

研究论文

复杂化工过程系统的能值计算方法

罗祎青, 胡尊燕, 袁希钢

(化学工程联合国家重点实验室, 天津大学化工学院, 天津 300072)

摘要: 针对复杂过程系统的生态化设计, 研究系统内部及输出流股能值的计算策略和方法。基于系统能量或质量流程图, 确定系统内外的能流、物流的分布和能量分配系数, 通过建立复杂系统能值计算的循迹法, 确定系统各种输入能值在系统内的分配, 解决复杂系统内部联结各单元的流股能值准确计算问题。基于该方法, 对玉米燃料乙醇生产过程系统进行了能值分析和评价。

关键词: 能值分析; 复杂系统; 化工过程生态化设计

DOI: 10.3969/j.issn.0438-1157.2013.01.035

中图分类号: TQ 021.8

文献标志码: A

文章编号: 0438-1157 (2013) 01-0311-07

Method for calculating stream emergy in complex chemical process systems

LUO Yiqing, HU Zunyan, YUAN Xigang

(State Key Laboratory of Chemical Engineering, School of Chemical Engineering and Technology,
Tianjin University, Tianjin 300072, China)

Abstract: In this paper, a method for calculating emergys of output streams and inner streams of chemical process system was proposed for the optimal design of the systems. Based on a energy or mass flow diagram, the distributions of material flows and the energy distributing coefficient are determined, and then a tracking method was proposed to calculate the emergys for the complex system by estimating the distributing parameters of input energy among the inner streams. The proposed method was applied to the emergy analysis of a corn fuel ethanol production process.

Key words: emergy analysis; complex systems; eco-chemical process design

引 言

传统化工过程设计主要是以最大经济收益为目标的, 而可持续发展则要求化工过程设计必须同时考虑环境、安全乃至气候影响等生态化指标, 这给化工过程分析、评价以及优化设计提出了新的挑战。多目标优化^[1]是解决这一问题的一种较为直接的方法。本质上, 生态化指标的考虑已经将化工过程优化问题的边界由原来的化工过程本身扩大到包

括环境在内的更大的系统, 因而需要从能源与资源的消耗以及产出的收益来更全面地权衡化工生产过程可持续性。为此, 产品的生命周期分析是研究化工过程及其产品可持续性的有效方法^[2-4]。近年来, 循环经济理念被广泛接受^[5-6], 它又为化工过程系统的优化增加了工业经济这一新的坐标, 进而提出了生态工业园区的思想^[6-8], 这开启了化工过程生态化发展研究新的前沿。然而化工过程生态化设计中各种评价指标的物理含义各异, 相互冲突又关

2012-08-10 收到初稿, 2012-09-28 收到修改稿。

联系人: 袁希钢。第一作者: 罗祎青 (1966—), 女, 副研究员。

基金项目: 国家自然科学基金项目 (21176178); 天津市科技支撑计划重点项目 (11ZCKFGX02400)。

Received date: 2012-08-10.

Corresponding author: Prof. YUAN Xigang, yuanxg@tju.edu.cn

Foundation item: supported by the National Natural Science Foundation of China (21176178) and Key Projects in the National Science & Technology Pillar Program of Tianjin (11ZCKFGX02400).

联,要科学、准确地评价化工过程的生态化目标,仅靠多目标非劣解边缘(Pareto)加以权衡,或简单的影响因子(权重系数)方法已经不能满足需要,这是化工过程生态化设计所面临的重要挑战之一。

能值理论是一种新的环境-经济价值论和系统分析方法。因各种资源、产品、劳务、信息等形成过程中均直接或间接地来自太阳能,故能值分析一般以太阳能为基准,用太阳能焦耳(seJ)为单位来度量不同类型能量、物质、信息等的能值。能值^[9]的概念继承了生命周期系统分析的思想,以能值为基准尺度联结和衡量流经自然生态系统和社会经济系统的各种物流、能流和信息流。传统的经济性分析方法着眼于生产系统是否在总体上达到技术上及经济上的最优化,仅将环境的影响作为次要的目标,并且缺少一个统一的尺度平台进行各种物质、能量、排放及环境影响的统一评价和对比,各种方案之间多有不可比性存在。而能值理论提出了体现能量等级、品质和做功能力的太阳能值转换率的概念,该转换率是指单位不同种类的能量或物质所含有的太阳能值。应用这一概念可使不同来源与性质的自然环境资源与经济活动价值投入获得相同的评价和比较标准,因此使用能值分析的方法,以能值为量纲,可使系统所有类型的投入以相同的测度单位表达,以评价其经济价值、生态价值和可持续发展水平。应用于化工过程生产体系的评价,就可以将工业生产过程与经济、生态环境相结合,对环境价值和经济价值进行综合评价。能值理论分析方法目前主要应用在系统生态学和生态经济学领域,在工业生产系统的应用还处于起步阶段,尚缺乏适用于工业生产系统的能值指标体系,但由于其能够综合分析系统中各种生态流(能流、物流、货币流、信息流等)以及推动整个过程运行的经济输入、环境输入、再生资源、非再生资源等各种输入形式对系统的实际贡献,使不同来源与性质的能量和物质获得相同的比较标准,比其他系统分析方法考察因素更加全面,因而越来越受到人们关注。

