

基于多元逐步回归分析的丙烯腈反应器在线优化控制

孙德敏 薛美盛 吴刚 张志刚

(中国科学技术大学自动化系·合肥, 230026)

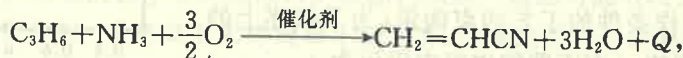
摘要: 本文在简单介绍了丙烯腈生产工艺后, 详细阐述了基于多元逐步回归分析的丙烯腈反应器在线优化控制的原理及其实现. 实际应用结果表明, 在线优化控制可以显著提高丙烯腈收率, 获取巨大的经济效益.

关键词: 丙烯腈反应器; 多元逐步回归分析; 建模; 在线优化控制

1 引言

丙烯腈是生产聚丙烯腈纤维的主要原料, 通常采用丙烯氨氧化法生产, 其生产流程大致可分为反应、回收、精制和制冷等几部分. 流化床反应器是丙烯腈装置的“心脏”, 其收率高低直接影响整个装置的经济效益.

丙烯氨氧化法制丙烯腈的反应流程^[1,2]为: 液态丙烯和液态氨经气化、过热、混合, 由丙烯-氨分布器进入流化床反应器, 压缩空气通过位于丙烯-氨分布器下面的空气分布板进入流化床反应器, 在一定的温度和压力下, 混合气体以一定的速度通过处于沸腾状的微球形催化剂床层, 在催化剂作用下, 反应生成丙烯腈. 主要反应方程为:



此反应为强放热反应.

优化的方法很多, 国内也有许多人做了很出色的工作^[3,4]. 考虑到丙烯腈流化床反应器的复杂性和我们的特长, 我们采用了基于多元逐步回归分析的在线优化控制. 在线优化控制并不需要全过程的机理模型, 所用模型只需在工作点附近有足够精度即可. 我们采用多元逐步回归分析法建立丙烯腈产量的二次多项式模型, 再计算满足各种约束条件的反应器优化操作参数, 并自动跟踪反应器负荷、工艺条件和环境等因素的变化, 在线进行建模、优化计算, 使反应器一直工作在较好的状态, 实现在线优化控制, 以提高丙烯腈收率.

2 独立变量

根据丙烯氨氧化法制丙烯腈的反应机理, 丙烯腈收率受以下因素的影响: 反应温度、空塔线速、氨烯比、空烯比、接触时间、反应器压力、催化剂负荷和催化剂活性等. 我们 1993 年所做的丙烯腈反应器正交优化试验表明, 反应温度、空塔线速、氨烯比、空烯比显著影响丙烯腈收率^[5]; 另外由于空塔线速、反应器压力、接触时间三者紧密相关, 而催化剂负荷、活性等特性变化缓慢, 可以通过在线建模来修正其变化, 所以我们选定反应温度 x_1 , 空塔线速 x_2 , 氨烯比 x_3 和空烯比 x_4 作为建立丙烯腈产量模型时的独立变量. 在一定的反应器负荷下, 通过在线优化控制, 改变独立变量的设定值, 改善反应器的操作, 增加丙烯腈产量, 这样就达到了提高丙烯腈收率的目的.

反应温度、氨烯比和空塔线速对丙烯腈收率的影响见图 1, 图 2 和图 3^[2], 可见选择一组最

优的反应器操作条件并非一目了然。

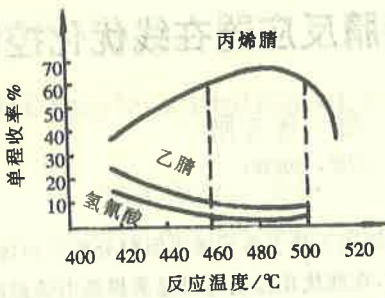


图1 反应器温度对丙烯腈收率的影响

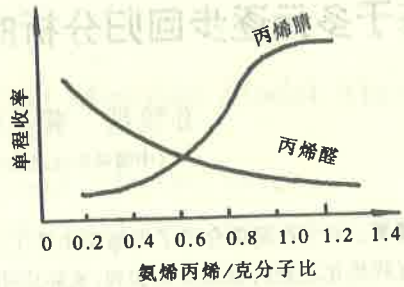


图2 氢烯比对丙烯腈收率的影响

3 数学模型的获取

多元逐步回归分析的基本出发点是按照各自变量对因变量作用的大小即用偏回归平方和的大小来衡量,由大到小逐个将自变量引入回归方程;对已被引入方程的自变量,由于新自变量的引入而变得对因变量的作用不显著时,可以随时从方程中剔除,一直到既不能引入又不能剔除自变量为止,从而得到最优回归方程^[6,7]。

