第2章 过程系统的稳态模拟

本章导读

过程系统的模拟可分为稳态模拟和动态模拟两类。稳态模拟是过程系统模拟研究中开发最早和应用最为普遍的一种技术,它包括物料和能量衡算、设备尺寸和费用计算以及过程的技术经济评价等。早期的模拟主要集中于发展分析模型,各种数学方法被用来获得不同化工问题的解析解,之后各种数学方法也被用来解决更严格的化工问题。目前,逆矩阵、非线性方程的求解和数值积分等方法在很多软件中均有应用;模型主要是更详细的理解过程并用数学形式表达;目的是在各种水平上采用"模型图"以简化模型来表达复杂问题,并应用系统方法解决问题。

- 数学模型是对单元过程及过程系统或流程进行模拟的基础,对模拟结果的可靠性及准确程度起到关键作用。不同的过程具有不同的性能,因而需建立不同类型的模型,不同类型的模型求解方法也不同。
- ▶ (1) 稳态模型与动态模型 在模型中,若系统的变量不随时间而变化,即模型中不含时间变量,称此模型为稳态模型。当连续生产装置正常运行时,可用稳态模型描述。对于间歇操作,装置的开、停车过程或在外界干扰下产生波动,则用动态模型描述,反映过程系统中各参数随时间的变化规律。

- ▶ (2) **机理模型与"黑箱"模型** 数学模型的建立是以过程的物理与化学变化本质为基础的。根据化学工程学科及其他相关学科的理论与方法,对过程进行分析研究而建立的模型称为<mark>机理模型</mark>。例如,根据化学反应机理、反应动力学和传递过程原理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。

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

(4)确定性模型与随机模型 按模型的输入与输出变量之间是否存在确定关系可分为确定性模型和随机模型。若输出与输入变量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。

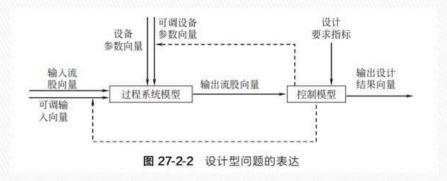
2.2 过程系统模拟的基本任务

▶ (1) 过程系统的模拟分析 过程系统的模拟分析常称为标准型问题或操作型问题 (operatingproblem),该问题首先应给定过程系统的结构,即过程系统及设备参数向量,给定输入流股向量,求解输出流股向量。



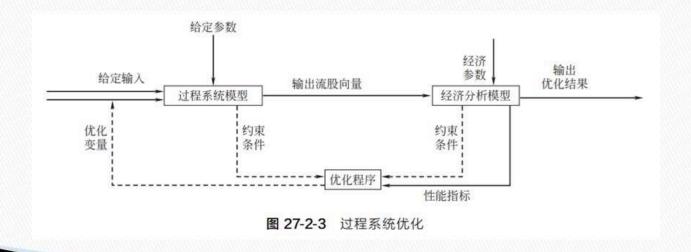
2.2 过程系统模拟的基本任务

▶ (2) **过程系统设计** 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)



2.2 过程系统模拟的基本任务

(3)过程系统优化过程系统优化是指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。



2. 3 过程单元与过程系统的自由度分析

- 自由度是一个抽象的概念,同时也是系统的非常重要的参数。自由度分析的主要目的是在系统求解之前,确定需要给定多少个变量,可以使系统有唯一确定的解。在求解模型之前,通过自由度分析正确地确定系统应给定的独立变量数,可以避免由设定不足或设定过度而引起的方程无解。
- ▶ 单元操作过程的数学模型由代数方程组和(或)微分方程组构成,假定共有m个独立方程式,其中含有n个变量,且n>m,则该模型具有的自由度为:

d=n-m

对于一多组分、多相的平衡系统来说,自由度为:

d = C - P + 2

2.3.1 混合器

图2-6为一理想混合器,已符合上面的所有假设,两股物流经混合器混合一为一股物流,所有涉及的变量已标注在图上。若组分数为 C,过程绝热,则该过程所有的变量为各股物流的独立变量 F_i , p_i , T_i 和(C—1)个 $\chi_{i,i}$,其中i=1~3,j=1~C则变量数为

$$n=3(C+2) \tag{1}$$

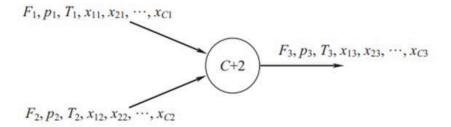


图 27-2-5 简单混合器示意图

目录

对该过程可以建立以下独立方程:

压力平衡方程
$$p_3 = \min\{p_1, p_2\}$$
 1个 (2) 物料衡算方程 $F_1x_{1,j} + F_2x_{2,j} = F_3x_{3,j}$ C个 $j=1 \sim C$ (3) 焓平衡方程 $F_1H_1 + F_2H_2 = F_3H_3$ 1个 (4)

上述方程组即为物流混合器的数学模型。对该混合过程还可列出方程 $F_1+F_2=F_3$ (5)

但这一方程是不独立的,不应包含在模型之内。因为将式(3)中的C个方程相加可得式(6)

$$\sum_{j=1}^{C} F_1 x_{1,j} + \sum_{j=1}^{C} F_2 x_{2,j} = \sum_{j=1}^{C} F_3 x_{3,j}$$
 (6)

目录

2.1 2.

2.3

2.4

由于每一流股中C个组分的质量分数或摩尔分数之和均为1,故(6)式实际和(5)式一致。式(4)中的 H_1 、 H_2 、 H_3 都是状态函数,可表示为H=H(T,p),不计入变量,由此可见,含有C个组分的两个流股,混合成一个流股,模型的独立方程数为:

$$m=C+2$$
 (7)

则模型的自由度为:

$$F_r = n - m = 3(C+2) - (C+2) = 2C+4$$
 (8)

目录

2.1 2.2 2.3 2.4

2.3.2 分割器

分割过程也是化工过程最常见单元操作,如精馏塔塔顶冷凝液通过管路分割成2两股物流,一股作为回流液返回精馏塔,另一股作为产品或下一个精馏塔的进料;在反应不完全的系统中,通过分离需要将未反应的原料返回反应器重新反应,此时需要将返回物料进行分割,放空一步分返回物料,以防惰性组分的累积而使反应无法进行。

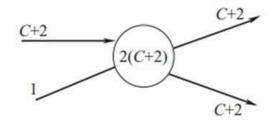


图 27-2-6 简单分割器示意图

目录

2.1 2.2 2.3 2.4

流股分割器只把流股按需要分成若干股,而其中不发生任何变化, 故有以下方程:

温度平衡
$$T_i=T_0$$
 $i=1,2.....S$ S个 (1)

压力平衡
$$P_i=P_0$$
 $i=1,2.....S$ S个 (2)

分流物料平衡
$$F_i=\theta_iF_0$$
 $i=1,2.....S$ S个 (3)

浓度相等
$$x_{ji}=x_{j0}$$
 $j=1\sim(C-1)$, $S(C-1)$ (4)

分流约束
$$\sum_{i=1}^{S} \theta_i = 1 \qquad 1$$
 (5)

目录

由于有S个分流约束系数,故分割器的总变量数为:

$$m = (S+1) (C+2) + S = SC + 3S + C + 2$$
 (6)

分割器系统模型的总方程数n为

$$n=2S+SC+1 \tag{7}$$

所以该模型的自由度为

$$F_r = m - n = S + C + 1 = (C + 2) + (S - 1)$$
 (8)

目录

2.1 2.2 2.3 2.4

2.3.3 闪蒸器

闪蒸过程是化工过程进行组分分离的最基本操作,在闪蒸过程中,一物流(其组成为z_i)通过节流阀减压后进入闪蒸器,部分物料汽化,产生汽液两相,两相的流量分别为V和L,两相的组成分别y_i和X_i,如图所示