能值(emergy)概念有别于能量(energy),它表示了在时间和空间上进入产品的全部有效能,是为得到某种物质(或能量)而必须消耗的其他种类的能量(一般指太阳能)总和,是被消耗的(包括转换过程中损失的),而非拥有的能量。能值不仅考虑了产品所包含能量的质和量,还体现了能量

的历史积累。此外,在工业过程系统中,物流、能流以及最终产品等的能值与采用的工艺过程有关,这完全不同于系统生态学中各种生态流的能值,生态系统是一种自组织的能量等级系统,除遵守热力学定律外,还遵循“最大功率原则”,同时具有相对确定的形成过程及路线,因此自然生态系统中产品的能值转换率相对稳定。对于工业生产过程,各种产品的能值转换率随所选择的原材料、生产方式、途径和效率的不同而变化,不会具有单一的能值转换率,产品的产地、生产方式,以及生产过程中的技术条件、管理效率等,都会直接影响产品能值的大小。此外,能值的特性使多产品系统输出流通股能值之和远大于系统输入能值之和,而对于复杂系统,产出流通股以及系统内部流通股(包括循环流通股)能值的计算是复杂的,目前尚无成熟的方法。因此根据能值计算基本原则,建立简单高效的工业过程复杂系统能值计算方法,对采用不同原材料、生产方式或途径等的产品生产体系进行能值计算,是指导系统良性运作、科学准确评价系统可持续性的基础。

本文针对复杂化工过程系统,研究系统内部及输出流通股能值的计算方法和策略;解决系统内部联结各单元的流通股能值计算问题,确定系统各种输入能值如何在系统内分配,建立标准化系统能值流计算方法。

1 复杂过程系统的能值计算方法

任何工业过程均构成对物质、能量以及环境等资源的消耗,能值分析可以克服以往系统优化中各种资源评价指标不统一这一缺陷,使工业生产过程与经济、生态环境的评价统一于相同指标。Odum^[9]给出了系统能值计算必须遵循的四条规则。

规则 1:对于稳态系统,输入的能值将全部分配给输出的产品;

规则 2:对于多产品系统,每个产品能值输出都等于输入的能值之和;

规则 3:当系统中一个路径分叉时,输入的能值分配给每条路径的能值由该路径的能量或质量分率决定,而每条路径所具有的能值转换率不变;

规则 4:在一个系统中,输入的能值不能重复累加。

并由此得到如下推论。

表 1 能量(或质量)分配系数 γ 矩阵

Table 1 Distribution indexes of energy in each stream

from i	to j								
	A	B	C	D	E	S	F	out1	out2
A	0	0	0	1	0	0	0	0	0
B	0	0	0	1	0	0	0	0	0
C	1	0	0	0	0	0	0	0	0
D	0	0	0.5	0	0.5	0	0	0	1
E	0	1	0.5	0	0	0	0	0.5	0
S	0.3	0.7	0	0	0	0	0	0	0
F	0	0	1	0	0	0	0	0	0

算每一路径进入该股股的能值, 则这些能值的和即为所计算流股的能值。

1.2 算例

计算图 1 所示系统中流股 AD 的能值。

由图 1 可知, 输入系统的能值有两个, 即 S、F, 其能值分别为 $10000 \text{ seJ} \cdot \text{a}^{-1}$ 和 $20000 \text{ seJ} \cdot \text{a}^{-1}$ 。按照本文提出的能值计算步骤进行计算。

第一步, 通过系统的物料或能量流程图, 确定系统中每一流股的能量或质量流量, 根据能量分配系数的定义确定系统的每一流股能量或质量分配系数, 建立能量或质量分配系数矩阵, 即表 1。