为避免因独立变量量程不同、数量级不同可能给建模带来的不利影响,必须对它们进行归一化处理,也就是对独立变量作如公式(1)的线性变换,公式(1)中 X_i 和 d_i 由 x_i 的量程及反应器操作条件的工艺约束确定;为了叙述上的方便,归一化后得到的 z_i 在下面的内容中仍记为 x_i 。

$$z_i = (x_i - X_i)/d_i, \quad i = 1, 2, 3, 4. \quad (1)$$

如果将丙烯腈产量、反应器出口气体中的尾氧和丙烯醛生成量看成上面四个独立变量的函数,分别记为 $f(x)$, $g(x)$ 和 $h(x)$, 那么,不管其形式如何,在工作点附近我们总可以用二次多项式去拟合它们。考虑到独立变量的平方项和交叉项,引入如下虚拟变量:

$$x_5 = x_1x_1, \quad x_6 = x_2x_2, \quad x_7 = x_3x_3, \quad x_8 = x_4x_4, \quad x_9 = x_1x_2, \quad (2)$$

$$x_{10} = x_1x_3, \quad x_{11} = x_1x_4, \quad x_{12} = x_2x_3, \quad x_{13} = x_2x_4, \quad x_{14} = x_3x_4.$$

另外,考虑到由于反应器负荷变化引起的丙烯腈产量的变化,再引入丙烯腈反应器负荷作为第15个变量 x_{15} , 并对其进行类似于公式(1)的归一化处理;又因为反应器负荷对反应器出口气体中的尾氧和丙烯醛的生成量几乎没有影响;所以有:

$$f(x) = a_0 + \sum_{i=1}^N a_i x_i, \quad N = 15, \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (3)$$

$$g(x) = b_0 + \sum_{i=1}^N b_i x_i, \quad N = 14, \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (4)$$

$$h(x) = c_0 + \sum_{i=1}^N c_i x_i, \quad N = 14, \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (5)$$

得到一批数据后,可以分别用线性多元逐步回归分析法建立丙烯腈产量、尾氧和丙烯醛的模型。通过引入虚拟变量就可以将非线性多元逐步回归问题用线性多元逐步回归分析法解决。在给定的置信度下,可建立丙烯腈产量、尾氧和丙烯醛的显著性描述方程:

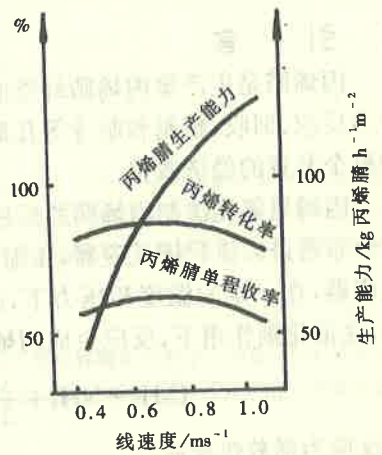


图3 空塔线速对丙烯腈收率的影响

$$\hat{f}(x) = \hat{a}_0 + \sum_i \hat{a}_i x_i, \quad (i \text{ 表示 } x_i \text{ 被引入了回归方程}) \quad (6)$$

$$\hat{g}(x) = \hat{b}_0 + \sum_j \hat{b}_j x_j, \quad (j \text{ 表示 } x_j \text{ 被引入了回归方程}) \quad (7)$$

$$\hat{h}(x) = \hat{c}_0 + \sum_k \hat{c}_k x_k, \quad (k \text{ 表示 } x_k \text{ 被引入了回归方程}) \quad (8)$$

4 在线优化控制的实现

本丙烯腈装置采用横河公司的 CENTUM 集散控制系统控制, 上位机是 YEWCOM 7000 小型机. 在线优化控制软件在上位机上开发、运行.

4.1 丙烯腈产量的计算

由于没有在线分析仪器, 无法在线获得反应器出口气体的组分; 而化验分析是采集一个随机过程的样本点, 结果只具有一定的参考价值. 我们只好通过丙烯腈成品中间槽的三个罐的液位在相邻采样间隔内的差计算两个采样点间的丙烯腈的产量.

4.2 系统纯滞后时间的确定

我们研究了丙烯腈反应器开工时的运行曲线并用相关分析法对正交优化试验期间的数据作过分析, 得到如下结论: 系统的纯滞后时间大约为两小时, 过滤时间也大约为两小时. 为确定反应器操作参数与丙烯腈成品产量之间的对应关系, 在数据处理时必须考虑到系统的纯滞后时间和过渡时间.

