，基于 PyQt5 框架开发运行于 Windows64 位操作系统的.exe 程序，在 Pycharm 集成开发环境利用 Python3.7 进行编写。软件开发的技术路线图如图 5-3 所示。

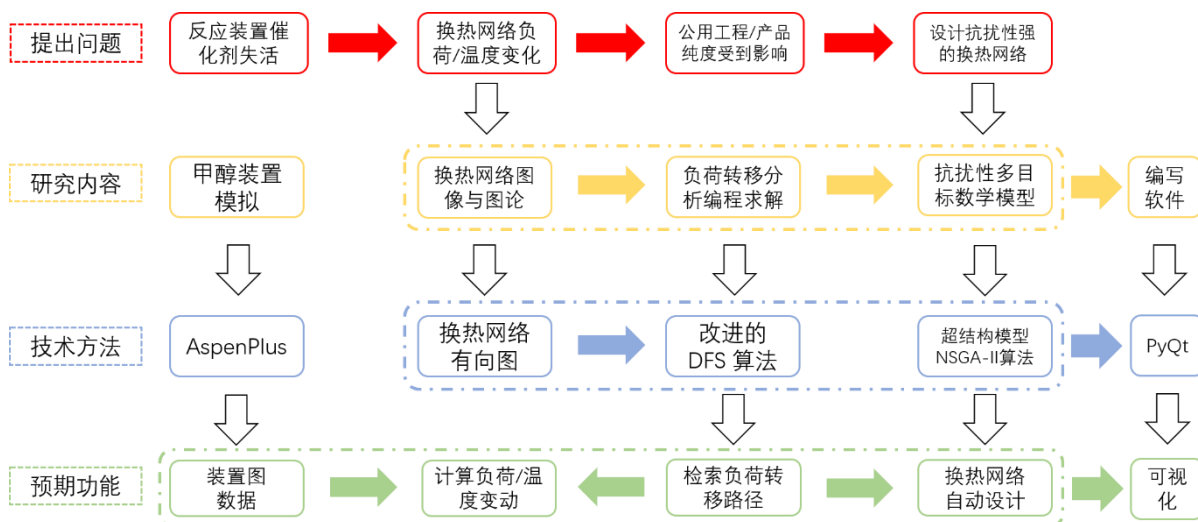


图 5-3 软件开发技术路线图

5.2.1 软件介绍页面

软件介绍界面如图 5-4 所示。主体文本框选用 QTextEdit 控件，内部显示文字及格式设置采用 HTML 语言编写，背景设置为企业 Logo。本界面阐明本软件是为盈德气体荆门工厂煤制甲醇装置的合成工段及精馏工段所开发的专用软件，主要实现夹点分析、不合理换热分析、负荷迁移分析以及换热网络设计四个功能，并针对四个功能的具体实现及意义做了详细的说明

