

主编 袁晴棠 金涌

化工与材料'99



中國工程院

化工、冶金与材料工程学部
第二届学术会议论文集

1999年10月11—13日

北京·清华园

25721
500
12
1

化工与材料'99

——化工及相关材料工业节能、
降耗、环保领域新一代工艺与工
程学术讨论会



中国工程院

化工、冶金与材料工程学部
第二届学术会议论文集

1999年10月11-13日

北京·清华园

中国工程院化工、冶金与材料工程学部

第二届学术会议委员会成员

本届会议的领导机构由顾问委员会和学术委员会组成。

顾问委员会

主任：侯祥麟

委员：王淀佐、师昌绪、严东生、邵象华、吴中伟、李东英、

李恒德、黄培云

学术委员会

主任：殷瑞钰

委员：（化工组）李大东、李正名、金涌、徐承恩

（冶金组）陆钟武、张寿荣、张国成

（材料组）左铁镞、汪旭光、沈德忠、周廉

（委员排名以姓氏笔划为序）

本届会议的组织工作委托组成下列组织委员会负责。

组织委员会

主任：袁晴棠

执行主任：金涌

委员：李大东，时铭显，袁渭康，徐端夫等

前 言

在迎接 21 世纪知识经济的挑战中,化工及材料工业将在国民经济和社会发展中起到重要的基础性作用,如何进一步推进技术进步实现可持续发展是促进我国经济振兴发展的紧迫任务之一。为此中国工程院化工、冶金与材料工程学部将第二届学术会议的主题定为“研讨化工及相关材料工业节能、降耗、环保领域的新一代工艺与工程学术问题”是十分及时和必要的。期望在这一领域的技术创新、过程和设备的更新换代中,加速原始创新思想在本学科领域内的相互借鉴,以达到促进新技术的实验研究、中试开发和工业转化的目的。

本届会议是中国工程院化工、冶金与材料工程学部的系列学术活动之一。会议的论文集共收录论文 145 篇,内容涉及反应过程、分离过程的新设备、新工艺、过程的控制、监测及软件设计,涵盖了化工、材料、催化剂、能源、环保等诸多学科领域,希望能为今后的学术研究与工业开发提供借鉴与参考。

本次会议得到了有关院士、专家、学者及工业界人士广泛的支持,此外还有大量中青年学者的参与及产业界的重视,达到了“为本学部院士创造优良的学术活动环境,并团结广大中青年学者、专家共同参与,成为老中青学者进行学术交流的纽带与桥梁”的目的。

此次会议在筹办过程中得到了学部主任殷瑞钰院士,副主任李大东院士、汪旭光院士及常委会的直接指导,还得到了中国石化集团公司和中国石油天然气集团公司的大力支持,高战军、魏飞、王金福、汪展文、杨俊、王焱、谢晓峰等同志也做了大量的组织工作,在此一并表示感谢!

袁晴棠

金 涌

1999. 10.

目 录

大会报告

反应器的在线辨识和优化.....	袁渭康	周兴贵(1)
气固超短接触下行床反应器研究与开发.....	邓任生	金涌(9)
新过程开发几例.....	袁权	马小军 吴迪镛(19)
迎接二十一世纪对我国炼油企业的挑战.....	李大东	蒋福康 闵恩泽(21)
我国石油化工技术进展与展望.....	袁昕棠	(33)

化学反应工程与技术

面向环境保护和低品位资源利用的人为非定态反应技术

.....	李成岳	陈标华	吴慧雄	陈晓春	牛学坤(41)
-------	-----	-----	-----	-----	---------

超重力多相流传递反应技术——面向二十一世纪的化工技术

.....	郑冲	郭锴	郭奋	陈建峰(45)
-------	----	----	----	---------

过氧化氢异丙苯在不同催化剂上催化氧化丙烯.....

.....	王晓晗	卢冠忠(49)
-------	-----	---------

大型乙苯脱氢轴径向二维流动反应器开发研究.....

.....	朱子杉	徐志刚	王娟	张成芳(53)
-------	-----	-----	----	---------

加压三相鼓泡淤浆床环氧乙烷工业试验反应器模拟及工程分析.....

.....	王弘轼	朱炳辰(57)
-------	-----	---------

加压三相鼓泡淤浆床环氧乙烷合成反应器数学模拟——计入液相部分返混及颗粒沉降

.....	王弘轼	朱炳辰(61)
-------	-----	---------

用于离子膜食盐电解过程的氧气扩散电极的研究.....

.....	王晓琳	赵杰(65)
-------	-----	--------

芒硝法生产硫酸钾工艺中能耗与原料转化率的关系

.....	冯新	刘畅	吉晓燕	陈栋梁	陆小华(69)
-------	----	----	-----	-----	---------

光催化膜反应器的开发与应用.....

.....	范益群	史载锋	徐南平	时钧(73)
-------	-----	-----	-----	--------

超短接触催化裂解过程中的焦炭沉积规律 I、结焦过程的物理模型

.....	邓任生	魏飞	邓欣	金涌(77)
-------	-----	----	----	--------

高密度循环流化床丙烯催化反应热态.....

.....	万晓涛	魏飞(83)
-------	-----	--------

活性污泥法石化工业废水处理研究——II 动力学研究

.....	范轶	胡宇华	王麒	陈军	刘铮	丁富新(93)
-------	----	-----	----	----	----	---------

级间逆流连续催化重整技术.....