4.3 丙烯腈产量建模时的采样周期和样本数

由于丙烯腈装置精制部分的波动、仪表测量误差和一些人为因素的影响, 在反应器负荷、操作参数都恒定时, 相邻的数个采样间隔内的成品丙烯腈产量都可能有一定的波动, 所以用较多采样间隔作为丙烯腈产量建模用采样周期才能真实、准确地反映反应器操作参数和丙烯腈产量的对应关系; 但考虑到系统的动态特性, 采样周期又不能取得太大. 经过实际分析、比较, 我们取采样周期取为两小时. 这样, 一天有 12 点数据. 数学分析和实际比较表明, 用多元逐步回归分析法建模时取约一个月的数据量较为合适, 此时模型的结构、参数的变化都比较平缓, 符合实际情况.

4.4 约 束

我们主要考虑了丙烯腈流化床反应器出口气体中尾氧含量的约束以及丙烯醛的生成量的约束.

在流化床反应器中, 原料从进入反应器到离开只有数分钟时间, 所以反应器操作参数的改变会很快地影响到尾氧值. 为建立尾氧约束方程, 我们以每一个采样间隔 (10 分钟) 点的反应器操作参数和下一个点的尾氧值组成一组数据, 以每天 24 小时共 144 点的数据采用多元逐步回归分析法建立尾氧约束模型.

丙烯醛的生成量只有每四小时一次的化验值, 必须控制在一定的范围内, 我们用大约两个月的化验报表数据, 同样采用多元逐步回归分析法建立丙烯醛约束模型.

4.5 在线优化控制的实现

丙烯腈反应器在线优化控制可以通过以下步骤实现:

- ① 采集现场运行数据;
- ② 生成丙烯腈产量建模用、尾氧约束建模用和丙烯醛约束建模用中间数据;
- ③ 建立丙烯腈产量模型 $\hat{f}(x)$ 、尾氧约束模型 $\hat{g}(x)$ 和丙烯醛约束模型 $\hat{h}(x)$;
- ④ 用最速上升法计算满足尾氧约束和丙烯醛约束的反应器优化操作参数;

⑤ 现场投运(改变各独立变量的设定值);

⑥ 重复上述过程.

5 在线优化控制的应用

在线优化控制已经在某化工厂丙烯腈装置上得到了成功的应用. 以某次在线优化控制试验为例, 丙烯腈反应器的平均收率在试验期间比试验前提高了 1.467%, 丙烯单耗平均下降了 1.97%, 氨单耗平均降低了 2.79%. 该装置设计生产能力为 5 万吨/年, 丙烯腈市场价格为 6700 元/吨, 按上述数字计算, 经济效益巨大.

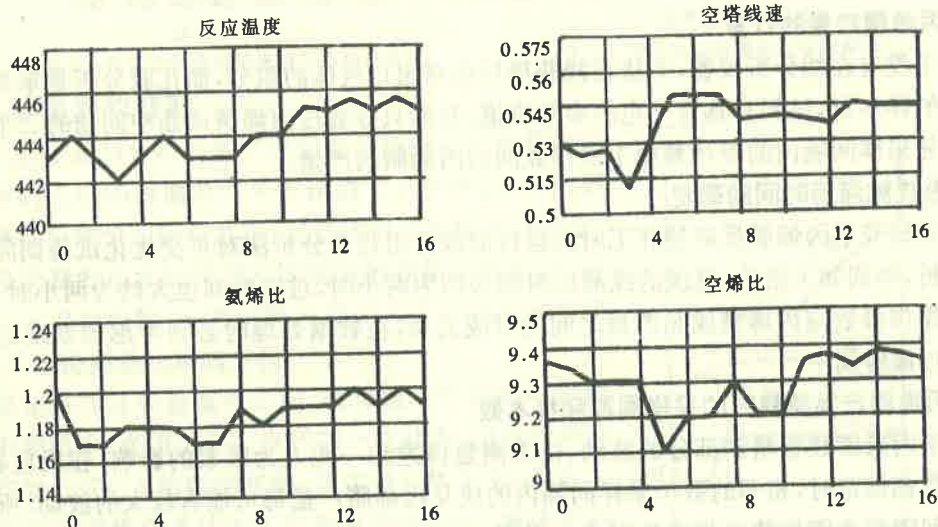


图 4 丙烯腈反应器操作参数调整曲线

从试验开始, 每天两次调整反应器操作参数, 如图 4 所示, 横坐标单位都为 12 小时. 从图中可以看出: 反应温度、空塔线速的调整趋势是提高, 可见较高的温度和线速有利于提高丙烯腈收率, 这和我们从正交优化试验得到的结论是一致的; 由于试验期间反应器不定期地使用两种纯度不同的原料丙烯, 为了获得较高的丙烯腈收率, 只好较为频繁地以较大幅度调整氨烯比和空烯比的值.

