

文章编号: 1000-8152(2010)07-0903-06

## 乙苯催化脱氢制苯乙烯生产过程的机理建模及优化

张彬<sup>1,2</sup>, 杨为民<sup>1</sup>, 钱锋<sup>2</sup>, 吴智勇<sup>1</sup>, 何文军<sup>1</sup>, 张卫东<sup>3</sup>

(1. 中国石化上海石油化工研究院, 上海 201208; 2. 华东理工大学信息科学与工程学院, 上海 200237;  
3. 上海交通大学自动化系, 上海 200030)

**摘要:** 为针对乙苯脱氢过程实施先进控制及优化技术, 基于反应动力学、物料衡算、能量守恒原理及Ergun方程, 通过求解微分方程组建立乙苯脱氢绝热负压径向反应器的机理模型, 可有效预测未来系统的生产状况. 在所建立的机理模型基础上, 根据实际生产状况建立了所需的约束条件及优化条件, 利用工程应用较多的多变量复合约束算法实现了过程生产的在线优化. 通过改变各个操作条件明确了它们对脱氢生产的影响规律, 为后续先进控制与优化项目的实施奠定了基础.

**关键词:** 乙苯脱氢; 机理模型; 在线优化; 选择性; 转化率  
**中图分类号:** TP273      **文献标识码:** A

## First principle modeling and optimization for dehydrogenation of ethylbenzene to styrene

ZHANG Bin<sup>1,2</sup>, YANG Wei-min<sup>1</sup>, QIAN Feng<sup>2</sup>,  
WU Zhi-yong<sup>1</sup>, HE Wen-jun<sup>1</sup>, ZHANG Wei-dong<sup>3</sup>

(1. Shanghai Research Institute of Petrochemical Technology, Shanghai 201208, China;  
2. School of Information Science & Engineering, East China University of Science and Technology, Shanghai 200237, China;  
3. Department of Automation, Shanghai Jiaotong University, Shanghai 200030, China)

**Abstract:** By the principles of kinetics and conservation of energy, we solve the related differential equations and develop a first principle model for the dehydrogenation of ethylbenzene to styrene in an adiabatic radial flow reactor. This model can be used to predict the features of the dehydrogenation system. The constraints to the practical process are formulated for simulating and online optimizing the dehydrogenation of ethylbenzene using a constraint multivariable complex algorithm. Simulation results show that the obtained model can reveal the reactions in operation, and thus it is applicable to the implementation of advanced control and optimization.

**Key words:** dehydrogenation of ethylbenzene; first principle modeling; online optimization; conversion; selectivity

### 1 引言(Introduction)

苯乙烯是化工生产中重要的原料, 在苯乙烯生产中其核心部分为乙苯催化脱氢反应部分, 是影响苯乙烯生产的重要环节. 为提高现有苯乙烯生产装置的节能降耗水平, 先进控制及优化技术是其中的一项有效技术手段. 在实施先进控制及优化技术时<sup>[1,2]</sup>, 基于最顶层的系统优化需知道描述乙苯催化脱氢系统的数学模型.

截至目前, 乙苯催化脱氢反应器的模型模拟研究受到了众多学者的关注<sup>[3~5]</sup>. 朱晓蒙等人<sup>[6]</sup>归纳总结了现有能描述乙苯脱氢反应的5种模型, 经过计算和实际生产对比, 确定了Carra双曲模型是一种比较好的反映脱氢过程的模型. 杨金根等人<sup>[7]</sup>研究

了乙苯脱氢轴向反应器的数学模型, 通过各个参数的改变根据经验得到了系统的操作条件. 徐志刚等人<sup>[8,9]</sup>较为详细的研究了乙苯脱氢的轴向、径向、轴径向的反应器模型, 通过了冷模试验验证了其方法的有效性, 但其中的径向反应器研究都没有涉及到压力场的分布对系统的影响, 没有定性给出系统的操作优化. Sadramell等人<sup>[10]</sup>基于Smart工艺研究了3段串联径向反应器模拟, 并与实际生产进行了对比, 确定得到的模型能有效再现实际过程. 刘延跃等人<sup>[11]</sup>基于Aspen模拟软件分析了乙苯脱氢过程模拟与优化, 通过灵敏度分析方法确定了其最佳操作条件. 吴坚刚等人<sup>[12]</sup>利用在线实测数据的回归校正得到脱氢反应器的转化率模型用于优化控制, 其缺点