.....	景山	王金福	胡庆元	金涌	马燮琦	高丽萍(97)
-------	----	-----	-----	----	-----	---------

馏分油催化裂解过程中焦炭沉积规律 II、结焦过程的动力学模型

.....	邓任生	魏飞	邓欣	金涌(101)
-------	-----	----	----	---------

三相循环流化床中的气液相界面积和传质系数的研究

.....	杨卫国	王金福	王铁峰	金涌(105)
-------	-----	-----	-----	---------

锌改性 HZSM-5 催化剂上的丙烷芳构化.....

.....	陈军	张臻	康慧敏(109)
-------	----	----	----------

应用裂解气相色谱对生物质快速裂解的研究.....

.....	郭艳	魏飞	王焱	金涌(113)
-------	----	----	----	---------

由合成气生产二甲醚过程反应协同作用的研究

.....	王志良	王金福	刁杰	金涌	彭向东	B.Toseland(119)
-------	-----	-----	----	----	-----	-----------------

湍流气粒两相流的颗粒动力学模型.....

.....	陈新国	徐春明(123)
-------	-----	----------

催化裂化提升管反应器预提升段流动特征.....	陈新国 徐春明 (127)
水溶性铈磷络合物催化的1—十二碳烯氢甲酰化反应动力学.....	张永强 毛在砂 陈家镛 (131)
超临界异构烷烃与烯烃烷基化反应.....	何奕工 (135)
抗滑落提升管反应器固体颗粒宏观运动特性.....	侯栓第 钟孝湘 许克家 李松年 (139)

新工艺与新技术

非离子极性浮选药剂PAC的研究与开发.....	姚文 (143)
高铈磨浮镍精矿氯化精炼新工艺研究.....	张振健 (149)
铜萃取剂的发展与展望.....	栾和林 (153)
新型铂系贵金属萃取剂PGM类的研究.....	栾和林 姚文 武荣成 (157)
焦化汽油醚化、芳构化改质工艺的试验研究.....	郭国英 黄卫 李为民 单玉华 陈锡武 (163)
过氧化氢氧化法精制焦化汽油.....	单玉华 郭国英 黄卫 李为民 (167)
化工新技术在兰炼催化剂生产装置中的应用.....	毛学文 周天骥 秦松 (171)
用内凝胶法制备氧化钇稳定的氧化锆等离子喷涂粉料.....	李建军 姜长印 万春荣 吴宇平 (175)
TH-06催化剂合成直链烷基苯.....	韩明汉 崔哲 陈卫 王金福 金涌 (179)
超临界流体快速膨胀法颗粒包覆技术.....	王亭杰 (183)
活性污泥法石化工业废水处理研究—I 操作条件的影响.....	范轶 胡宇华 王麒 陈军 刘铮 丁富新 (189)
水热法用于褐煤脱氧及改质煤性质的研究.....	谢晓峰 大木章 前田滋 (193)
多孔陶瓷反应注射模塑的新加工方法研究.....	胡平 L. J. Lee (197)
多功能基因工程菌VG1 (pTU14) 产PHB的碳源代谢特性研究.....	于慧敏 尹进 李红旗 杨胜利 沈忠耀 (201)
充电富集法去除水中盐分的研究.....	陈福明 陆振民 何源清 (205)
新配方汽油对重油加工的影响——碳氢氧三元素物料平衡.....	田原宇 贾生盛 (209)
煤等离子体裂解制乙炔工艺参数的探讨.....	阎玉林 田亚峻 陈宏刚 李凡 张永发 谢克昌 樊友三 (213)
CO合成含氧化合物洁净工艺研究开发.....	许根慧 王保伟 马新宾 李振花 (217)
甲烷和二氧化碳等离子体化学利用的绿色工艺.....	刘昌俊 许根慧 Baldur Eliasson Ulrich Kogelschatz (221)
壳聚糖制备绿色新工艺——微波流态化技术制备壳聚糖.....	宋宝珍 刘菊花 仰振球 王其祥 靳胜英 (225)
长链二元羧酸发酵.....	刘树臣 方向晨 (229)
满足未来石油产品结构新技术——中压加氢裂化技术的开发.....	石亚华 石玉林 聂红 朱义勤 李大东 (235)
喷气燃料临氢脱硫醇RHSS技术的研制开发	

.....夏国富 朱 玫 聂 红 石亚华 李明丰 陶志平 李大东 闵恩泽(239)	
悬浮床催化蒸馏新工艺合成异丙苯.....温朗友 闵恩泽 庞桂赐 于文友(245)	
最大量生产乙烯和丙烯的重油催化热裂解工艺的研究	
.....谢朝钢 施至诚 李再婷 汪燮卿(249)	