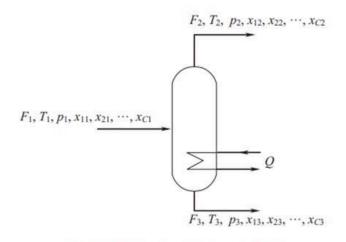


图 27-2-7 闪蒸器单元示意图

▶ 变量总数为3(C+2)+1,表示闪蒸器变量之间关系的方程如下:

物料衡算方程

$$F_1x_{j1} = F_2x_{j2} + F_3x_{j3} (j = 1, 2, \dots, C)$$

热量衡算方程

$$F_1H_1+Q=F_2H_2+F_3H_3$$

温度平衡方程

$$T_2 = T_3 = T_1$$

压力平衡方程

 $p_2 = p_3$

相平衡方程

$$x_{j2} = k_j x_{j3} (j = 1, 2, \dots, C)$$

这里共有 2C+4 个独立方程式。故闪蒸器的自由度为

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

对于阀前另外一种情况,变量数多一个减压阀压力降 Δp ,即 n=3(C+2)+2,则 d 也 就多一个,为 C+4 。

2.3.4 换热器

▶ 设换热器两侧物流的组分数目分别为C₁与C₂,如图所示

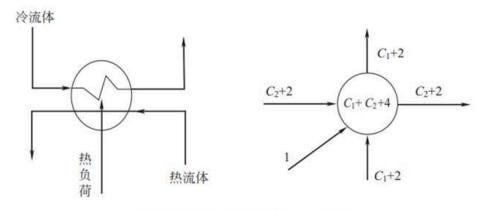


图 27-2-8 换热器单元示意图

方程名称	一侧方程数	另一侧方程数	
物料衡算	C_1	C_2	
焓衡算	1	1	
压力变化	1	1	
独立方程数	$C_1 + 2$	C_2+2	
独立方程总数	$m = (C_1 + 2) + (C_2 + 2)$		
独立变量数	一侧	另一侧	
输入物流	$C_1 + 2$	$C_2 + 2$	
输出物流	$C_1 + 2$	C_2+2	
热负荷,作为设备参数	1		

独立变量总数故自由度为

$$n = (C_1 + 2) + (C_2 + 2) + 1$$

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

2.3.5 反应器

(5) 反应器^[8] 如图 27-2-9 所示,常用的反应器模型是规定出口反应程度的宏观模型,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 ξ_i ($i=1,2,\cdots$,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;独立方程为C 个组分物料平衡方程、1 个焓平衡方程、1 个压力平衡方程,即独立方程总数为C+2。其自由度为

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

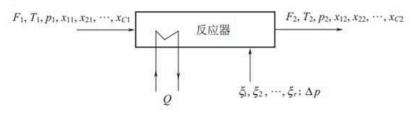
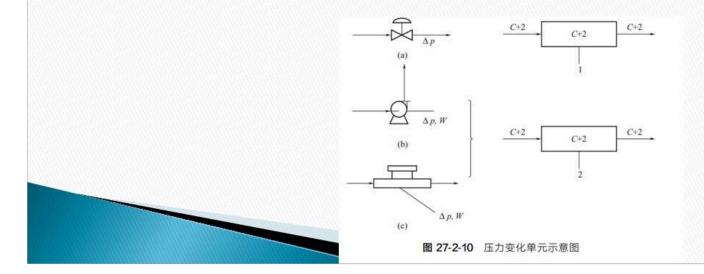


图 27-2-9 反应器单元示意图

2.3.6 压力变化单元

压力变化单元包括阀门、泵、压缩机等单元,如图27-2-10所示。压力变化单元中除了压降 Δp 作为设计参数予以规定,对于泵、压缩机而言,与物料流无关的能量流 (轴功W)也作为设计参数予以规定;独立方程为C个组分物料平衡方程、1个温度相等(忽略温度变化)方程、1个压力平衡方程,即独立方程总数为C+2。