是没有从系统的机理着手, 所得模型具有一定的局限性. 毕立群<sup>[13]</sup>和张彬等人<sup>[14]</sup>利用历史生产数据基于人工智能技术进行了脱氢反应器的模拟研究, 由于所用数据的局部时效性, 所得模型只能表述部分时段的系统生产, 不能再现整体实际生产. 以上研究目的都是想建立系统的操作模型, 但其操作条件都是基于经验得到, 为此需借助优化控制技术来定性给出系统的最优操作条件.

由于径向反应器具有床层压降小、热量转移方便等特点, 在乙苯脱氢生产中得到了广泛应用<sup>[15]</sup>, 为此本文研究径向反应器的最优化操作问题. 首先利用能准确表征系统特征的Carra双曲模型来描述脱氢生产过程, 基于物料平衡及能量守恒原理, 采用Ergun公式来描述床层压降, 通过求解微分方程组来建立乙苯脱氢转化率模型及催化剂选择性模型. 同时利用所建立的模型确定了径向反应器内部的温度及压力的分布, 分析了各个参数对系统操作的影响. 最后根据生产实际构造生产需约束条件, 基于复合形法来寻找保证系统达到最优操作的条件, 通过实际算例说明了方法的有效性.

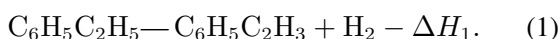
## 2 过程描述及反应器机理建模(Process description and first principle modeling for reactor)

### 2.1 过程描述(Process description)

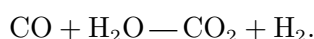
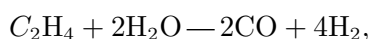
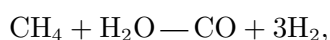
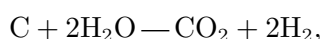
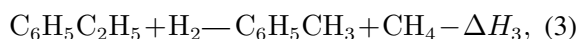
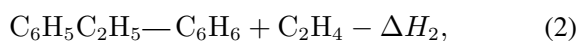
乙苯脱氢反应系统由一个加热炉, 2个串联的绝热式径向反应器及若干个换热器组成, 如图1所示. 原料乙苯先与小股蒸汽混合, 经换热器及加热炉加热, 进入两级反应器反应, 生成苯乙烯及副产品苯、甲苯等. 为节能降耗, 反应系统中热交换很多, 影响脱氢系统的变量较多且相互耦合非常严重, 系统模型难以获得. 在脱氢系统的操作中, 其反应器I, II的操作条件往往通过经验获得, 难以确保系统的整体操作处于最优.

乙苯脱氢反应过程主要有如下主副反应:

主反应:



副反应:



根据主要产物分析知必须考虑的反应为前3个反应, 且其反应热可表示为

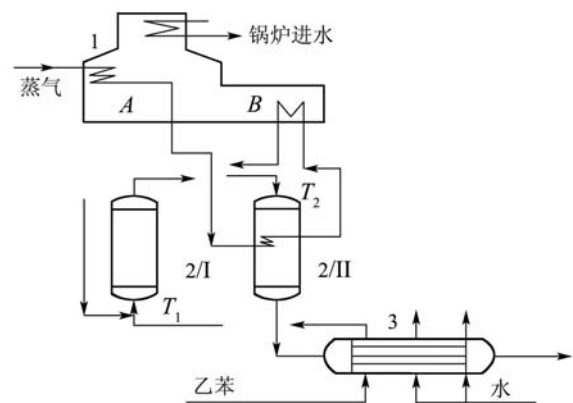
$$-\Delta H_1 = -120679 - 4.56T, \quad (4)$$

$$-\Delta H_2 = -108750 - 7.95T, \quad (5)$$

$$-\Delta H_3 = 53145 + 13.18T. \quad (6)$$

其中 $T(\text{K})$ 为反应温度. 主反应的乙苯脱氢反应的化学平衡常数为

$$K_P = \exp(19.67 - 15370/T - 0.5233 \ln T).$$



1: 加热炉; 2: 反应器; 3: 换热器 I: 反应器I; II: 反应器2;  $T_1$ : 反应器1的温度;  $T_2$ : 反应器2的温度; A, B: 加热炉