萃取、分离及膜技术

集成膜过程.....高从堦(253)	
面向21世纪的溶剂萃取技术.....费维扬(257)	
无机膜的发展现状与展望.....徐南平(261)	
离子电子混合导体膜的研究.....徐南平 李世光 金万勤 黄 培 时 钧(269)	
搅拌交变电场化学及其应用.....徐志昌(273)	
氯化铵焙烧法处理攀西稀土矿低锰矿泥的研究	
.....池汝安 朱国才 田 君 徐盛明 张志庚(279)	
氯化铵焙烧法从中品位氟碳铈精矿提取稀土的研究	
.....朱国才 田 君 池汝安 徐盛明 张志庚(283)	
攀西稀土矿低锰矿泥氯化浸出液中RE与Mn的提取与分离	
.....田 君 池汝安 朱国才 徐盛明(287)	
稀型乳状液膜法的工业应用.....王士柱 何培炯 矢永睿(291)	
材料浸润性能对萃取柱性能的影响.....李洪波 骆广生 费维扬 汪家鼎(295)	
电场强化萃取传质过程的研究.....骆广生 江伟斌 翟素玲 刘建刚 汪家鼎(299)	
分子筛NaX、CaX吸附脱除油品中低含量芳烃的热力学平衡及动力学研究	
.....朱慎林 金卫东(303)	
减压侧线馏分油中碱氮化合物的萃取溶剂选择.....朴香兰 朱慎林(307)	
糖与蛋白质泡沫分离技术研究.....殷 钢 周 蕊 李 琛 刘 铮 袁乃驹(311)	
从制药废液中回收乙腈与DMF.....丁 立 周荣琪 段占庭(315)	
交变电场下离子交换色谱传质特性研究.....王东海 伊 进 金卫华 刘 铮(319)	
中性或弱碱性条件下络合萃取酚类物质的可行性研究	
.....张 伟 杨义燕 戴猷元 沈 复(323)	
二氧化硫浸出软锰矿制硫酸锰的研究.....张 昭 刘立泉 彭少方(327)	
催化精馏制备碳酸二甲酯的研究.....王 泳 徐爱民 姜忠义 韩金玉(331)	
三七中皂苷单体的分离纯化.....韩金玉 诸巧伟 沈鹏宇(335)	
渗透蒸发过程脱除水溶液中苯的研究...姜忠义 高 蓉 丁宇慧 徐海全 刘家祺(339)	
智能高分子凝胶膜及其在化工分离中的应用前景.....陈欢林 吴礼光(343)	

材料及催化剂

YS一系列银催化剂的工业开发和应用.....金积铨(347)	
无胺体系高硅铝比丝光沸石合成与表征.....刘希尧 祈晓岚 王 站(351)	
油墨连结料性质与制备过程的关系.....周 震 杨丽珍 赵贤淑 孙文贤 李密丹(355)	

印刷适性与乳化胶印油墨的关系.....	周 震	李密丹	李翠荣	(359)
联苯型液晶中间体合成研究.....	李晓莲	王 毅	童志彪	任国度(363)
纳米Pentasil型沸石.....	王祥生	王学勤	郭新闻	(367)
铝工业废旧阴极材料的综合利用				
.....	邱竹贤	翟秀静	卢惠民	王兆文 李 冰 李 卫(371)
纳米级氧化锌的制备.....	商连弟	李家琛	李亚君	郭英凯 赵春艳(375)
浸渍用羧基丁腈胶乳的开发.....			席永盛	黄立本(379)
高效节能乙苯脱氢催化剂的开发及工业应用.....			王福善	(383)
高负荷裂解汽油一段加氢LY-9801催化剂研制开发.....		李斯琴	门晓棠	(387)
Al ₂ O ₃ -ZrO ₂ 系共晶组成研究.....	高振欣	黄振武	梁兰芳	(391)
微观图像技术在超细材料粒度分析中的应用.....	暴宁钟	冯 新	陆小华	刘 畅(395)
非晶态合金催化剂的制备与应用研究.....		陶庭树	唐 忠	张 帆(399)
光催化剂净化环境.....	李阳兴	严玉顺	姜长印	万春荣 朱永睿(403)
高密度高活性球形氢氧化镍的晶体结构与电活性之间的关系				
.....	姜长印	杜晓华	万春荣	张泉荣(407)
炭纳米管储氢性能初步研究				
.....	毛宗强	徐才录	阎 军	梁 吉 孙公敏 魏秉庆 吴德海(411)
以β-Ni(OH) ₂ 为先驱体合成高活性层状LiNiO ₂				
.....	万春荣	李阳兴	李建军	姜长印 应皆荣(415)
微生物Pseudomonas stutzeri 1317合成的聚羟基脂肪酸酯的结构与性能表征				
.....	贺文楠	徐 军	张增民	陈国强(419)
微生物合成聚羟基脂肪酸酯——环境友好的高分子材料合成方法				
.....	贺文楠	徐 军	张增民	陈国强(423)
可生物降解聚合物PHB生物相容性及降解研究....	蒋凌飞	袁晓辉	胡 平	王常勇(427)
聚合墨粉的制备与表征.....	杨 俊	魏 飞	金 涌	王亭杰(431)
利用水热技术在硼酸铝晶须表面包覆氧化铬薄膜.....	向 兰	和天英	男 坂根幸治	(435)
锌改性丙烷芳构化催化剂的混合法制备.....	陈 军	张 葵	康慧敏	(439)
超高分子量聚乙烯材料改性及其在工业中的应用.....		胡 平	吕荣侠	(443)
一种新型聚合物(PTT-聚对苯二甲酸丙二醇酯)的工业开发及其巨大的应用前景				
.....			瞿国华	(447)
非等温CO ₂ 等离子体共聚及对聚合物合金的增容改性.....	盛 京	刘湘宁	高晓莉	(451)
高放废液中新型提铈离子筛的研究.....	颜庭政	丛培君	王榕树	(455)
聚丙烯纤维增强水泥砂浆.....	裴梅山	王笃金	胡先波	徐端夫(459)
快速凝固Ni-Al-Cr-Fe合金微结构与催化性能				
.....	张海峰	王爱民	李 宏	宋启洪 丁炳哲 胡壮麒(463)
加快新催化剂的开发迎接21世纪对石化工业的挑战.....				侯笑生(467)
乙烷氧氯化制氯乙烯反应性能的研究 I. Cu, K, Ce对乙烷氧氯化性能的影响				
.....	冯海强	南秀琴	尹文龙	朱洪法(477)

层柱托石重油催化热裂解催化剂的研制

.....陈振宇 关景杰 虞志庆 刘清林 汪燮卿(481)	
汽油清净剂RP97的性能与应用.....张欣 徐燕声 郭 肇(485)	
含氮聚酯型柴油降浊剂的研制.....黄燕民 朱同荣(491)	
绿色涂膜尿素.....刘光利 曹兰花 虎希柏 边淑华(493)	