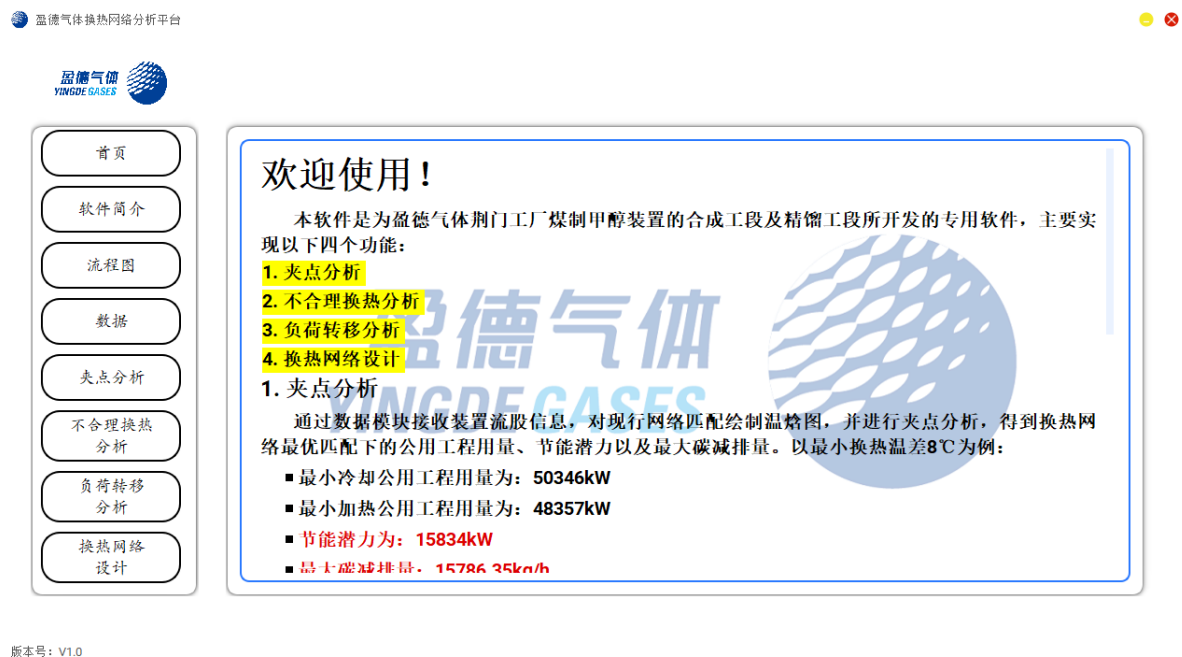


图 5-4 软件介绍界面

5.2.2 企业装置流程图页面

企业装置流程图页面如图 5-5 至图 5-8 所示。图片容器选用 QLabel 控件，图片之间切换按钮选用 QPushButton 控件，槽函数为自定义函数，通过 fig.show()\fig.hide() 函数实现图片之间的切换。

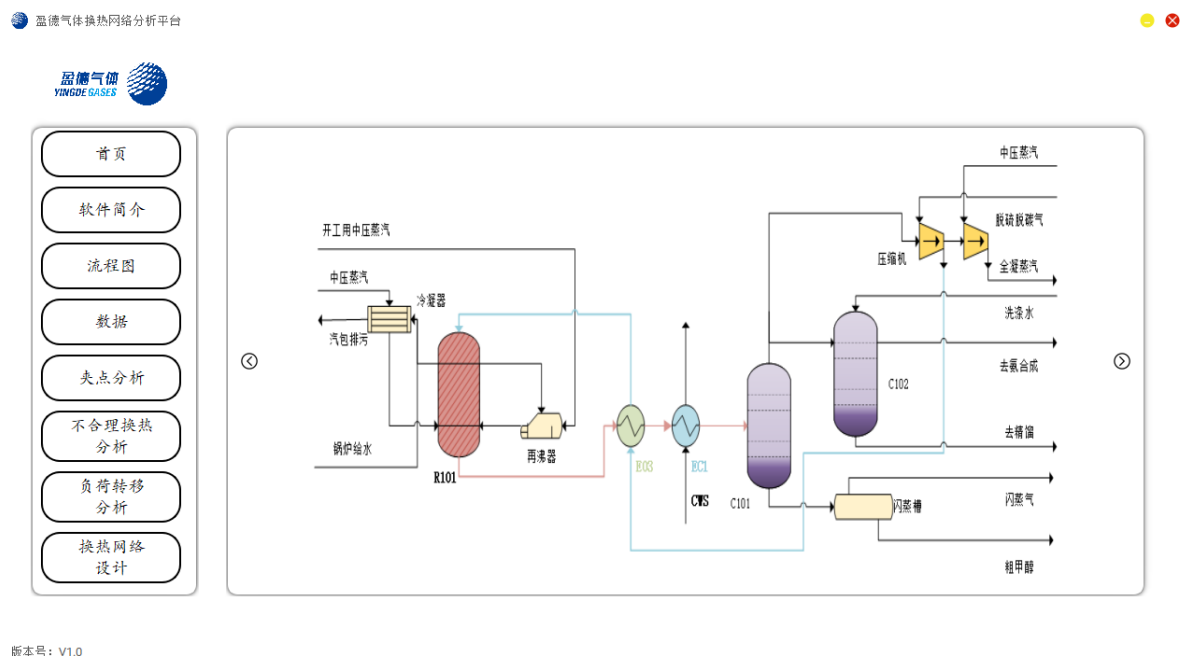
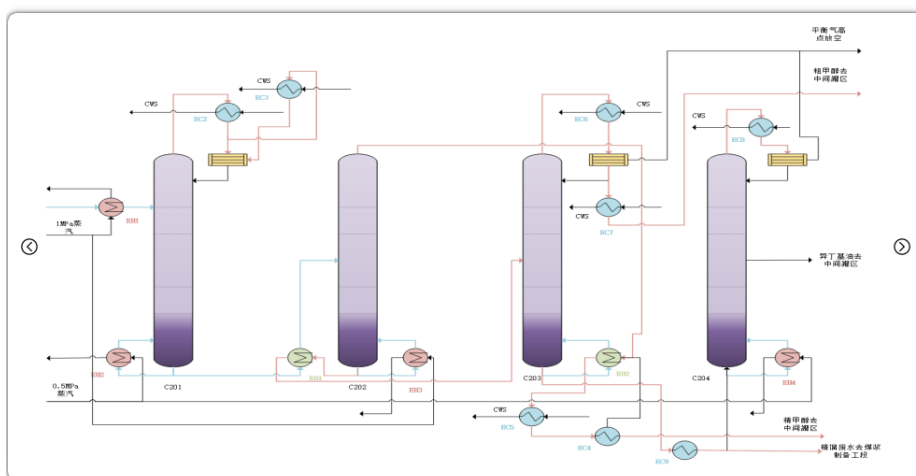