图1 乙苯催化脱氢反应器系统

Fig. 1 The reaction system of dehydrogenation of ethylbenzene

### 2.2 乙苯脱氢制苯乙烯的转化率及选择性动力学模型(Model of the conversion and selectivity for dehydrogenation of ethylbenzene to styrene)

采用乙苯脱氢反应过程双曲模型来描述脱氢过程<sup>[6]</sup>:

$$r_s = \frac{k_1(P_{\text{eb}} - P_s P_{\text{H}}/K_P)}{P_{\text{eb}} + k_a P_s}, \quad (7)$$

$$r_B = \frac{k_2 P_{\text{eb}}}{P_{\text{eb}} + k_a P_s}, \quad (8)$$

$$r_T = \frac{k_3 P_{\text{eb}} P_{\text{H}}}{P_{\text{eb}} + k_a P_s}, \quad (9)$$

其中:  $k_a = 4.36$ ;  $r_s, r_B, r_T$ 分别为苯乙烯、苯、甲苯的生成速率;  $P_{\text{eb}}, P_s, P_{\text{H}}, P_T, P_B$ 分别为乙苯、苯乙烯、氢、甲苯、苯在系统中的分压; 模型参数<sup>[5]</sup>:

$$k_1 = a \exp(-E_1/RT),$$

$$k_2 = b \exp(-E_2/RT),$$

$$k_3 = c \exp(-E_3/RT).$$

其中:  $a, b, c$ 和 $E_1, E_2, E_3$ 分别为指前因子和对应反应的活化能, 对于GS-05系列催化剂 $a = 1.59 \times$

$10^6$ ,  $b = 2.97 \times 10^9$ ,  $c = 9.89 \times 10^7$ ,  $E_1 = 146300$ ,  $E_2 = 229200$ ,  $E_3 = 169100$ . 设 1 mol 乙苯进料生成的苯乙烯、苯、甲苯量为  $y_s, y_B, y_T$ , 则由反应式(1)~(3)得系统各分压为

$$P_{eb} = \frac{1 - y_s - y_B - y_T}{1 + b + y_s + y_B} P, \quad (10)$$

$$P_H = \frac{y_s - y_T}{1 + b + y_s + y_B} P, \quad (11)$$

$$P_s = \frac{y_s}{1 + b + y_s + y_B} P. \quad (12)$$

其中:  $P(\text{MPa})$  为系统操作压力,  $b$  为水蒸气和乙苯的进料摩尔比.

考虑如图 2 所示径向反应器, 其特点在于径向压力降小, 可简化为在径向的活塞流反应器. 由于脱氢反应中的关键组分为苯乙烯、甲苯和苯, 则物料衡算方程为<sup>[16]</sup>:

$$\frac{dy_s}{dr} = \frac{2\pi r l \rho_B r_s}{F_{eb}}, \quad (13)$$

$$\frac{dy_T}{dr} = \frac{2\pi r l \rho_B r_T}{F_{eb}}, \quad (14)$$

$$\frac{dy_B}{dr} = \frac{2\pi r l \rho_B r_B}{F_{eb}}. \quad (15)$$

其中:  $r(\text{m})$  为催化剂床层的半径,  $dr$  为半径方向的微元,  $l(\text{m})$  为催化剂堆高,  $\rho_B(\text{kg}/\text{m}^3)$  为催化剂堆积密度,  $F_{eb}(\text{kmol}/\text{h})$  为乙苯进料.

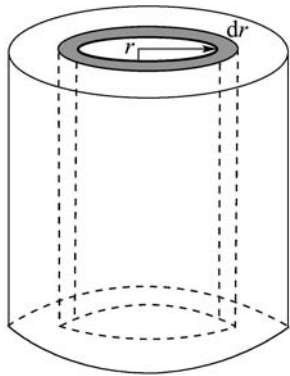


图 2 径向反应器微分单元

Fig. 2 Differential unit of radial reactor

反应器内部能量衡算方程为

$$\frac{dT}{dr} = \frac{2\pi r l \rho_B}{(F_{H_2O} + F_{eb})C_m} [r_s(-\Delta H_1) + r_B(-\Delta H_2) + r_T(-\Delta H_3)], \quad (16)$$

其中:  $F_{H_2O}(\text{kmol}/\text{h})$  为水蒸气量,  $C_m$  为混合比热容, 一般为各组分按其组成进行摩尔比的加权求和得到<sup>[16]</sup>.