设备、模拟、节能、环保及其它

微波消解—二苯碳酰二肼分光光度法测土壤中微量铬

.....孙晓娟 金凤明 方云如 宋 丹(497)	
高声强声波除灰技术的研制及其在乙烯裂解炉上的应用.....张东平 姚 玮(501)	
浓淡燃烧技术在热电厂燃煤锅炉上的应用.....张洪权 张秀廷 白 琳(505)	
方圆型气升式反应器中静态混合器和机械搅拌对高粘度非牛顿流体传递性能的影响吕效平 丁 健 王延儒 时 钧(509)	
固液平衡时相态种类及个数确定的通用方法吉晓燕 冯 新 陆小华 张吕正 王延儒 时 钧(513)	
NS导向提馏塔板的结构特点及工业应用田原宇 王建村 石泰岭 刘维群 刘洪恩 魏玉东(517)	
提馏塔板性能工业四因素模糊综合评价法及其应用.....田原宇 刘清毅(521)	
新型提馏专用塔板——NS导向提馏塔板的流体力学性能.....田原宇 石泰岭(525)	
撞击流性质及其应用.....伍 沅(531)	
测定搅拌功率方法的比较和分析.....禹耕之 王 蓉 毛在砂(535)	
吸附材料及过程的计算机分子模拟设计.....汪文川 金文正 曹达鹏(539)	
用青霉菌丝体吸附重金属离子的研究.....陈 鹏 谭天伟(543)	
神经网络—遗传算法在分离系统优化中的应用...高 瑛 石 磊 匡国柱 姚平经(547)	
利用遗传—Aloplex混合算法进行热换网络综合的研究.....李绍军 姚平经(551)	
工业吸收式热变换器系统建模及软件开发.....隋 军 马学虎 李淞平 袁 一(555)	
21世纪的精细化工.....杨锦宗 张淑芬(559)	
氧化液相催化氧化孔雀绿隐色体的环境友好工艺研究高文涛 张淑芬 杨锦宗 唐炳涛(563)	
烷基化装置扩建,“三废”排放设施改造及成效.....刘生基 王洪军(567)	
TAL9509在火炬自动点火管理系统的应用与探讨.....石玉学(571)	
化工综合污水生物脱氮工艺小试研究.....赵旭涛 刘天禄(575)	
催化氧化法处理有机助剂废水.....朱雅杰 刘发强(579)	
芳烃异构化装置节能测试与优化.....田红岩 顾瑞仁 胡异冲(583)	
含“极微蒸汽压”范围统一关联方法的研究.....陈 军 马沛生(587)	
生态工业与生态工业园区的研究与进展.....李有润 沈静珠 胡山鹰 陈定江(591)	
换热网络同温集匹配优化法.....何 宇(595)	
能量利用基本过程分析法(HEU法).....何 宇(599)	

企业能量审计方法.....	何 宇 (603)
高表面活性碳吸附储氢基础及其规模化可行性.....	周 理 (607)
MgAlFe复合氧化物脱除低浓度SO ₂ 的性能.....	陈银飞 黄海凤 葛忠华 吕德伟 (611)
新一代资源回收·循环集成技术与生态化产业体系.....	陈家镛 张 懿 刘会洲 (615)
聚丙烯纤维制造中的节能技术.....	胡先波 王笃金 徐瑞夫 (619)
分子煤化学的构想及其发展前景	魏贤勇 宗志敏 秦志宏 冀亚飞 刘建周 伍 林 陈清如 (623)
高温熔盐电解过程电催化节能的研究.....	刘业翔 杨建红 谢 中 (629)
从 CIMS 走向供应链的动态优化.....	杨友麒 (633)
作者索引.....	(639)

反应器的在线辨识和优化

袁渭康 周兴贵

(华东理工大学反应工程国家重点实验室, 上海 200237)

摘 要 本文以壁冷管式固定床反应器为典型, 论述了对已有反应器进行在线辨识和在线优化的一些基本方法。除讨论在线辨识和在线优化的重要性外, 分别叙述了三种不同模型化方法: 机理性模型, 经验性模型和复合模型。这三种方法的共同点是, 必须根据所选用的模型估计其相应参数, 然后根据类间的原理实现优化。利用 Karhunen-Loeve 展开为预处理器的 KL-NN 模型可以有效减维, 对分布参数型的反应器的在线辨识和在线优化尤为适用。

关键词 反应器, 壁冷管式固定床, 在线, 辨识, 优化, KL-NN 模型。

化学反应器是过程工业的核心设备: 不但在化学工业, 而且在冶金、材料、石油和轻工等领域, 在环境工程中也有广泛应用。

化学反应器中除进行化学反应外, 还必然伴有传热、传质和动量传递过程, 有些过程还有诸如相变化和物理变化(如增稠)等复杂行为, 而且多数过程均需考虑反应的热效应。再者, 反应物的消失和反应产物的生成常常构成了一个交叉影响的组分网络, 其总体行为十分复杂。概而言之, 化学反应器内进行的是一类典型的非线性过程, 影响因素庞杂, 模型化困难。

对于这类过程, 工业开发方法往往是根据过程的特殊性以及工程问题的约束性使之简化, 从而组织实验以获得一个或少数几个敏感因素的效应, 在把握全局的情况下, 使之有大致不差的结果^[1]。这是一种相当行之有效的方法。但是也应看到, 由于上面所说的过程复杂性, 所开发的反应器必然偏离优化条件(设备条件和操作条件)。已有的设备可以作一些改进以提高其操作性能, 但通常已不可能大动; 而通过操作优化, 还是可以发掘在已有设备条件下的优化操作条件, 这对于量大面广的已有反应器是十分有效的。但为了优化, 必须对对象进行辨识。理想的辨识和优化应在线地进行。如果出于条件的限制, 采用离线结合, 也可以获得很好的结果。