图 5-5 甲醇合成装置流程图页面



版本号: V1.0

图 5-6 甲醇精馏装置流程图页面



版本号: V1.0

图 5-7 现行换热网络页面

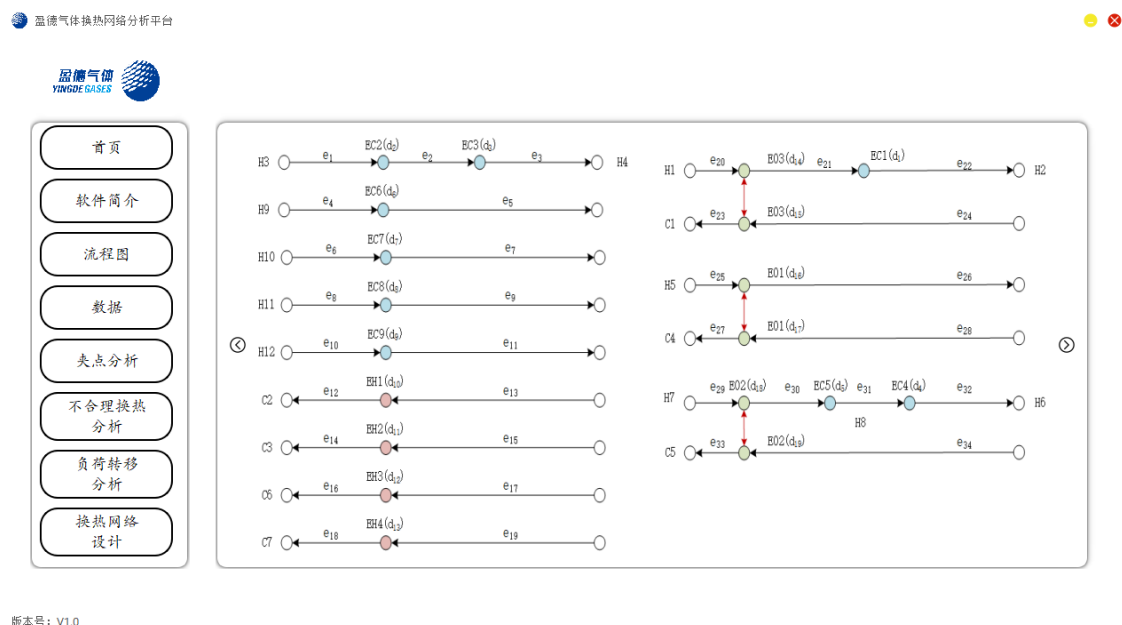


图 5-8 现行换热网络有向图页面

5.2.3 数据模块

	流股编号	流股描述	换热器编号	进口温度/℃	出口温度/℃	流量/(KG/H)	平均热容流率
1	H1	反应器R101出料	E03	242	102	279623	284.67
2	H2	换热器E01出料	EC1	102	30	279623	25.64
3	H3	精馏C201塔顶出料	EC2	72	57	47000	983.07
4	H4	EH2出料	EC3	57	54	2480	28.33
5	H5	加压塔C202塔釜出料	E01	125	102	41978	52.35
6	H6	精甲醇	EC4	112.6	44	34800	33.01
7	H7	加压塔C202塔顶出料	E02	117.4	117.3	133000	359810
8	H8	E02出料	EC5	117.3	112.6	133000	144.47
9	H9	常压塔C203塔顶出料	EC6	68	53	119517	2529

版本号: V1.0

图 5-9 数据模块页面

数据模块页面如图 5-9 所示，内置数据来源见表 4-1。整个数据表选用继承自 QTableView 类的 QTableWidgetItem 控件，每个单元格选用的是 QTableWidgetItem 对象作为数据的容器，数据格式为字符串。首先构建一个储存有表头信息的字典，如：内容、宽度等，通过 for 函数对 QTableWidgetItem 设置索引从而设置表头内容。其次，通过 read() 函数读取内置的 json 文件，先对 QTableWidgetItem 对象设置内容，再将 QTableWidgetItem 添加至 QTableWidgetItem 控件内，从而实现表格数据的展示。