由于考虑反应器为径向, 在径向存在一定的压力

分布, 考虑到 Ergun 方程为半经验半理论中总结出来用来描述固定床反应器压力分布的有效公式, 为此选用其校正形式来描述对象的压力场分布<sup>[10,17]</sup>:

$$\frac{dP}{dr} = -150 \frac{(1-\varepsilon)^2 \mu}{\varepsilon D^2 g} u - 1.75 \frac{(1-\varepsilon) \rho_g}{\varepsilon D g} u^2, \quad (17)$$

其中:  $\rho_g(\text{kg}/\text{m}^3)$  为混合气体密度,  $\varepsilon$  为床层空隙率,  $D(\text{mm})$  为粒径,  $g$  为引力常数,  $\mu(\text{Pa}\cdot\text{s})$  为气体混合物粘度,  $u(\text{m}/\text{s})$  为半径方向的气体流速.

将式(4)~(12)代入式(13)~(16), 同时联立反应器内部 Ergun 压力分布方程(17), 组成五元微分方程组, 利用龙格库塔方法且以反应器 I 的出口组分作为反应器 II 的入口条件, 可得各组分的收率分布及两个反应器内部的温度及压力分布情况.

在得到各组分的分布后, 可得乙苯脱氢系统整体转化率可表示为

$$\text{Conversion}(P, T_1, T_2, F_{eb}, F_{H_2O}) = \frac{F_{eb} - F_{ebs}}{F_{eb}}, \quad (18)$$

其中  $F_{ebs}$  为二反出口处剩余乙苯量:

$$F_{ebs} = (1 - y_s - y_T - y_B) F_{eb}.$$

反应器系统催化选择性为

$$\text{Selectivity}(P, T_1, T_2, F_{eb}, F_{H_2O}) = \frac{F_{sout}}{F_{eb} - F_{ebs}}, \quad (19)$$

其中  $F_{sout}$  为二反出口处苯乙烯生成量.

以上基于反应动力学、物料衡算、能量守恒原理及 Ergun 方程建立了脱氢系统的机理模型, 后文将利用该模型设计得到系统操作的最优化条件.

### 3 操作条件最优化设计(Optimization of manipulated variables)

在实际苯乙烯生产中, 在装置运行平稳后, 希望所设计的系统在能耗和物耗在容许的范围内产率最大, 但是实际生产中具体的操作条件往往由经验获得, 为最优化操作装置, 根据实际生产归纳系统操作应该满足如下要求:

$$\max \text{Conversion}(P, T_1, T_2, F_{eb}, F_{H_2O}), \quad (20)$$

且满足约束:

$$P_{\min} \leq P \leq P_{\max},$$

$$T_{1\min} \leq T_1 \leq T_{1\max},$$

$$T_{2\min} \leq T_2 \leq T_{2\max},$$

$$F_{eb\min} \leq F_{eb} \leq F_{eb\max},$$

$$F_{H_2O\min} \leq F_{H_2O} \leq F_{H_2O\max}.$$

同时考虑到催化选择性, 添加约束:

$$\text{Selectivity}(P, T_1, T_2, F_{eb}, F_{H_2O}) \geq S_{\text{hope}}, \quad (21)$$

其中 $S_{\text{hope}}$ 为期望的选择性. 进一步考虑系统能耗要求, 即在实际操作时水蒸气与乙苯的进料应该满足所期望的条件:

$$0.1698F_{H_2O}/F_{eb} \leq b_{\text{max}}, \quad (22)$$

其中 $b_{\text{max}}$ 为实际生产中所能容忍的最大质量水比.