一、过程的模型化和多层次模型

“数学模型”是一个近数十年来使用十分频繁的词汇。模型的广泛使用是以计算技术的发展为基础的, 因为几乎所有的非线性模型都必须数值求解。没有计算技术的进步, 模型的广泛应用是不可能的。

模型解决了大量工程问题。但是模型也有不少限制: 对于化学反应器的模型化更有不少具体困难:

(1) 由于过程过于复杂，模型建立不得不对实际过程作出大量简化。有些必然是过度的简化。这是模型的不确定性。

(2) 模型包含几个或更多参数，这些参数的实验确定不可避免地存在误差，这是参数的不确定性。

(3) 在过程进行中有些参数会发生变化，如催化剂的活性变化，热交换器的换热系数的变化等。这是过程的时变性。

因而应该看到模型实际上是不可能完全准确可靠。又何况实际操作会因上游生产、市场、供需、原料来源等多种因素而与设计条件有所偏离。这也就体现了在线辨识和在线优化的必要性：根据当时的操作条件进行过程辨识，确定状况，估计参数，然后按当时的条件和所规定的目标逐数实施优化。

“在线”必须体现时间性，即需要迅速进行模型求解，以满足在线需要。优化过程体现了持续地从一个操作态向另一个操作态的过渡，是一种非定态操作。求解速度是对模型结构的一个重要要求。与此不同的是，用于设计的定态模型一般不会有求解速度方面的限制，因此可以允许采用结构较复杂、参数较多的模型。这类模型显然有利于更为确切地描述实际过程。为此，我们应当根据对模型的不同应用目的建立不同层次的模型。应该看到多层次并不存在一个划一的标准。图 1（左）为对模型不同要求的简单示意。确切和简单之间是有矛盾的。图中的问号表示了应从中寻求一个合理的答案。

多层次模型化是一个概念。图 1（右）从一个角度表示了几个模型层次。机理模型是基于对过程化学 / 物理性质的了解，其形式大多是常微分方式或偏微分方程。经验模型多是根据过程的输入 / 输出关系而获得的经验性的参数 / 变量关系，其形式主要是代数方程。

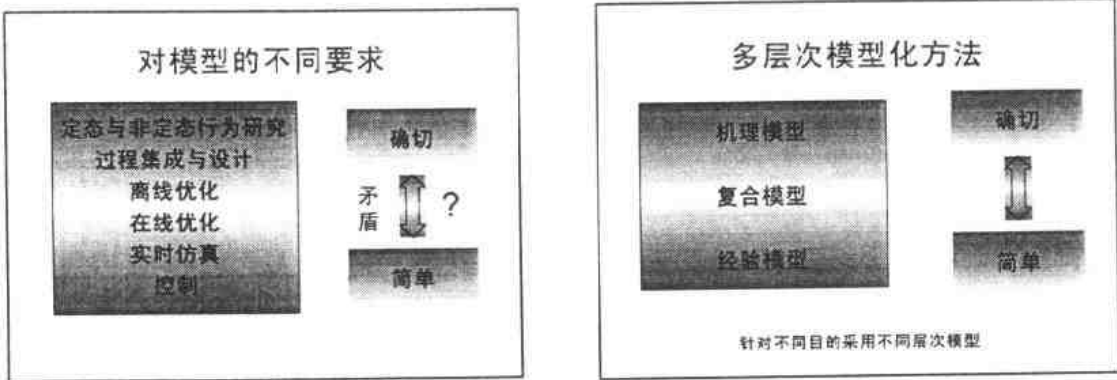


图 1 模型的要求（左）与层次（右）

我们发展的复合模型介于两者之间，即用经验模型获得参数，用相当简单的机理模型进行反应器的定态 / 和非定态模拟，可以兼备机理模型和经验模型的优点。表 1 列出了机理模型和经验模型比较。

表 1 机理与经验模型的比较

模型类型	机理模型	经验模型
基础	守恒方程	数据回归
形式	常偏微分方程	代数方程
主要优点	外推合理性	简单
主要缺点	结构复杂	外推不合理性
用途	模拟, 设计, 离线优化	在线仿真, 控制在线优化

二、基于机理模型的在线优化

通常建立机理模型的原则是相当单纯的。如表 1 中所示, 基本上是基于定态的或非定态的物质和能量守恒方程。对常见的化学反应器而言, 一般都存在温度分布和物系的浓度分布, 即为分布参数系统。这类分布参数系统理论上无穷多个状态, 微分方程正擅长于描述这类系统。