第二步, 由系统能值输入之一 F 出发, 由表 1 可知, F 流向了 C 单元, 能量分配系数为 1。从 C 流出的流股流向 A, 能量分配系数亦为 1。从 A 流出的流股流向 D, 可得到由源头 F 出发的一条能值流动路径, 即路径①, 其中箭头上方数字表示流股能量分配系数。

再从另一能值输入 S 出发, 由表 1 可知, S 一部分流向 A, 另一部分流向 B, 必须分别考察各部分能值的去向踪迹。由表 1 可知, S 流向 A 的路径能量分配系数为 0.3, A 又流向了 D, 能量分配系数为 1, 即路径②。S 另一部分流向 B 的路径能量分配系数为 0.7, B 又流向 D, 能量分配系数为 1, 再由 D 流向 C、E, 它们的能量分配系数均为 0.5。

先看由 D 流向 C 的路径, 从 C 出来的这股能流经由 A 最终流向 D, 能量分配系数均为 1, 即路径③。

再看由 D 流向 E 的这股能流, 由 E 经 B 流向 D, 再由 D, 分别流向 C、E。流向 E 的路径构成 BDE 循环, 不会再流经 A 和 D; 流向 C 的能流, 经 A 最终到达 D, 构成路径④。

需要注意的是, 由 E 产生两个能值流股, 根

据规则 2, 对于多产品系统, 每个产品能值输出都等于输入的能值之和, 因此这两个能值流股分别拥有相同的输入能值, 如果其中一个流股的能值已经计算进入流股 AD, 则根据规则 4, 另一条流股的能值就不能再计算进入 AD, 因为由 S 到 B 的能值已经被计算过, 不能重复累加。

路径① $F \xrightarrow{1} C \xrightarrow{1} A \xrightarrow{1} D$

路径② $S \xrightarrow{0.3} A \xrightarrow{1} D$

路径③ $S \xrightarrow{0.7} B \xrightarrow{1} D \xrightarrow{0.5} C \xrightarrow{1} A \xrightarrow{1} D$

路径④ $S \xrightarrow{0.7} B \xrightarrow{1} D \xrightarrow{0.5} E \xrightarrow{1} B \xrightarrow{1} D \xrightarrow{0.5} C \xrightarrow{1} A \xrightarrow{1} D$

第三步, 计算每一路径能值。由规则 3 可知, AD 由路径①获得的能值为能值 F 分别乘以各流股的能量分配系数

$$\gamma = F \times \gamma_{FC} \times \gamma_{CA} \times \gamma_{AD} \quad (1)$$

同理, 由路径②、③、④分别获得的能值为

$$S \times \gamma_{SA} \times \gamma_{AD} \quad (2)$$

$$S \times \gamma_{SB} \times \gamma_{BD} \times \gamma_{DC} \times \gamma_{CA} \times \gamma_{AD} \quad (3)$$

$$S \times \gamma_{SB} \times \gamma_{BD} \times \gamma_{DE} \times \gamma_{EB} \times \gamma_{BD} \times \gamma_{DC} \times \gamma_{CA} \times \gamma_{AD} \quad (4)$$

则流股 AD 的能值 Em_{AD} 为式(1)~式(4)之和, 即

$$Em_{AD} = 28250 \text{ seJ}$$

对于图 1 所示的系统, 其内部任意流股以及输出流股能值的计算均可用循迹法求得, 最终所有流股能值计算结果如图 2 所示。对于更复杂的系统, 只要根据物流图或能流图确定系统中各流股的能量或质量分配系数矩阵, 就可用循迹法确定各种系统输入能值在各个流股中的分配并计算各流股的能值。

与仅应用能值计算四条规则相比, 循迹法可以

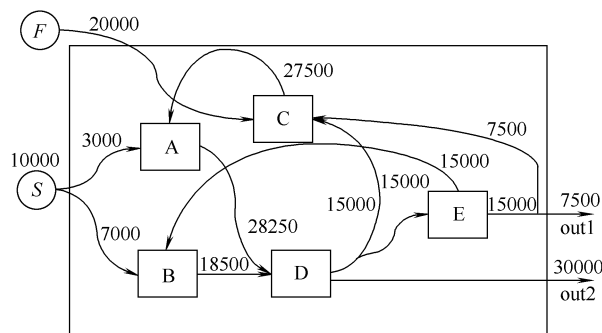


图 2 具有 5 个能量转换过程的能值系统图

Fig. 2 Energy flows in a 5-compartment system (energy/seJ $\cdot$ a $^{-1}$)