通过 QPushButton 控件实现上传、保存数据文件、清空数据、恢复数据以及添加

数据的按钮功能。同时，如果用户直接在表格中更改数据也是被允许的，此时通过 `cellChanged.connect()` 函数连接槽函数，设置背景变红，提示用户原数据有修改。以上控件的槽函数均为自定义函数。

5.2.4 夹点分析模块

夹点分析模块页面如图 5-10 及图 5-11 所示。图 5-10 及图 5-11 左侧分别展示的是夹点温差为 8°C 时的冷热复合曲线图及总组合曲线图，右侧展示的为当前换热网络的流股匹配情况图。分析结果为：夹点问题，冷却公用工程用量为 50346kW ，加热公用工程用量为 48357kW ，节能潜力为 15834kW ，预计减少碳排放： $4783.41\text{kg}\cdot\text{h}^{-1}$ ，夹点温度为 68.0°C ，夹点温差为 8.0°C 。

本文夹点分析是根据 Linnhoff 等^[8]于 1983 年提出的问题表法进行计算求解。利用问题表法进行夹点分析的具体步骤如下：

Step 1. 划分温度区间，计算各个温度区间内的热通量赤字，并计算每个温区输入及输出的热通量；

Step 2. 根据最大负热通量赤字确定外界输入的最小热量及夹点位置；

Step 3. 分别计算冷热流股在各个温区的热通量赤字，并绘制冷热复合曲线；

Step 4. 根据外界输入最小热量后的各温区输入热通量绘制总组合曲线。

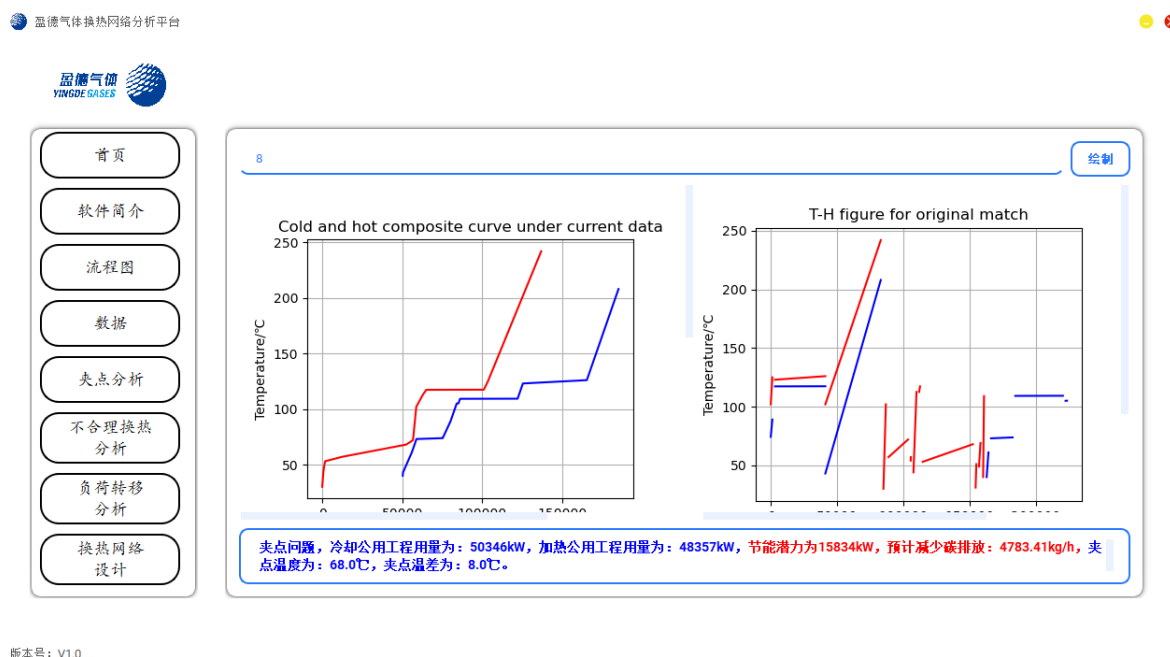


图 5-10 夹点分析模块冷热负荷曲线图

夹点温差的输入通过可编辑的 `QLineEdit` 控件实现，绘制按钮同样是 `QPushButton` 控件连接自定义槽函数。文字输出通过不可编辑的 `QTextEdit` 控件实现。复合曲线的图像通过 `QGraphicsView` 类实现窗口功能，`MyFigureCanvas` 对象实现容器功能，具体绘图采用 `matplotlib` 库进行绘制。