以壁冷式固定床反应器为例。这类反应器应用甚广, 也称多管式反应器。图 2 所示为华东理工大学反应工程国家重点实验室的一个壁冷反应器的流程, 反应管实际上代表

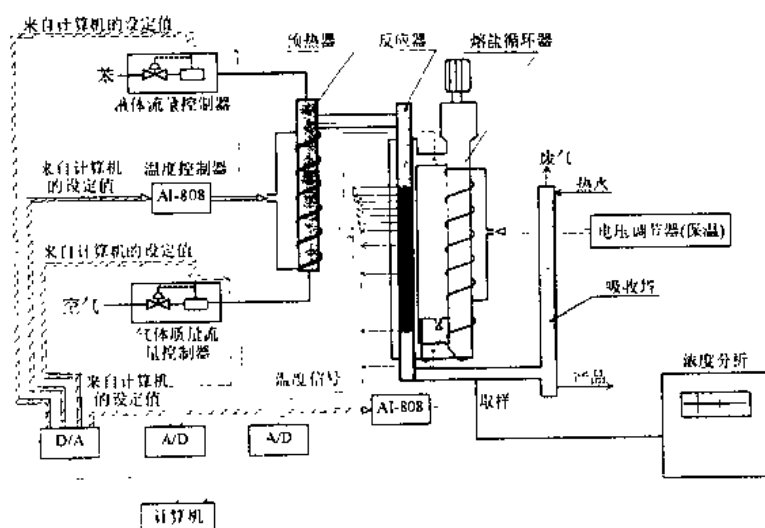
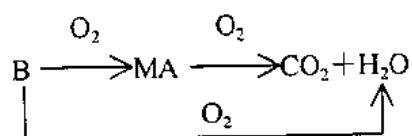


图 2 壁冷式固定床反应器流程图

了多管反应器中的一根管子, 直径为 25mm, 是工业多管反应器中单管的常见尺寸, 高度为 3.4m, 管外有夹套, 通过熔盐循环以移去反应热。反应器内存在轴向和径向的浓度分布和温度分布。取苯(B)在商用矾催化剂上用空气氧化生成顺丁烯二酸酐(MA)为工作反应。经过充分高度简化以后的反应式可表示为



显然这是一个并串联反应。

在管式反应器中进行这一反应的机理模型可见诸于各类教科书及文献，是现成的，这里不予赘述。这里要说明的是，不论何种模型，都存在一定的误差。而且在对过程变量进行测量时还有测量不准、滞后、不可测量等问题。因而反应器内的实际状态需要经状态估计予以确定。我们以 Windesl^[2]的方法为基础发展了这一类过程的状态估计^[3]。对于有初始估计误差的情况，状态估计的结果可以随着时间逼近真实状态，图 3 说明存在轴向温度（左）和浓度及转化率（右）初始估计误差时的状态估计效果，以及与实验数据的比较。

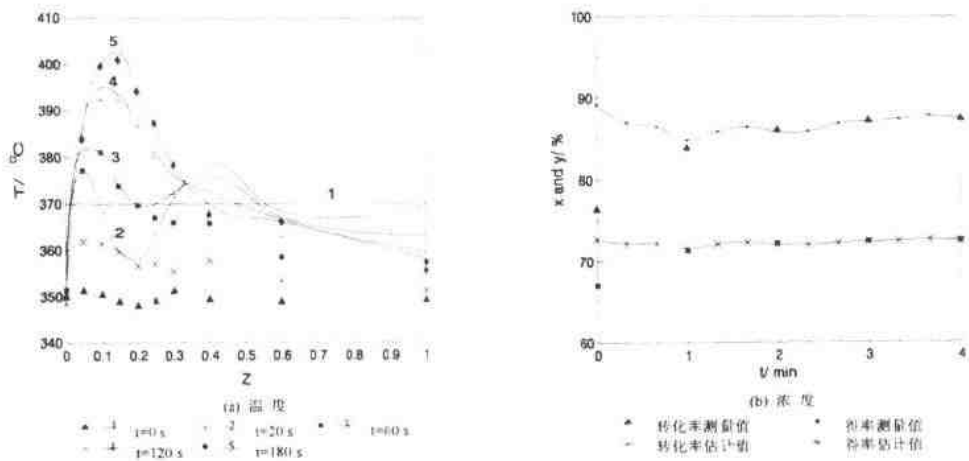


图 3 存在初始估计误差，开车时的温度、浓度状态估计图
(左) 床层内的轴向温度； (右) 反应器出口苯的转化率 X 和 MA 收率 Y

根据估计状态进行模型参数辨识，可以获得更为可靠的模型，作为模型在控制和优化中的实用参数。由于这里的参数已经不仅仅只含有其原始的物理意义，而是涵盖了经过简化的综合结果，具有一定的虚拟性质^[4]。

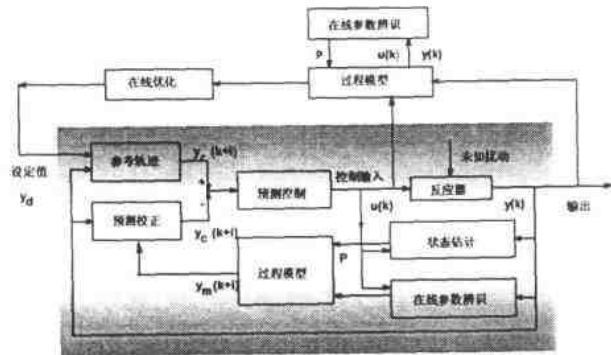


图 4 在线优化实施策略

显然是保证在线优化的基本条件。图 5 是我们在实验室中实施的模型预测控制的一个结果。

图 4 为在线优化实施策略示意。图中的阴影部分为模型预测控制部分，或称控制相，阴影之外为在线优化部分，或优化相——这就是在线优化的两相法概念。与传统的控制不同，优化相时刻变易着设定操作值，供控制相实施控制，而不是先验地确定一个不变的设定操作值。控制相中的过程模型并不限于机理模型，当然也可用经验模型。控制相的控制能力