阀门的自由度为

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

泵、压缩机的自由度为

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

2.3.7 分离过程基本单元的自由度分析

▶ 表27-2-1 分离过程基本单元的自由度分析

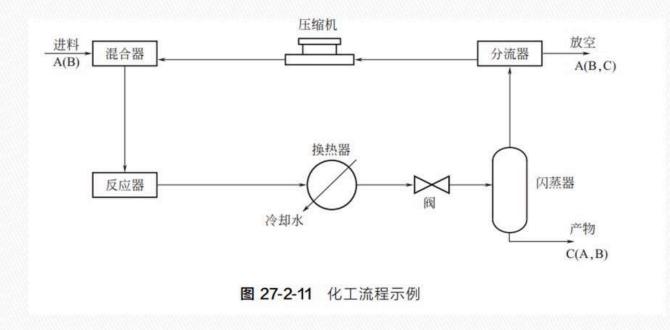
Vout Lin Vout Lin Vout Lin Lout Lout	名称	独立变量 总数 [⊕] m	独立方程 总数 ^① n	自由度
	全沸器	2C+5	C+1	C+4
	全凝器	2C+5	C+1	C+4
	部分再沸器	3C+7	2C+3	C+4
	部分冷凝器	3C+7	2C+3	C+4
	绝热平衡级	4C+8	2C+3	2C+5

2.3.7 分离过程基本单元的自由度分析

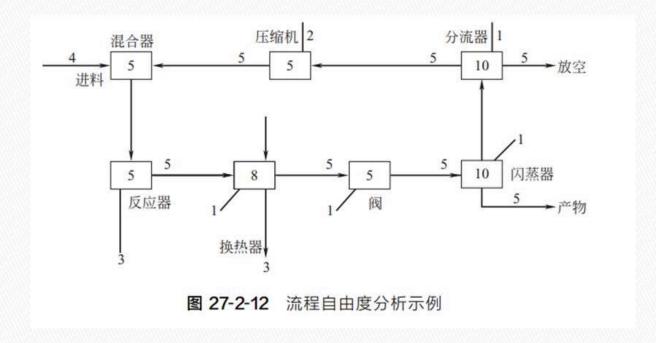
▶ 表27-2-1 分离过程基本单元的自由度分析

简图	名称	独立变量 总数 [□] m	独立方程 总数 ^① n	自由度
V_{out} $\downarrow L_{\text{in}}$ $\downarrow Q_N$ $\downarrow Q_{N-1}$ $\downarrow Q_N$ $\downarrow Q_{N-1}$ $\downarrow Q_2$ $\downarrow Q_1$ $\downarrow Q_1$	N 平衡级,有热负荷	5N+2NC+ 2C+5	3N+2NC	2N+2C+5
V_{out} L_{in} L_{out}	平衡级,有热负荷	4C+9	2C+3	2C+6
$F \xrightarrow{V_{\text{out}}} \xrightarrow{L_{\text{in}}} \xrightarrow{L_{\text{in}}}$	平衡级,有进料及热负荷	5C+11	2C+3	3C+8
V_{out} L_{in} V_{in} L_{out} V_{out}	平衡级,有进料侧线引出 与热负荷	6C+13	3C+4	3C+9

2.3.8 过程系统的自由度分析



2.3.8 过程系统的自由度分析



2.3.8 过程系统的自由度分析

表 27-2-2 图 27-2-11 流程的自由度分析 单元 独立变量数 单元参数 说明 独立方程数 系统的输入物流 混合器 5 9 0 反应器 5 5 $\varepsilon \cdot \Delta p \cdot Q$ 换热器 8 Q阀 5 Δp 闪蒸器 10 5 Q 分流器 10 5 S-1压缩机 $\Delta p \cdot W$ 5 5 系统的输出物流 冷却水 3 产品 5 排放 5 总数 48 55

2.4 过程系统结构的表示

▶ 过程系统中各单元之间的联结关系,即系统结构,可由下式表达:

 $y_i^k = x_j^l$

式中 y_i^k ——单元 i 的第 k 个输出流股;

 x_j^l ——单元 j 的第 l 个输入流股;

i,j——单元序号;

l,k---流股序号。

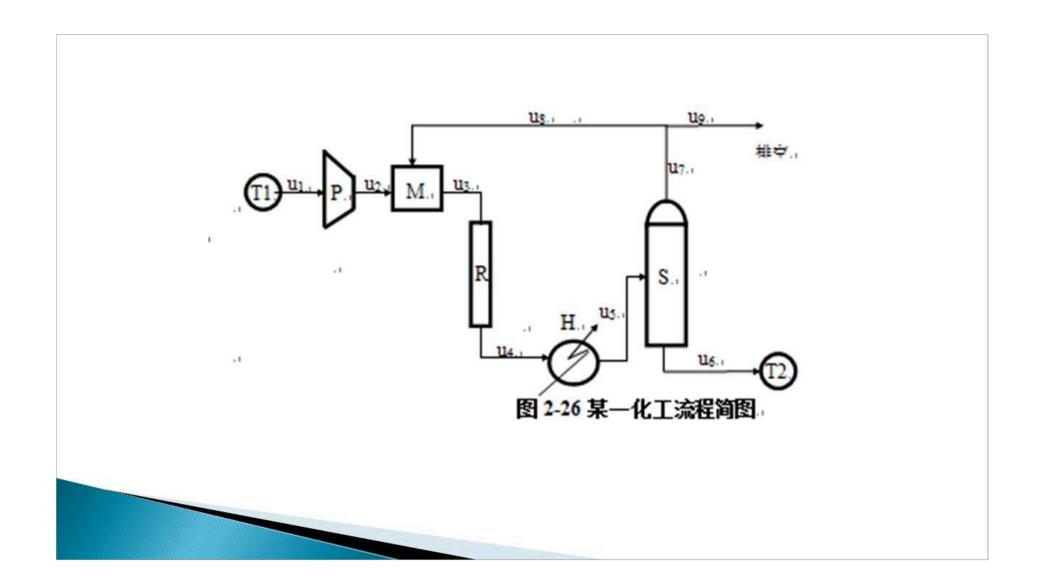
该式描述了单元 i 与单元 j 之间的联结关系。

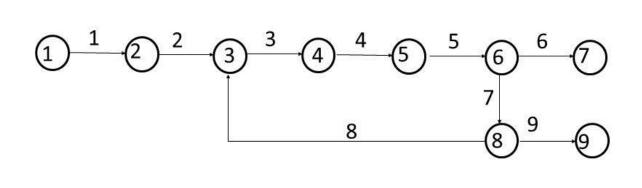
2.4.1 图形表示

▶ 图是由节点和节点间相互联结的边 (或弧)所构成。在一过程系统中,过程单元可用节点表示,单元之间的流股 (包括物料流、能量流、信息流)用边表示。如果考虑流股的方向,则边是有方向的,此时得到的图称为有向图,否则为无向图。图可用下面的集合形式表示:

$$G = (X, E)$$

▶ 图可以分解为若干个子图,其中有两种典型的子图:一种称为路径;另一种称为回路。所谓路径是指相互顺序联结的有向边,即每个边的终节点是后续边的起始节点(路径的两个端点例外)。





2.4.2 过程矩阵(Process Matrix)R_P

过程矩阵是化工流程结构矩阵的一种,由若干行和若干列组成。它是在有向图的基础上建立起来的。有了有向图之后,各单元设备和各股物流已经数字化。过程矩阵的行数和有向图单元数相同,行号和结构单元号对应,某一行对应的列数和该行对应单元进出物流数相同,元素值和物流号相对应,并规定进入单元的物流为正,流出单元的物流为负。其公式如下:

$$S_{i,j} = \begin{cases} \frac{+j}{-j} & j 物流流入 i 节点。 \\ -j & j 物流离开 i 节点。 \end{cases}$$