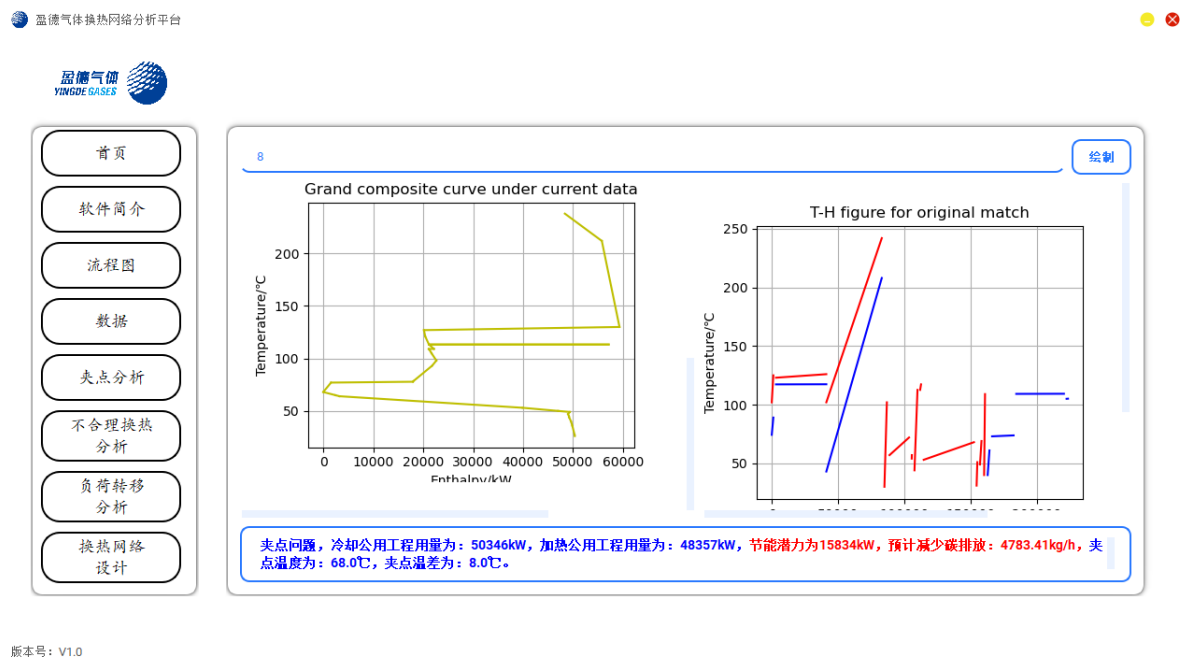


图 5-11 夹点分析模块总复合曲线图

5.2.5 不合理换热模块

不合理换热分析模块页面如图 5-12 所示, 主要检索当前换热网络在夹点之上的冷却公用工程、夹点之下的加热公用工程以及跨越夹点的冷热流股换热器。查找按钮为 QPushButton 控件连接自定义槽函数。文字输出通过不可编辑的 QTextEdit 控件实现。



图 5-12 不合理换热分析页面

在夹点温度为 68.0℃、夹点温差为 8.0℃的条件下对流通股进行不合理换热分析得到: 跨越夹点换热的换热器为 E03; 夹点之上的冷却器有 EC1、EC4 及 EC5; 夹点之下的

加热器为 EH1。

5.2.6 负荷转移分析模块

Zhao 等^[22]于 2022 年提出了负荷迁移理论，并给出了相应的计算公式。本文根据 Zhao 等所建立的模型开发了负荷转移分析模块。当流股产生参数波动时，用户在数据界面更改相应参数，如图 5-13 所示。在负荷转移分析页面选择相应的分析方法并计算求解，得到当前负荷迁移路径及相应负荷或温度变化，如图 5-14 所示。同时，数据页面会自动更新发生变化的数据，如图 5-15 所示。



图 5-13 数据页面更改相应参数



图 5-14 负荷转移分析页面及结果



图 5-15 数据页面自动更新相应参数

检索按钮为 QPushButton 控件连接自定义槽函数，槽函数内嵌套槽函数用以更新相应的流股参数。文字输出通过不可编辑的 QTextEdit 控件实现。

当 H1 流股入口温度由 242℃降低为 240℃时，选择 KHE 热负荷不变，检测到 H1 进口温度发生变化，所有可能负荷转移路径为：E03→EC1(负荷由 1846kW 变为 2415.34kW)，H1 出口温度和 H2 入口温度由 102℃变为 100℃。