图 5 为在线优化控制试验前和试验期间丙烯腈收率的变化曲线, 横坐标单位为 24 小时. 在线优化控制从箭头所指处开始.

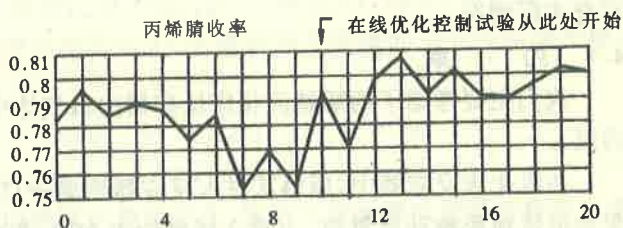


图 5 在线优化控制试验前和试验期间丙烯腈收率的变化曲线

6 结论

在线优化控制的成功应用表明, 在线优化控制可以明显地降低原料丙烯和原料氨的消耗, 并显著地提高丙烯腈收率.

另外, 值得一提的是, 国外在实现反应器在线优化控制时往往要利用在线色(质)谱仪(价值数十万元人民币)在线检测反应器出口气体的组分, 而我们通过对间接计量量的精心补偿、滤波, 摆脱了对在线色(质)谱仪的依赖. 这样除在线优化控制所获的经济效益外, 首先节省在线色(质)谱仪的经济效益就很可观.

参 考 文 献

- 1 洪璋传. 丙烯腈生产工艺进展及开发对策. 现代化工, 1990(4): 27-31
- 2 孙德敏, 吴刚, 张玉柱, 吴福明. 丙烯腈反应器的在线优化控制. 智能控制与智能自动化(第一届全球华人智能控制与智能自动化大会论文集), 北京: 科学出版社, 1993, 2509-2514
- 3 孙德敏. 工程最优化——方法及应用. 合肥: 中国科学技术大学出版社, 1991
- 4 胡泽新, 邵惠鹤. 化工过程计算机优化控制. 化工自动化及仪表, 1993, 20(4): 1-6
- 5 孙德敏, 吴刚, 张玉柱, 薛美盛, 张志刚. 丙烯腈装置流化催化反应器的正交优化. 95'中国控制会议论文集, 北京: 中国科学技术出版社, 1995, 1660-1667
- 6 白新桂. 数据分析与试验优化设计. 北京: 清华大学出版社, 1986
- 7 韦士平. 生产装置调优与节能. 北京: 中国石化出版社, 1992

On-Line Optimization Control of an Acrylonitrile Reactor Based on Multivariable Step-Wise Regression Method

SUN Demin, XUE Meisheng, WU Gang and ZHANG Zhigang

(Department of Automation, University of Science and Technology of China • Hefei, 230026, PRC)

Abstract: After introducing the production technology of acrylonitrile, the theory and realization of on-line optimization control of an acrylonitrile reactor based on multivariable step-wise regression method is described deeply. Practical application tells us, when on-line optimization control is applied, the acrylonitrile production ratio can be increased notably, and great economic benefit can be gotten.

Key words: acrylonitrile reactor; multivariable step-wise regression method; modelling; on-line optimization control

本文作者简介

孙德敏 1939年生. 1964年毕业于中国科学技术大学自动化系, 并留校任教. 现为教授, 博士生导师. 从事自适应控制及其工业应用、优化方法及其工程应用、伺服系统综合等方面的研究工作. 已发表学术论文 50 余篇, 专著两部, 获省部级科技进步二等奖、三等奖 5 项.

薛美盛 1969年生. 1992年毕业于中国科学技术大学自动化系, 1995年获本校控制理论及应用专业硕士学位, 并留校任教. 曾获中国科学技术大学张宗植科技奖学金. 现主要从事工业过程先进控制和优化的研究.

吴刚 1964年生. 1986年毕业于中国科学技术大学系统科学与管理科学系, 1989年获本校控制理论及应用专业硕士学位. 现为副教授. 已发表学术论文 30 余篇, 曾获第一届全球华人智能控制与智能自动化大会东怡最佳应用论文奖, 有两项科研成果获中国科学院、中国石油化工总公司科技进步奖. 现主要从事工业过程先进控制和优化的研究.

张志刚 1970年生. 1992年毕业于中国科学技术大学自动化系, 1995年获本校控制理论及应用专业硕士学位, 并留校任教. 曾获中国科学院院长奖学金. 现主要从事工业过程先进控制和优化的研究.