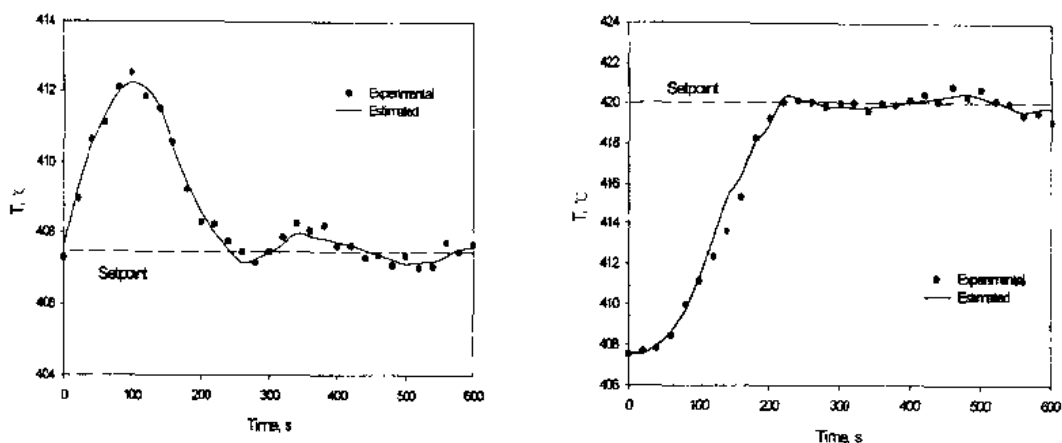


图 5 预测控制结果

(左) 有阶跃扰动的控制响应, (右) 有设定值变化的控制响应

三、基于经验模型的在线优化

顾名思义, 经验模型系根据过程的输入-输出关系而获得的。这种凭借于实验或生产现场所获得的输入-输出量的关联, 通常不包含过程机理方面的贡献。

人工神经网络(ANN)是一种应用其广的经验模型形式。ANN 的通用性强, 具有学习功能, 可以经过“学习”和“训练”用来逼近所有连续的非线性输入-输出关系。但对于有分布参数性质的系统, 由于理论上存在无穷个状态(维), 因此所需的 ANN 的结构就显得十分庞大, “训练”和计算所需时间也就相当可观。对于瞬息变化着的反应器的优化, 由于需要快速的训练和计算, 传统的 ANN 模型的应用就受到了很大限制。图 6a 为一个传统 ANN 的示意。 $U(k)$ 为第 k 步 (表示某一时刻) 的操作变量。在这一时刻以前从反应器采集的 k 步数据 (图中表示了 10 个温度数据和一组气体出口组成数据 $Y(k)$), 输入到图示的 ANN 中, 得到了估计的状态 $\hat{Y}(k+1)$ 。显然, ANN 的主要功能应是预测, 即从 k 步以前的采集数据预测 $k+1, k+2, \dots, k+j$ 。预测 j 步以后的状态是可行的, 但 j 愈大, 预测的可靠性愈差。

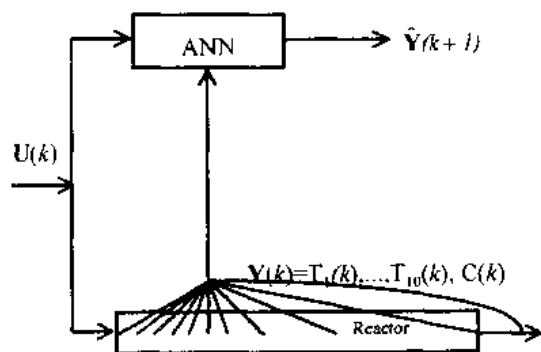


图 6a 传统的神经网络

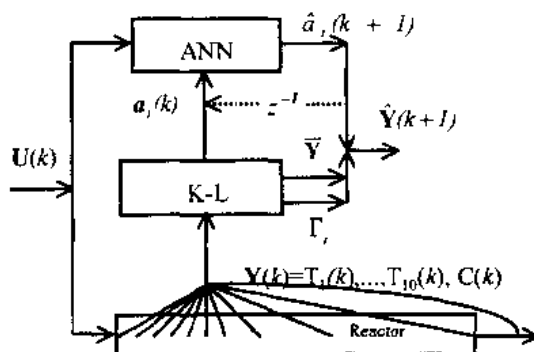


图 6b 与 KL 展开的神经网络

华东理工大学反应工程国家重点实验室针对这一传统 ANN 模型存在的问题进行了专门的研究。我们利用一种很有效的减维方法,即 Karhunen-Loeve (K-L)展开作为神经网络的预处理器。K-L 展开是一种双正交基展开,与其他正交展开法相比,其基函数并非先验地决定,而是根据通过一定的方式生成,即使展开式在项数相同的前提下截断误差最小。从而 K-L 展开在最大程度上实现了减维。对于壁冷固定床反应器,温度预测在最大限度减维以后(即减至一维)已足够准确。出口组成预测降至 2 维时就已足够准确。我们将这种以 K-L 展开作为预处理器的 ANN 模型称作 KL-NN 模型,其学习速度和在保证准确性前提下的预测速度均较之传统的 NN 模型大大提高。图 6(右)所示的为一个 KL-NN 模型的工作流程。所采集的数据经 K-L 展开获得了时均值 $\bar{Y}$ 和特征函数后,再利用 ANN 拟合展开系数。利用 K-L 展开,ANN 模型的结构可大为简化^[5]。图 7 系利用 KL-NN 模型进行预测的一个例子。图中每一步为 20sec,实施的是 20 步预测,即 400 秒预测。图中前 100 步为学习阶段(以淡色背景表示),其后为预测。自上而下为反应器内轴向 10 点温度预测值与实测值的比较。可以看出,这个 KL-NN 模型的预测能力令人满意,而其预测迅速到几乎可以忽略计算时间。可以看出,KL-NN 模型用于模型预测控制必十分有效。