5.2.7 换热网络设计模块

换热网络设计模块采用随机生成换热网络结构及最大能量匹配策略进行能量和温度的分配计算，输出条件为公用工程用量小于当前换热温度公用工程用量。输出内容为生成可行解数量、最小公用工程用量、加热公用工程用量、冷却公用工程用量及求解耗时。换热网络设计页面如图 5-16 所示，换热网络图像及数据页面如图 5-17 所示。

求解按钮为 QPushButton 控件连接自定义槽函数，查看按钮连接子窗口。文字输出通过不可编辑的 QTextEdit 控件实现。换热网络图像通过自定义 QPainter 类实现绘制，数据容器为 QWidget 控件。



图 5-16 换热网络设计页面



图 5-17 换热网络图像及数据页面

5.2.8 软件的打包与发布

利用 pyinstaller 库进行打包与发布。具体命令为：“pyinstaller.exe --path C:\Users\zzx\anaconda3\Lib\site-packages\PyQt5\Qt5\bin -Dw -i logo.ico GUI_Design_for_Pinch.py -n 盈德气体换热网络分析平台”。所有图片及数据全部包括在已打包的文件内，可以在无 python 编译环境的 Windows64 位操作系统上运行。

本文开发的软件为完全国产自研的工业软件，综合考虑换热网络的拓扑结构及用能瓶颈，提出考虑流股参数波动的耐热网络综合方法，基于数学规划法可保证该软件设计结果的准确性，并被证明效果优于 Aspen Plus。

5.3 本章小结

本章针对化工系统高能耗、强耦合的特点，基于 PyQt5 开发一款企业专用换热网络扰动分析平台，对工厂换热网络进行能量集成，以降低公用工程用量。主要模块有：软件介绍模块、流程图展示模块、数据模块、夹点分析模块、不合理换热模块、负荷转移分析模块以及换热网络设计模块。该软件能提高工厂信息化程度，为工程师进行能量分析提供便利，提高工厂效益。

6 结论与展望

6.1 结论

本文主要针对流股不确定参数发生波动时可能造成换热器负荷及温度变化的问题，从换热网络综合的角度提出抵抗参数波动能力强的换热网络数学模型，并发展了相关基础理论。同时，为企业设计了一款换热网络扰动分析平台，用以提高化工生产的用能质量及信息化水平。主要结论如下：

- 1) 将换热网络与图论结合进行换热网络的有向图转换，并分析了其矩阵表达形式、参数波动的可达性以及不相关子系统，为后续算法设计及结果分析提供了理论基础。
- 2) 基于波动传递路径及换热网络全局灵敏度定义了评价换热网络抵抗参数波动能力强弱的扰动度模型，完善了换热网络的扰动传递理论；基于 DFS 算法^[31]设计了扰动度求解算法；基于 Grossmann 等^[12]提出的超结构模型，建立了以扰动度与公用工程用量为目标的换热网络多目标优化同步综合数学模型。
- 3) 利用改进的 NSGA-II 算法进行求解换热网络多目标优化同步综合数学模型，并基于 Python3.7 编写程序优化甲醇合成装置的换热网络，求解时间为 101.97s，得到乌托邦解的公用工程用量为 117617.15kW，扰动度为 3.69，年化费用为 26755.88 万元·年⁻¹。乌托邦解具有较低的公用工程用量与较强的解耦性，在考虑投资费用的条件下具有经济优势，优化结果全面优于 Aspen Energy Analyzer 的求解结果。
- 4) 基于以上成果，针对企业具体生产过程开发了一款专用软件，可以进行夹点分析、不合理换热分析、负荷迁移分析以及换热网络自动设计功能。

6.2 展望

本文在考虑参数波动的换热网络优化及甲醇合成装置的软件开发方面取得了一定进展，但还有不足与需要更深入研究之处：

- 1) 本文所建立的超结构模型没有考虑流股分流与非等温混合，这与实际生产过程有一定差异，可以进行更深入的研究；
- 2) 本文所建立的模型同样可以适用于功交换网络或质量交换网络，可以在后续研究中进一步发展相关理论；
- 3) 本文中仅考虑换热网络的扰动度，下一步工作可以从耦合反应分离系统的角度开展；
- 4) 基于改进的 NSGA-II 算法求解的效率不够高，下一步可以改进算法，或者采用效率更高，寻优能力更强的算法；