目录

2.1 2.2 2.3 2.4

对于前面的单元结构图,可得其过程矩阵为:

目录

2.1 2.2 2.3

2.4

过程矩阵中所有元素均出现两次,一正一负,可利用次特性对过程矩阵进行检错。利用过程矩阵中元素的特征,可以判断单元之间的连接形式。

串联:从上到下具有先负后正的相连物流号。例如物流1,2,3,4,5,6

并联: 同一行中具有两个或两个以上符号相同的元素,同为正号则并联输入(第三行的2,8);同为负号则并联输出(第六行的-6,-7)。

起始单元:对应行只有一个元素,且为负号(第一行的-1)。

终结单元:对应行只有一个元素,且为正号(第七行的6)

目录

2.4.3 关联矩阵 (Incidence Matrix) R_I

关联矩阵是由有向图中的m个节点和n个支线组成的m×n矩阵。其矩阵中的各元素值如下:

目录

2.1

2.2

2.3

关联矩阵的行号和有向图中的单元号对应,列号和有向图中的物流号对应。

(2-45)

目录

特点分析:

所有的列元素之和为零

某一列中正1首先出现则表明该列所对应的支线或物流为循环物流 如物流8

某一行中相同符号的不为零的元素出现两次或两次以上,表示该行所对应的节点有并联物流输入或输出,符号为正则为并联

矩阵中负正元素以平行对角线形式出现,表明有串联。如上面关联矩阵中虚线所示,表明从节点1到节点是串联的。

某行中只有一个非零元素,若为1则是终端点,若为-1则为始端点。 如第一行只有一个非零元素,且为-1,故节点1为始端点或开始单元; 第七行也只有一个非零元素,且为1,故节点7为终端点或终结单元

目录

综上分析,关联矩阵确切地表达了各过程单元在流程中的位置以及它们之间的相互联接关系。关联矩阵清晰地反映了流程结构。若将关联矩阵的非零元素 $S_{i,j}$,用输入或离开节点i 的物流变量数 $d_{i,j}$ 来表达,即

$$S_{i,j} = \begin{cases} -d_{ij}, \\ 0, \\ d_{ij}, \end{cases}$$

离开i节点j物流的变量数物流u_j和节点X_i没有联系输入i节点j物流的变量数

目录

2.1

2.2

2.3

2.4

将上面的物流变量数代入,并注意物流的输入与输出问题,上面的关联矩阵便变成了以下形式,从而增加了关联矩阵反映的信息内容。

(2-45)

目录

2.4.4 邻接矩阵

▶ 邻接矩阵中行和列的序号都代表单元的序号。邻接矩阵的元素定义如下:

$$A_{ij} = \begin{cases} 1, \text{从节点 } i \text{ 到节点 } j \text{ 有边联结} \\ 0, \text{从节点 } i \text{ 到节点 } j \text{ 没有边联结} \end{cases}$$

- 》邻接矩阵具有以下特征:
 - ① 若有向图中有n 个节点,则该矩阵为n 行n 列的方阵。
 - ② 空的列 (元素都为0的列)表示其对应系统的起始节点,即没有输入边的节点。
 - ③ 空的行 (元素都为0的行)表示其对应系统的终节点,即没有输出边的节点。

目录

2.4.5 联结表

联结表可以看作是从邻接矩阵派生出来的一种表。这种表由两列组成,其中一列(i 列)为输出物流的节点号,另一列(j列)为接受或输入物流的节点号。它只记录节点间实际存在的联接,而去掉了像邻接矩阵中非零元素所表示的多余信息。从而避免了冗余,节省了计算机的存储单元和机时消耗。对应与图2-27的有向图可得联结表2-7

表2-7 对应于图2-27有向图的联结表

i 列	j列	i列	j 列
1	2	6	7
2	3	6	8
3	4	8	3
4	5	8	9
5	6		

目录

对应表2-7的扩展型联结表2-8如下:

表2-8 对应于图2-27有向图的扩展型联结表

i 列	j列	d _{i,i}	i列	j列	d _{i,i}
1	2	4	6	7	3
2	3	5	6	8	3
3	4	6	8	3	5
4	5	8	8	9	5
5	6	4			

目录

【例2-5】已知某化工流程的有向图如下,请写出该有向图的过程 矩阵,关联矩阵,邻接矩阵及联结表,并判断结构中的串联、并联、 始终端点及反馈情况

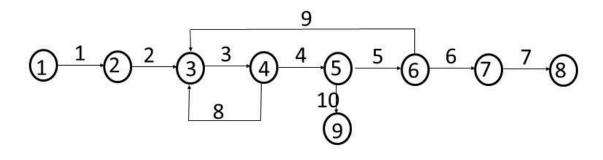


图2-28 某一化工流程有向图

目录

解:由上图的结构有向图可知,该系统共有9个单元,10个物流组成,根据其具体的物流走向及各单元之间关系可得:

目录

1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	
2	2 0	0	1	0	0	0	0	0	0	
3	0	0	0	1	0	0	0	0	0	
4	1 0	0	1	0	1	0	0	0	0	
邻接矩阵: $R_A = 5$	0	0	0	0	0	1	0	0	1	
	6 0	0	1	0	0	0	1	0	0	
7	7 0	0	0	0	0	0	0	1	0	
8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
g	$0 \mid 0$	0	0	0	0	0	0	0	0	

联结表:

i列	j列	i列	j列	i列	j列
1	2	4	5	6	7
2	3	5	6	7	8
3	4	5	9		
4	3	6	3		

目录

流程特点分析:利用前面各节介绍得方法,可以分析得到系统得以下结构特性。

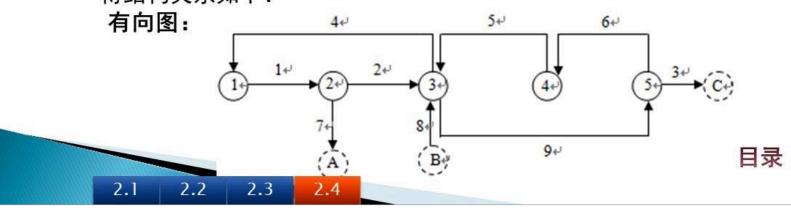
- 1.端单元和内部单元
- 2.串联分析
- 3.并联分析
- 4.反馈物流

目录

【例2-6】已知某化工流程得过程矩阵如下,请画出其结构有向图, 并写出关联矩阵和邻接矩阵及联结表 1「4 -1

表
$$1 \begin{vmatrix} 4 & -1 \\ 2 \begin{vmatrix} 1 & -2 & -7 \\ R_P = 3 \begin{vmatrix} 2 & 5 & 8 & -4 & -9 \\ 4 & 6 & -5 \\ 5 \begin{vmatrix} 9 & -3 & -6 \end{vmatrix}$$

解:由过程矩阵可知,该流程共由5个单元和9股物流组成,其具体得结构关系如下:



【例2-6】 试画出下面冷冻法海水淡化工艺流程的有向图,写出对应节点的单元名称,建立过程矩阵、关联矩阵、邻接矩阵

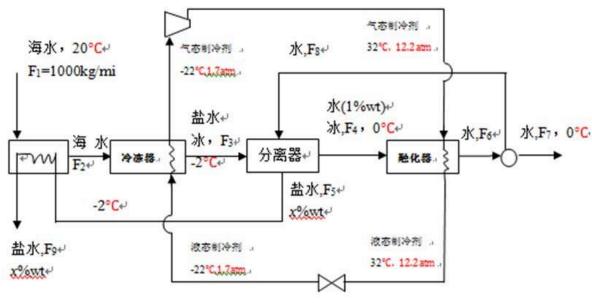


图2-29 冷冻法海水淡化工艺流程图

目录