快速、准确解决复杂系统内部联结各单元的流股能值计算问题，确定系统各种输入能值如何在系统内分配，标准化了系统能值流运算，能有效避免能值计算的遗漏和重复累加问题。通过系统内部及输出流股能值的准确计算，可真实反映能值系统的结构、功能特征、能量转化关系，为准确计算能值评价指标、进而正确评价系统可持续性打下基础。

2 玉米燃料乙醇生产过程的能值分析和可持续性评价

以某变性燃料乙醇装置（干法工艺）为例^[11]，将燃料乙醇工业生产系统（图 3）分为 3 个阶段：玉米生产、玉米运输和乙醇生产，根据玉米燃料乙醇生产系统流程图，采用本文提出的循迹法确定玉米燃料乙醇生产系统输入能值在各个流股中的分配并计算各主要流股的能值，考查输入能值在 3 个阶段的利用状况，定量评价该生产系统的可持续性。装置考虑的能值输入包括玉米生产过程本地可更新环境资源 R_1 （太阳能、雨水化学能等）、本地不可更新环境资源 N_1 （土壤有机质）、外部购入资源 F_1 （或称为经济反馈能值投入，包括人力、种子、肥料、除草剂、机械、柴油、杀虫剂等）、玉米运输过程经济反馈能值 F_2 （假设采用柴油汽车公路运输，玉米平均运输距离为 300 km）、乙醇生产过程经济反馈能值 F_{3P} 、可更新环境资源 R_3 、不可更新环境资源 N_3 、DDGS 生产装置经济反馈能值 F_{3W} 、污水处理装置经济反馈能值 F_{3D} 以及循环回用装置经济反馈能值 F_{3R} 。假设乙醇生产厂一年开工时间为 8000 h，乙醇生产能力 $119.1 \times 10^6 \text{ kg} \cdot \text{a}^{-1}$ 。

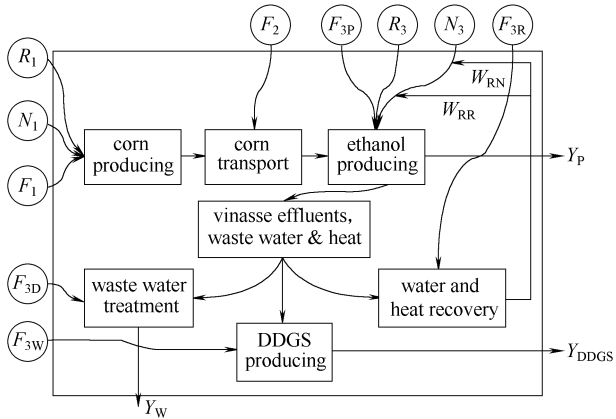


图 3 玉米燃料乙醇生产能值系统图

Fig. 3 Emergy flow chart of corn fuel ethanol

乙醇生产过程产生的废物分成三部分，近似三部分物流或能流的分配系数为 1/3。经过循环回收装置的物流或能流亦被分割成两部分，其中清洁冷凝水、滤液作为可更新资源 W_{RR} 循环利用，废热作为不可更新资源 W_{RN} 回收利用，本文假设两部分各物流或能流的分配系数为 1/2。由第 1 节能值计算方法可得：

主产品乙醇的输出能值

$$Y_P = R_1 + N_1 + F_1 + F_2 + F_{3P} + R_3 + N_3 \quad (5)$$

副产品 DDGS 的输出能值

$$Y_{DDGS} = (R_1 + N_1 + F_1 + F_2 + F_{3P} + R_3 + N_3) \times \frac{1}{3} + F_{3W} \quad (6)$$

达标废水的输出能值

$$Y_W = (R_1 + N_1 + F_1 + F_2 + F_{3P} + R_3 + N_3) \times \frac{1}{3} + F_{3D} \quad (7)$$

循环回收利用的可更新资源的能值

$$W_{RR} = \left[(R_1 + N_1 + F_1 + F_2 + F_{3P} + R_3 + N_3) \times \frac{1}{3} + F_{3R} \right] \times \frac{1}{2} \quad (8)$$

循环回收利用的不可更新资源的能值

$$W_{RN} = \left[(R_1 + N_1 + F_1 + F_2 + F_{3P} + R_3 + N_3) \times \frac{1}{3} + F_{3R} \right] \times \frac{1}{2} \quad (9)$$