- 5) 基于 PyQt5 框架开发的软件打包了所有已声明的库，使得开发的软件体积臃肿，后续开发过程中需注意缩减；
- 6) 因为软件计算需要一定时间，而在开发过程中又没有使用到多线程，如果软件计算过程中再次对软件进行操作可能使软件崩溃，后续开发过程中需注意。

致 谢

致谢：对于毕业设计（论文）的指导教师，对毕业设计（论文）提过有益的建议或给予过帮助的同学、同事与集体，都应在论文的结尾部分书面致谢，言辞应恳切、实事求是。

参考文献

- [1] 华西证券. 2022 年化工行业分析新经济下化工行业空间广阔优势显著[EB]//未来智库.(2022-07-19).
- [2] 王海成. 从国家战略高度重视国产工业软件产业高质量发展[J]. 中国发展观察, 2021(14): 13-18.
- [3] 人民日报. 当“中国制造 2025”遇上德国“工业 4.0”[EB]//中华人民共和国人民政府网.(2016-06-15).
- [4] 宋倩倩, 慕彦君, 侯雨璇, 等. 中美两国石油化工产业实力对比分析[J]. 化工进展, 2020, 39(5): 1607-1619.
- [5] 隆云滔, 黄婷婷, 罗训. 国产工业软件如何突围[J]. 小康, 2021(12): 22-23.
- [6] 高立兵;吕中原;索寒生;刘晓遇; 石油化工流程模拟软件现状与发展趋势[J]. 化工进展, 2021(S2 vo 40): 1-14.
- [7] 杨路. 煤化工系统中能量系统集成技术与工业实例研究[D]. 华南理工大学, 2021.
- [8] Linnhoff B, Hindmarsh E. The pinch design method for heat exchanger networks[J]. Chemical Engineering Science, 1983, 38(5): 745-763.
- [9] Papoulias S A, Grossmann I E. A structural optimization approach in process synthesis—II[J]. Computers & Chemical Engineering, 1983, 7(6): 707-721.
- [10] Floudas C A, Ciric A R, Grossmann I E. Automatic synthesis of optimum heat exchanger network configurations[J]. AIChE Journal, 1986, 32(2): 276-290.
- [11] Yee T F, Grossmann I E, Kravanja Z. Simultaneous optimization models for heat integration—I. Area and energy targeting and modeling of multi-stream exchangers[J]. Computers & Chemical Engineering, 1990, 14(10): 1151-1164.
- [12] Yee T F, Grossmann I E. Simultaneous optimization models for heat integration—II. Heat exchanger network synthesis[J]. Computers & Chemical Engineering, 1990, 14(10): 1165-1184..
- [13] Yee T F, Grossmann I E, Kravanja Z. Simultaneous optimization models for heat integration—III. Process and heat exchanger network optimization[J]. Computers & Chemical Engineering, 1990, 14(11): 1185-1200.
- [14] Tian X, Yin C, Lv D, et al. Effect of Catalyst Deactivation on the Energy Consumption of Gasoline – Diesel Hydrotreating Process[J]. Energy & Fuels, 2018, 32(10): 10879-10890.
- [15] Zhang D, Liu G, Li Y. Graphical optimization method for coupled heat exchanger network and reactor[J]. Energy, 2018, 156: 635-646.
- [16] Ryu J, Kong L, Pastore De Lima A E, et al. A generalized superstructure-based framework for process synthesis[J]. Computers & Chemical Engineering, 2020, 133: 106653.
- [17] Babaqi B S, Takriff M S, Othman N T A, et al. Yield and energy optimization of the continuous catalytic regeneration reforming process based particle swarm optimization[J]. Energy, 2020, 206: 118098.
- [18] Zhang D, Lv D, Yin C, et al. Combined pinch and mathematical programming method for coupling integration of reactor and threshold heat exchanger network[J]. Energy, 2020, 205: 118070.
- [19] Yin C, Sun H, Lv D, et al. Integrated design and optimization of reactor-distillation sequence-recycle-heat exchanger network[J]. Energy, 2022, 238: 121796.
- [20] Zhao L, Liu G. Optimization of the catalyst service life based on the coupling of reactor and heat exchanger network[J]. Chemical Engineering Science, 2022, 259: 117822.
- [21] Zhao L, Liu G. Dynamic coupling of reactor and heat exchanger network considering catalyst deactivation[J]. Energy, 2022, 260: 125161.
- [22] Zhao L, Liu G. Study on the Load-Shift of Heat Exchanger Network with Stream