考虑上述建立的机理模型(18)和(19), 由于影响模型的操作参数( $P, T_1, T_2, F_{eb}, F_{H_2O}$ )以微分方程组的形式隐式存在, 且催化剂选择性的要求也为隐式约束, 所以由式(20)~(22)组成的最优化问题为典型的多变量非凸隐式约束求解问题, 不能采用常规的优化方法求解以上问题. 注意到目标函数和部分约束条件其具体表达式未知, 难以应用常规的梯度优化方法, 需考虑直接优化算法. 由于复合形法是一种用于不等式约束条件下的直接搜索的最优化算法, 其不需要对目标函数求导, 对目标函数没有特殊形式的要求, 在搜索维数不高时, 在实际工程中应用较多.

复合形法对于在 $n$ 维设计空间的约束可行性域内, 由初始 $k = 2n$ 个点构成多面体顶点, 无需计算目标函数的梯度, 通过对各顶点目标函数值大小的比较, 不断进行去掉最坏点, 使用能使目标函数值有所下降的那个满足约束条件的新点来代替它, 从而确保系统逐步转向最优点. 由于每次寻优都保证了调优在可行域内进行, 其结构可靠, 实际工程应用较多, 所以在此选择该法用于目标函数(20)~(22)的寻优, 复合形法的详细论述参见文献[18]. 在此值得指出的是复合形法的初始复合形选择非常重要, 若初始复合形选择不准确, 会导致系统的寻优陷入死循环.

#### 4 模拟优化实验(Simulation and optimization example)

##### 4.1 脱氢反应器的模拟(Simulation of the reactor)

以某实际12万吨苯乙烯生产装置为样例进行模拟实验, 试验以在机理模型中考虑系统内部压力分布和不考虑系统内部压力分布两种方式, 与实际生产测量数据进行对比. 某催化剂 $a = 1.25 \times 10^6$ ,  $b = 2.72 \times 10^9$ ,  $c = 9.67 \times 10^7$ ,  $E_1 = 144200$ ,  $E_2 = 297700$ ,  $E_3 = 156500$ . 操作条件 $F_{H_2O} = 35.394 \text{ t/h}$ ,  $F_{eb} = 24.691 \text{ t/h}$ ,  $T_1 = 629.9^\circ\text{C}$ ,  $T_2 = 632.4^\circ\text{C}$ ,  $P = 66.6 \text{ kPa}$ , 其他参数由于保密不便透露, 此时借助建立的机理模型可得如表1所示的对比结果.

由表1可以发现, 基于所建立的机理模型可以较准确的模拟实际生产过程, 相对而言考虑系统内部

压力分布的机理模型能更准确的表征脱氢生产. 由于实际生产中确实存在着在径向方向的压力衰减, 所以在机理模型构建时, 应考虑压力对系统生产的影响, 但是实际操作中却不将压力作为具体的调节手段.

表1 机理模型中压力对模拟结果的影响

Table 1 The effect of pressure on simulation results

	测量值	考虑压力 计算值	不考虑压力 计算值
脱氢转化率/%	63.51	62.35	62.66
催化选择性/%	97.79	97.77	97.15
一反出口温度/ $^\circ\text{C}$	553.5	552.57	552.65
二反出口温度/ $^\circ\text{C}$	578.7	584.65	585.14
一反出口压力/kPa	52.2	53.8	66.6
二反出口压力/kPa	39.2	41.0	66.6

图3, 4给出一反在不同进口压力时反应器1, 2内部半径方向的压力分布情况, 由图可以发现随着半径增大, 压力减小, 这与实际生产相符合.