由系统能值输入数据^[12]计算可得 Y_P 为 $4.92 \times 10^{12} \text{ seJ}$ ； Y_{DDGS} 为 $1.93 \times 10^{12} \text{ seJ}$ ； Y_W 为 $1.67 \times 10^{12} \text{ seJ}$ ； W_{RR} 为 $8.36 \times 10^{11} \text{ seJ}$ ； W_{RN} 为 $8.36 \times 10^{11} \text{ seJ}$ 。玉米燃料乙醇生产过程能值输入和输出列于表 2。

表 2 玉米燃料乙醇生产过程能值分析

Table 2 Results of emergy analysis of corn fuel ethanol			
Energy type		Process and product	Emergy/seJ
emergy input	corn producing		3.31×10^{12}
	corn transport		2.04×10^{11}
	ethanol producing		1.76×10^{12}
emergy output	ethanol		4.92×10^{12}
	DDGS		1.93×10^{12}
	waste water		1.67×10^{12}

根据能值评价指标^[12-13]，可对玉米燃料乙醇生产过程可持续性等方面进行评价，包括乙醇能值转换率 Tr_P ，能值冗余指标 Em_{dis} ，能值产率 EYR ，环境负荷率 ELR ，废物处理能值效率 $WTEE$ 以及可持续发展指标 EIS ，分别如式(10)~式(15)所示，结果如表 3 所示。

$$Tr_p = \frac{Y_p}{En_p} \tag{10}$$

$$Em_{dis} = \frac{Y_w}{M_p} \tag{11}$$

$$EYR = \frac{Y_p + Y_w}{\sum_{i=1}^3 F_i} \tag{12}$$

$$ELR = \frac{\sum_{i=1}^3 N_i + \sum_{i=1}^3 F_i}{\sum_{i=1}^3 R_i + W_{RR} + W_{RN}} \tag{13}$$

$$WTEE = \frac{W_{RR} + W_{RN} + Y_{DDGS}}{F_{3W} + F_{3R} + F_{3D}} \tag{14}$$

$$EIS = \frac{EYR}{ELR} \tag{15}$$

表 3 玉米燃料乙醇生产系统能值指标
Table 3 Emergy indexes of corn fuel ethanol
production system

$Tr_p / \text{seJ} \cdot \text{J}^{-1}$	$Em_{dis} / \text{seJ} \cdot \text{kg}^{-1}$	EYR	ELR	WTEE	EIS
1.66×10^5	1.76×10^{12}	1.77	2.15	10.22	0.82

乙醇能值转换率代表了系统生产单位乙醇所消耗的能值数量，可衡量系统效率及成本，乙醇能值转化率越低，系统生产成本就越低，生产效率就越高；系统废弃能值冗余指标考虑了排除废物对环境造成的影响，此指标越大，该生产系统对环境造成的压力就越大；能值产率可表明乙醇生产系统经济竞争力，其值越大，开发效益越高；环境负荷率代表了生产过程系统利用环境服务的情况，系统利用的环境服务越多，环境负荷率 ELR 就越小，对环境产生的压力也越小；废物处理能值效率指数越高，说明废物处理过程单位经济反馈能值投入对社会经济系统的净利润越高。在乙醇生产过程废物处理量一定的情况下，可通过增大废水、废热循环利用量 ($W_{RR} + W_{RN}$) 以及蒸发浓缩生产 DDGS，来提高废物处理能值效率指数；本系统可持续发展指数为 0.82 (根据生态学上的规定， $EIS < 1$ 时，为消费型经济系统，不可持续)，因而上述玉米燃料乙醇生产系统是不可持续的。应该指出，本文计算的可持续发展指数仍小于 1，但远远大于文献值^[5] 0.15，这是因为本研究在对玉米燃料乙醇生产系统能值分析时，考虑了废物的处理、循环利用及最终废弃处置等过程。

3 结 论

对于复杂化工过程系统，系统输出流股以及系

统内部流股 (包括循环流股) 能值的计算直接影响能否正确反映系统的结构、功能特征、能量转换关系以及能值指标评价结果可靠性等问题。本文通过系统能量图定量系统内外的能流、物流分布和能量分配系数，在能值运算的基本法则基础上，提出了循迹法，以确定各种系统输入能值在各个流股中的分配并准确计算系统各流股能值，方法简便易行，可有效解决复杂系统能值计算问题。将能值计算方法应用于具体的工业产品生产系统——玉米燃料乙醇生产，建立了玉米燃料乙醇生产能值系统图，采用循迹法确定玉米燃料乙醇生产系统输入能值在各个流股中的分配并计算各主要流股的能值，定量评价了该生产系统的可持续性。通过对各能值指标的计算，得出本文列举的玉米燃料乙醇生产方式是不可持续的。

