

学校代码：10251

学 号：Y30140616

華東理工大學

硕士学位论文

题 目 串联型乙炔加氢反应过程的动态优化

专 业 控制科学与工程

研究方向 工业过程建模、控制与优化

姓 名 鲍春瑜

导 师 杜文莉 教授

定稿时间：2017 年 4 月 20 日

分类号: TP273 密级:

UDC:

华东理工大学

学位论文

串联型乙炔加氢反应过程的动态优化

鲍春瑜

指导教师姓名: 杜文莉 教授

华东理工大学 上海市梅陇路 130 号

申请学位级别: 硕士 工 程 领 域: 控制科学与工程

论文定稿日期: 2017. 04. 20 论文答辩日期: 2017. 05. 14

学位授予单位: 华东理工大学

学位授予日期:

答辩委员会主席: 颜学峰 教授

评 阅 人: 顾幸生 教授

郑 毅 副教授

作者声明

我郑重声明：本人恪守学术道德，崇尚严谨学风。所呈交的学位论文，是本人在导师的指导下，独立进行研究工作所取得的结果。除文中明确注明和引用的内容外，本论文不包含任何他人已经发表或撰写过的内容。论文为本人亲自撰写，并对所写内容负责。

论文作者签名：

年 月 日

串联型乙炔加氢反应过程的动态优化

摘要

乙烯装置中的乙炔加氢反应系统是将裂解气中的副产品乙炔进一步转化为乙烯产品的过程。为保证烯烃产品的收率，一般选择两个反应器串联操作，确保最后一段反应器无漏炔情况；这是因为随着加氢反应的进行，催化剂的活性和选择性会逐渐下降，而加氢过程中绿油杂质也会影响催化剂的活性从而影响炔烃转化率。加氢反应过程灵敏且属于放热反应，不当控制方式极易引发飞温和乙烯产品质量不合格等问题；两段反应器的催化剂切换再生操作会增加生产成本。现有加氢反应过程的操作条件与切换周期均依赖人工经验设定，难以满足在不同反应器、不同催化剂活性变化的同时，实现整体的经济效益达到最优。

为此，本文针对串联型乙炔加氢反应系统动态优化问题，提出了满足乙炔加氢反应系统效益最优的最佳切换周期以及在该周期下加氢量和入口温度的动态优化方法。在建立了一段、二段乙炔加氢反应系统动态模型的基础上，分析了相关控制变量对产品收率的影响承担；根据串联型乙炔加氢系统实际情况，建立了其动态优化问题的数学描述，考虑到运行周期内催化剂失活特性不可逆情况，提出了反应器入口的增量式编码方法，并在差分进化算法框架下实现了其求解过程。为解决增量编码差分进化算法收敛性不足等缺点，进一步提出了基于约束排名增量编码差分进化算法，提高了原算法的收敛性能和精确性。针对工业碳二加氢串联型反应过程，采用多种优化方案进行对比，验证了本文所述动态优化方法的有效性。

关键词：乙炔加氢；反应器切换策略；动态优化；差分进化算法；增量式编码

Dynamic optimization of the tandem acetylene hydrogenation process

Abstract

The acetylene hydrogenation reaction system is utilized to further crack the by-product of acetylene into additional C_2H_4 . In practice, two reactors are generally connected in series to guarantee that no remaining acetylene is passed to the reactors downstream, thus to maximize the yield of olefin products. Within the reactor, catalyst activity and selectivity decline gradually with time and also with the increase of the generated impurities, green oil for particular. The hydrogenation reaction process is an exothermic reaction. And the reaction is very sensitive to heat as well. Therefore, improper control method might cause a sudden increase in temperature, resulting in unqualified productions. The operation of the catalyst in the two section reactors increases the production cost. Workers of the current hydrogenation reaction system adjust the operating conditions and switching cycles depending on their experiences, which are difficult to meet the needs of maximizing the best economic benefits by optimizing all the operation conditions.

For this reason, this paper proposed a dynamic optimization method to dynamically optimize the switching period, hydrogenation efficiency and inlet temperature of the acetylene hydrogenation reaction system. Based on the dynamic model of the first and second stages of acetylene hydrogenation reaction, we have analyzed the influences for the control variables on the yield of productions. Referring to the actual situation of the tandem acetylene hydrogenation process, we have established a mathematical description of the dynamic optimization. We have proposed an incremental encoding method contraposing to the reactor inlet temperature to compensate the problem of the irreversibility of catalyst deactivation during the operation period. The objective functions were solved using the differential evolution algorithm. We have implemented several other optimization method for comparison. Optimization results have implied the effectiveness of our proposed method.