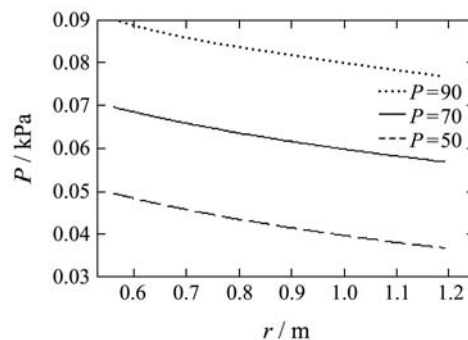


图3 一反压力场分布

Fig. 3 The pressure distribution of the first reactor

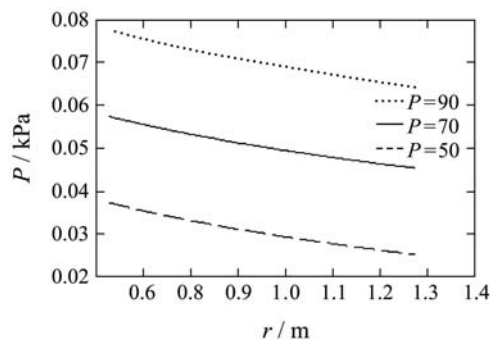


图4 二反压力场分布

Fig. 4 The pressure distribution of the second reactor

##### 4.2 脱氢反应器操作条件的最优化设计 (Optimization of the manipulated variables)

针对某10万吨苯乙烯生产装置为例进行优化设计, 其催化剂床层内径为1.6 m, 外径为2.4 m, 催

化剂堆高 $l_1 = l_2 = 7 \text{ m}$ ,  $\rho_g$  ( $\text{kg/m}^3$ )为混合气体密度,  $\varepsilon = 0.25$ ,  $D = 3 \text{ mm}$ , 堆积密度为 $\rho_B = 1400 \text{ kg/m}^3$ ,  $\mu = 0.3 \text{ (Pa}\cdot\text{s)}$ .

在如上工艺参数下, 针对如下3种生产条件进行对比:

1) 给定乙苯进料  $F_{\text{H}_2\text{O}} = 160 \sim 200 \text{ kmol/h}$ ,  $P = 0.05 \sim 1 \text{ MPa}$ , 最大水比 $b_{\text{max}} = 1.35$ ,  $F_{\text{H}_2\text{O}} = 1400 \sim 1600 \text{ kmol/h}$ ,  $T_1 = 890 \sim 910 \text{ K}$ ,  $T_2 = 895 \sim 920 \text{ K}$ ,

同时考虑催化选择性, 添加约束:

$$\text{Selectivity}(P, T_1, T_2, F_{\text{eb}}, F_{\text{H}_2\text{O}}) \geq 97.5\%.$$

2) 固定乙苯进料 $180 \text{ kmol/h}$ , 其他约束条件与条件1)相同;

3) 常规操作 $P = 0.06 \text{ MPa}$ ,  $T_1 = 905 \text{ K}$ ,  $T_2 = 910 \text{ K}$ ,  $F_{\text{H}_2\text{O}} = 1555 \text{ kmol/h}$ ,  $F_{\text{eb}} = 189 \text{ kmol/h}$ .

此时利用复合形法对1)和2)两种方式进行搜索, 且与常规操作对比, 其结果如表2所示.

表2 不同条件下的操作配比

Table 2 The different manipulated conditions

条件	$P/\text{MPa}$	$T_1/\text{K}$	$T_2/\text{K}$	$F_{\text{H}_2\text{O}}/(\text{kmol}\cdot\text{h}^{-1})$	$F_{\text{eb}}/(\text{kmol}\cdot\text{h}^{-1})$	水比
1)	0.05	908.8	919.5	1400.13	176.23	1.349
2)	0.05	909.7	918.6	1428.62	180	1.348
3)	0.06	905	910	1555	189	1.397

由表2可以发现, 为追求最大的转化率, 两种寻优都是在较低的压力和最大化的温度下获得, 且都能保持在系统生产的约束范围内. 在实际中通常将表2得到的最优化操作条件送往上位机中的先进控制的操作给定值<sup>[1]</sup>, 如此可以使得系统的

生产保持最优.

进一步考察以上3种条件下的生产状况, 根据目前化工市场价格(CNY/t), 苯乙烯5100, 乙苯3200, 甲苯4700, 苯3400, 蒸汽130, 此时生产状况如表3所示.

表3 不同操作条件下的生产状况

Table 3 The production state under different manipulated conditions

条件	苯乙烯/ $(\text{kmol}\cdot\text{h}^{-1})$	苯/ $(\text{kmol}\cdot\text{h}^{-1})$	甲苯/ $(\text{kmol}\cdot\text{h}^{-1})$	转化率/%	选择性/%	利润/ $(\text{CNY}\cdot\text{h}^{-1})$
1)	116.04	2.58	0.39	67.53	97.50	16193
2)	117.79	2.63	0.39	67.12	97.5	16429
3)	117.46	2.48	0.44	63.7	97.57	15913

表3给出3种操作模式的系统生产利润, 可以发现, 第2种进料方式其利润最高. 其实在实际操作中也更趋向于采用第2种方法, 即将进料固定, 寻优其他操作条件.