符 号 说 明

- EIS——可持续发展指标
- ELR——环境负荷率
- Em_{dis} ——能值冗余指标， $\text{seJ} \cdot \text{kg}^{-1}$
- En_p ——主产品乙醇的能量，J
- EYR——能值产率
- F_1 ——玉米生产过程经济反馈能值，seJ
- F_2 ——玉米运输过程经济反馈能值，seJ
- F_{3D} ——污水处理装置经济反馈能值，seJ
- F_{3R} ——废水废热回收装置经济反馈能值，seJ
- F_{3W} ——DDGS 生产过程经济反馈能值，seJ
- M_p ——主产品乙醇的质量，kg
- N_1 ——玉米生产过程不可再生环境资源的能值，seJ
- N_3 ——乙醇生产过程本地不可更新资源能值，seJ
- R_1 ——玉米生产过程可再生环境资源的能值，seJ
- R_3 ——乙醇生产过程本地可更新资源能值，seJ
- Tr_p ——乙醇能值转换率， $\text{seJ} \cdot \text{J}^{-1}$
- W_{RN} ——循环回收利用的不可更新资源的能值，seJ
- W_{RR} ——循环回收利用的可更新资源的能值，seJ
- WTEE——废物处理能值效率
- Y_{DDGS} ——副产品 DDGS 的输出能值，seJ
- Y_p ——主产品乙醇的输出能值，seJ
- Y_w ——达标废水的输出能值，seJ

References

[1] Ouattara A, Pibouleau L, Azzaro-Pantel C, Domenech S, Baudet P, Yao B. Economic and environmental strategies for process design [J]. *Computers and Chemical Engineering*, 2012, **36**: 174-188

[2] Berhane H G, Gonzalo G G, Laureano J, Dieter B. A

- systematic tool for the minimization of the life cycle impact of solar assisted absorption cooling systems [J]. *Energy*, 2010, **35** (9): 3849-3862
- [3] Bjork H, Rasmuson A. A method for life cycle assessment environmental optimisation of a dynamic process exemplified by an analysis of an energy system with a superheated steam dryer integrated in a local district heat and power plant [J]. *Chemical Engineering Journal*, 2002, **87** (3): 381-394
- [4] Zhang Zhishan (张治山), Yuan Xigang (袁希钢). Net energy analysis of corn fuel ethanol life cycle [J]. *Environmental Science* (环境科学), 2006, **27** (3): 437-441
- [5] Chen Dingjiang (陈定江), Hu Shanying (胡山鹰), Zhu Bing (朱兵), Jin Yong (金涌), Du Fengguang (杜风光). Discussion about developing patterns of circular economy for biomass-based energy and chemical industry [J]. *Modern Chemical Industry* (现代化工), 2007, **27** (7): 5-8
- [6] Jin Yong (金涌), Wei Fei (魏飞). Sustainable development and ecological process engineering [J]. *The Chinese Journal of Nonferrous Metals* (中国有色金属学报), 2004, **14** (S1): 1-12
- [7] Allen D T, Shonnard D R. Green Engineering Environmentally Conscious Design of Chemical Processes [M]. Upper Side River, NJ: Prentice Hall PTR, 2002
- [8] Narodslawsky M, Krotscheck C H. What can we learn from ecological valuation of processes with the sustainable process index (SPI) -the case study of energy production systems [J]. *Journal of Cleaner Production*, 2004, **12**: 111-115
- [9] Odum H T. Environmental Accounting: Emery and Environmental Decision Making [M]. New York: John Wiley&Sons, 1996
- [10] Brown M T, Herendeen R A. Embodied energy analysis and emery analysis: a comparative view [J], *Ecological Economics*, 1996, **19**: 219-235
- [11] Zhang Zhishan (张治山), Yuan Xigang (袁希钢). Carbon balance analysis of corn fuel ethanol life cycle [J]. *Environmental Science* (环境科学), 2006, **27** (4): 616-619
- [12] Hu Zunyan (胡尊燕). Study on the emery-based sustainability assessment and calculation methods of chemical industrial system [D]. Tianjin: Tianjin University, 2009
- [13] Dong Xiaobin, Ulgiati Sergio, Yan Maochao, Zhang Xinshi, Gao Wangsheng. Energy and emery evaluation of bioethanol production from wheat in Henan Province, China [J]. *Energy Police*, 2008, **36**: 3882-3892