- Variation[C]//Proceedings of the 24th Conference on Process Integration, Modelling and Optimisation for Energy Saving and Pollution Reduction. Brno, CZ, 2022.
- [23] 秦导, 王健红. 管道网络拓扑模型与分析计算[C]. 中国系统工程学会过程系统工程专业委员会, 2001: 135-141.
- [24] Shivakumar K, Narasimhan S. A robust and efficient NLP formulation using graph theoretic principles for synthesis of heat exchanger networks[J]. COMPUTERS & CHEMICAL ENGINEERING, 2002, 26(11): 1517-1532.
- [25] Zhu J, Han Z, Rao M, et al. Identification of heat load loops and downstream paths in heat exchanger networks[J]. CANADIAN JOURNAL OF CHEMICAL ENGINEERING, 1996, 74(6): 876-882.
- [26] Deo N. Graph theory with applications to engineering and computer science[J]. Networks, 1975, 5(3): 299-300.
- [27] 冯恩民, 张军, 王锡禄, 等. 换热网络综合问题中的布局优化[C]. 中国运筹学会, 2000: 21-26.
- [28] 方海鹏, 王其冬, 冯恩民, 等. 图与对称群在换热网络综合问题中的应用[J]. 化工学报, 2002(3): 310-312.
- [29] 张军. 换热网络布局问题的改进及计算[J]. 延边大学学报(自然科学版), 2006(4): 240-243.
- [30] Warshall S. A Theorem on Boolean Matrices[J]. Journal of the ACM, 1962, 9(1):11-12.
- [31] Tarjan R. Depth-first search and linear graph algorithms[C]//12th Annual Symposium on Switching and Automata Theory (swat 1971). 1971: 114-121.
- [32] Linnhoff B, Kotjabasakis E. Downstream paths for operable process design [J].Chem Eng Prog,1986;82:23-8.
- [33] Kemp I C . Pinch Analysis and Process Integration[M]. 2006.
- [34] Deb K, Pratap A, Agarwal S, et al. A fast and elitist multiobjective genetic algorithm: NSGA-II[Z]//IEEE Transactions on Evolutionary Computation: Vol 6. 2002: 182-197.
- [35] 胶友通. 煤制甲醇: 总产能超 7500 多万吨价格仍处于相对高位程度[EB/OL]//百度.(2022-07-14). <https://baijiahao.baidu.com/s?id=1738290324710243627&wfr=spider&for=pc>
- [36] 河北省质量技术监督局. DB13_T2133-2014 甲醇单位产品能源消耗限额(焦炉煤气制)[S].石家庄, 河北, 2014.
- [37] SREEPATHI B K, RANGAIAH G P. Improved heat exchanger network retrofitting using exchanger reassignment strategies and multi-objective optimization[J]. Energy, 2014, 67: 584-594.
- [38] 张锁江, 张香平等. 绿色过程系统集成[M]. 北京: 中国石化出版社. 2006.
- [39] United States Environmental Protection Agency, Science Advisory Board. Reducing Risk: Setting Priorities and strategies for Environmental Protection [R].SAB-EC-90-021, Washington, DC, 1990.
- [40] Joanne R Schaich. Estimate Fugitive Emissions from Process Equipment. Chemical Engineering Progress[J],1991,8:31-35.
- [41] David Allen, David Shonnard, Pual Anastas. Green Engineering Environmentally Conscious Design of Chemical Processes[M], Prentice Hall, 2002.
- [42] US EPA. Compilation of Air Pollutant Emission Factors(AP-42), Volume 1: Stationary Point and Area Sources(Fifth Edition)[DB],2000.
- [43] Life Cycle Assessment Team. Framework for Responsible Environmental, Decision-Making(FRED): Using Life Cycle Assessment to Evaluate Preferability of Products[M],US EPA,2000.
- [44] Pennington D W , Norris G , Hoagland T , et al. Environmental comparison metrics for life cycle impact assessment and process design[J]. Environmental Progress, 2010, 19(2):83-91.
- [45] 2022-2027 年中国工业软件市场竞争格局及未来投资前景预测报告, 华经产业研究院[R].湖南, 2022.

附 录

附录编号依次编为附录 A，附录 B。附录标题各占一行，按一级标题编排。每一个附录一般应另起一页编排，如果有多个较短的附录，也可接排。附录中的图表公式另行编排序号，与正文分开，编号前加“附录 A-”字样。

附录包括：外文原文及其译文、有关图纸、计算机源程序等。

附录必须与论文装订在一起，附录的页码必须接着参考文献的页码连续编写。

附录装订顺序如下：

外文原文、外文翻译、有关图纸、计算机源程序等、任务书、考核评议书、答辩结果。