## 5 结论(Conclusions)

本文基于反应动力学, 能量守恒原理及Ergun方程描述系统的压力分布, 通过求解微分方程组, 得到乙苯脱氢系统的机理模型, 并定性研究了压力、水比、温度等操作条件对乙苯脱氢转化率及选择性的影响. 提出切合实际的系统操作条件, 通过设计的复合形法实现了多变量带约束的最优化算法, 得到了系统的最佳操作条件, 并通过3种进料方式评价了系统生产状况, 为后续苯乙烯生产应用先进控制及优化技术提高节能降耗打下良好基础.

## 参考文献(References):

- [1] 张彬, 杨为民, 吴智勇, 等. 乙苯催化脱氢制苯乙烯的预测函数控制及其稳定性分析[J]. 化工学报, 2008, 59(7): 1640 - 1645. (ZHANG Bin, YANG Weimin, WU Zhiyong, et al. Predictive functional control algorithm and stability conditions for dehydrogenation of ethylbenzene to styrene[J]. *Journal of Chemical Industry and Engineering(China)*, 2008, 59(7): 1640 - 1645.)
- [2] 明健. 乙苯催化脱氢制苯乙烯的先进控制与优化[D]. 北京: 北京化工大学, 2006. (MING Jian. *The advanced control and optimization for dehydrogenation of ethylbenzene to styrene*[D]. Beijing: Beijing University of Chemical Technology, 2006.)
- [3] CLOGH D E, RAMIREZ W F. Mathematical modeling and optimization of the dehydrogenation of ethylbenzene to form styrene[J]. *American Institute of Chemical Engineers Journal*, 1976, 22(6): 1097 - 1105.
- [4] HUANG W. Operation simulation analysis boosts styrene unit's productivity and operating flexibility[J]. *Oil & Gas Journal*, 1983, Mar: 83 - 89.
- [5] 于雪峰, 麻德贤, 刘文义, 等. 乙苯脱氢反应的宏观动力学及操作优化[J]. 石油炼制与化工, 1997, 28(11): 41 - 45.