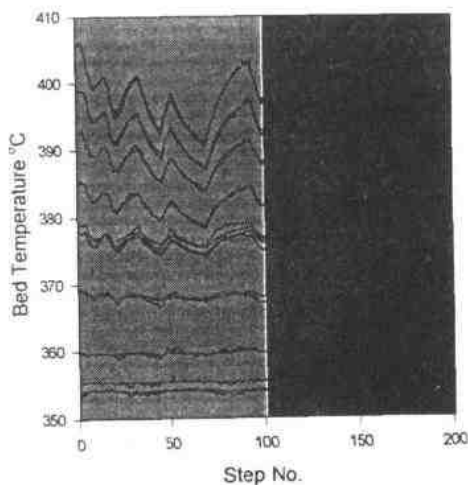


图 7 轴向 10 个温度的 KL-NN 模型预测 (20 步预测, 每步 10 秒)

显然, KL-NN 除可以用于模型预测控制,也可用于在线优化控制。最近我们报导了一种新颖的优化控制方法。与图 4 所示的程序不同,这种优化控制已不存在设定值问题,而是一种在线的约束优化^[6]。

四、复合 (hybrid) 模型

华东理工大学反应工程国家重点实验室最近探索了用复合模型进行反应器在线优化的可行性^[7]。我们的结论是,复合模型对于某些反应过程的在线优化有其显著的优点。

上面已提到,复合模型兼备了机理模型和经验模型的一些有利方面和不利方面。可以选用相当简化了的机理模型,如本文讨论的壁冷管式固定床反应器无疑存在轴向和径向的浓度分布和温度分布,理应采用二维(偏)微分方程型模型表示,但这类方程首先需要获得几个径向的传递参数,这是不易实验获得的;再者偏微分方程求解本身也比较繁复。我们采用的复合模型假定不存在径向分布,即可采用一维模型,这种做法显然在理论上不尽合理,但减少了十分麻烦的模型参数。用经验模型,即 ANN 模型估计剩下的模型参数,如能保证模型的预测性能,问题就变得简单快捷。容易理解,这里所说的剩下的模型参数,必是一种虚拟的、综合的、只具有等效结果的参数,必随操作状态而变,

因而需要在线估计,以保证模型预测结果的等效性。这种复合模型适用于需要进行相当快速的预测的场合如控制、在线优化、实时仿真等。

用 ANN 模型估计简化模型参数的方法非常直观,即用一般的约束优化方法求取 ANN 模型的权系数,使模型估计值与实测值之差为最小。我们用这一复合模型预测了上述固定床反应器的温度分布与“热点”温度,并与实测数据作了比较,如图 8 所示。图示模型预测能力令人满意。

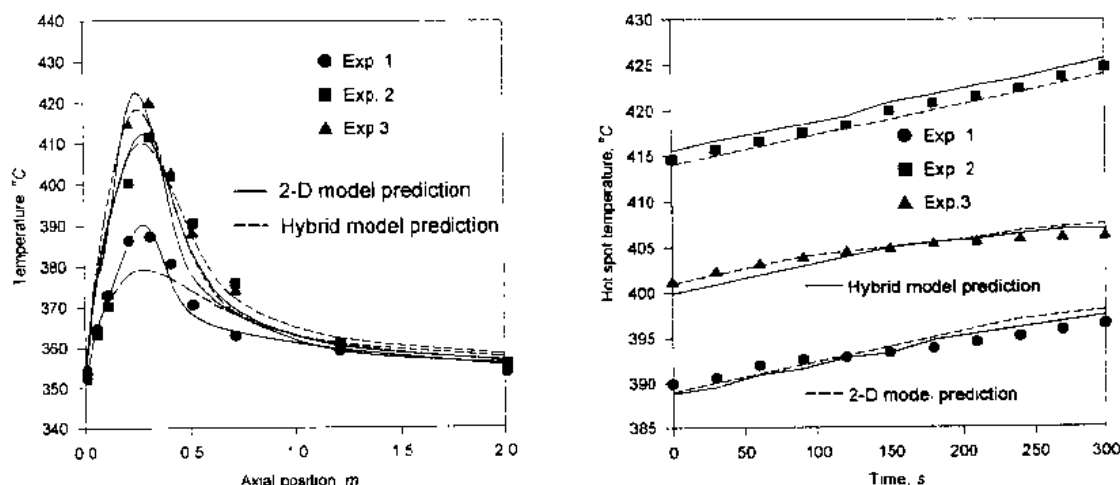


图 8 复合模型预测

(左) 定态二维模型预测与轴向温度实测值的比较

(右) 动态二维模型预测与热点温度实测值的比较

五、后语

上面是对我们在反应器在线辨识和在线优化方面的工作的浅显介绍。我们所用的方法有基于机理模型的,有基于经验模型的,也有兼用两者的复合模型的。由于采用了不同层次,机理成分不同的模型,我们也统称这一方法为多层次模型化方法。用这三种模型达到的目标是统一的,即对已有的反应器(当然也可拓展到其他过程)进行在线的(或为了易于实施而退为离线的)优化。

在我们通过本实验室的一套壁冷管式固定床反应器研究这些方法的后期,我们就把所研究的方法用在一个完全不同的过程中。我们在金陵石化工二厂的万吨环氧丙烷装置中应用了这一优化方法,但最终因限于条件,是离线地予以实施的。这一工艺用气相循环法将丙烯在水相中氯醇化,是一个气液相反应器,过程相当复杂,机理也未完全搞清,当然更缺乏有关参数。对过程进行辨识并作了优化以后效益显著。我们愿以这一事实来结束本文,并借此说明合理的在线辨识和在线优化必可对我国大量存在的现有设备在只付出极低的代价后明显地提高操作的合理性。