- (YU Xuefeng, MA Dexian, LIU Wenyi, et al. The apparent kinetics and operation optimization of ethylbenzene dehydrogenation[J]. *Petroleum Processing and Petrochemicals*, 1997, 28(11): 41 – 45.)
- [6] 朱晓蒙, 柏荣, 张浩, 等. 用绝热反应器研究乙苯脱氢的宏观动力学[J]. 华东理工大学学报, 1994, 20(2): 153 – 158.  
(ZHU Xiaomeng, BAI Rong, ZHANG Hao, et al. Research of reaction kinetics of ethylbenzene dehydrogenation by using an adiabatic reactor[J]. *Journal of East China University of Science and Technology*, 1994, 20(2): 153 – 158.)
- [7] 杨金根, 黄祖耀. 乙苯脱氢制苯乙烯绝热式反应器的数学模型[J]. 华东理工大学学报, 1994, 20(2): 159 – 163.  
(YANG Jingen, HUANG Zuyao. A mathematical model of adiabatic reactor for dehydrogenation of ethylbenzene to styrene[J]. *Journal of East China University of Science and Technology*, 1994, 20(2): 159 – 163.)
- [8] 徐志刚, 俞丰, 朱子彬, 等. 轴向反应器模拟及其在乙苯脱氢装置的应用[J]. 石油化工, 2003, 32(3): 237 – 241.  
(XU Zhigang, YU Feng, ZHU Zibin, et al. Simulation of axial-radial reactor and its application to ethylbenzene dehydrogenation plant[J]. *Petrochemical Technology*, 2003, 32(3): 237 – 241.)
- [9] 徐志刚, 朱子彬, 张成芳, 等. 乙苯脱氢径向反应器的模拟和操作优化[J]. 华东理工大学学报, 1999, 25(3): 217 – 220.  
(XU Zhigang, ZHU Zibin, ZHANG Chengfang, et al. Simulation and operation of a radial flow reactor for dehydrogenation of ethylbenzene to styrene under vacuum[J]. *Journal of East China University of Science and Technology*, 1999, 25(3): 217 – 220.)
- [10] SADRAMELL M, IRANKHAH A, NATEGHI E. Simulation of styrene monomer reactors[J]. *Petroleum Technology Quarterly Spring*, 2001: 149 – 151.
- [11] 刘延跃, 张晶, 魏寿彭. 乙苯脱氢制苯乙烯工业生产过程的模拟与优化[J]. 北京化工大学学报, 2000, 27(4): 10 – 14.  
(LIU Yanyue, ZHANG Jing, WEI Shoupeng. Simulation and optimization of industrial production process of dehydrogenation of ethylbenzene to styrene[J]. *Journal of Beijing University of Chemical Technology*, 2000, 27(4): 10 – 14.)
- [12] 吴坚刚, 刘仁华. 乙苯脱氢反应器系统的广义预测控制[J]. 自动化学报, 1991, 17(2): 174 – 181.  
(WU Jiangan, LIU Renhua. Generalized predictive control of ethylbenzene dehydrogenation reactor system[J]. *Acta Automatica Sinica*, 1991, 17(2): 174 – 181.)
- [13] 毕立群, 汪须忠, 麻德贤. 乙苯脱氢反应器的ANN模型及其工况模拟与优化[J]. 计算机与应用化学, 1997, 14(3): 236 – 240.  
(BI Liqun, WANG Xuzhong, MA Dexian. Simulation and optimization of an ethylbenzene dehydrogenation reactor using artificial neural networks(ANNS)[J]. *Computers and Applied Chemical*, 1997, 14(3): 236 – 240.)
- [14] 张彬, 杨为民, 吴智勇, 等. 基于RBFNN的乙苯催化脱氢转化率软测量应用研究[J]. 化工进展, 2009, 28(4): 588 – 591.  
(ZHANG Bin, YANG Weimin, WU Zhiyong, et al. Application of RBFNN to dehydrogenation of ethylbenzene to styrene[J]. *Chemical Industry and Engineering Progress*, 2009, 28(4): 588 – 591.)
- [15] 汪洋, 任珉, 袁浩, 等. 径向反应器的研究与应用进展[J]. 应用化工, 2006, 35(9): 719 – 722.  
(WANG Yang, Ren Min, YUAN Hao, et al. Research and application progress of radial – flow reactor[J]. *Applied Chemical Industry*, 2006, 35(9): 719 – 722.)
- [16] 朱开宏, 袁渭康. 化学反应工程分析[M]. 北京: 高等教育出版社, 2002.  
(ZHU Kaihong, YUAN Weikang. *Chemical Reaction Engineering Analysis*[M]. Beijing: China Higher Education Press, 2002.)
- [17] ERGUN S. Fluid flow through packed columns[J]. *Chemical Engineering Progress*, 1952, 48(2): 89 – 94.
- [18] 郁崇文. 工程参数的最优化设计[M]. 上海: 东华大学出版社, 2003.  
(YU Chongwen. *Optimization Design of Engineer Parameters*[M]. Shanghai: Donghua University Press, 2002.)

#### 作者简介:

**张彬** (1977—), 男, 博士, 高级工程师, 2006年毕业于上海交通大学自动化系, 现在中石化上海石油化工研究院工作, 主要从事化工过程控制及优化等研究, E-mail: zbxh@sina.com.cn;

**杨为民** (1966—), 男, 博士, 教授级高级工程师, 现为上海石油化工研究院总工程师, 主要从事石油化工催化新材料研究;

**钱锋** (1961—), 男, 教授, 博士生导师, 现为华东理工大学副校长, 主要研究方向为化工过程模拟优化控制等;

**吴智勇** (1969—), 男, 博士, 高级工程师, 主要从事信息化处理工作;

**何文军** (1968—), 男, 博士, 高级工程师, 主要从事化工过程工艺研究;

**张卫东** (1967—), 男, 教授, 博士生导师, 主要从事鲁棒控制、过程先进控制等。