Key Words: Cracking furnace; Ethylene yield; Similarities; Transfer learning; Time series

目录

第 1 章 绪论	1
1.1 课题研究背景和意义	1
1.2 乙炔加氢的生产工艺	3
1.3 乙炔加氢优化现状	4
1.4 动态优化问题描述以及现状	5
1.4.1 动态优化问题描述	5
1.4.2 动态优化方法的现状	6
1.4.3 动态优化和静态优化	8
1.5 本文的主要内容和章节安排	8
第 2 章 串联型乙炔加氢反应过程模型	10
2.1 乙烯装置乙炔加氢反应流程	10
2.2 一段加氢反应器模型	11
2.2.1 乙炔加氢反应原理	11
2.2.2 乙炔加氢反应动力学模型	12
2.2.3 乙炔加氢反应器模型	13
2.2.4 催化剂失活动力学模型	14
2.3 二段加氢反应器模型	17
2.4 串联型乙炔加氢动态优化问题描述	18
2.5 可控变量影响分析	20
2.5.1 加氢流量分析	20
2.5.2 进口温度分析	23
2.6 本章小结	25
第 3 章 基于增量式编码差分进化算法的动态优化	26
3.1 引言	26
3.2 差分进化算法	26
3.3 控制向量参数法	28
3.4 增量式编码	29
3.5 状态约束处理方法	30
3.6 加氢反应过程优化实现步骤	31

3.6.1 串联型乙炔加氢系统处理	31
3.6.2 IEDE 算法实现步骤	32
3.7 串联型乙炔加氢动态优化仿真与分析	33
3.8 本章小结	37
第 4 章 基于约束排名增量编码差分算法的动态优化	38
4.1 引言	38
4.2 约束排名变异算法	38
4.3 约束排名变异算法的增量编码差分进化算法介绍	39
4.4 动态优化方法比较	41
4.5 串联型乙炔加氢系统动态优化结果以及分析	43
4.6 稳态优化方案对比	49
4.7 本章小结	52
第 5 章 总结与展望	53
5.1 研究工作总结	53
5.2 工作展望	54
参考文献	55
致 谢	61
攻读硕士期间发表的论文以及参与的项目	61

第 1 章 绪论

1.1 课题研究背景和意义

二十一世纪以来, 能源的高效使用以及节能减排问题逐渐成为全球关注的重点问题。随着现代工业的发展, 提升工业生产要求以及有效解决复杂系统中存在的非线性、不确定性等问题成为提高产品质量、降低能耗等瓶颈问题成为研究的重点问题。实际生产过程中, 稳态是相对的、暂时的, 而实际生产中系统运行总存在着各种各样的干扰、波动以及控制条件等的变化。故稳态过程无法精确描述实际的生产过程, 而动态模型能更精确的描述实际生产中的问题^[1]。故使用动态模型来描述复杂的化工过程得到了广泛的使用。通过动态建模与优化技术对复杂系统整体行为展开研究, 并进行系统的实时分析和控制, 通过优化控制变量使系统某一性能达到最优。传统的化工方法因其局限性, 不再适用复杂化工反应系统的整体行为的研究。动态优化因其有效性, 逐渐成为解决复杂化工反应过程的最优控制进行实时分析与控制的有效的方法, 是工业过程优化操作与控制的重要研究方向, 并成为解决生产过程优化问题中的瓶颈问题和挖掘效能的有效手段。

传统动态优化方法(间接法)是基于 Pontryagin 极大值原理^[2]将原问题转变为两点边值问题, 再对其进行求解以获取最优控制轨线。间接法虽然有着较好的理论基础, 在求解一些小规模的动态优化问题效率很高, 但是也存在一些缺陷。首先是基于梯度的搜索特性, 对初值敏感, 且容易陷入局部最优。然后是复杂的数学推导在计算机上实现困难, 且对于带有不等式约束的动态优化问题会使原问题变的更加复杂, 不易实现。最后是对多峰的动态优化问题的求解容易陷入局部最优。这些缺陷大大限制了传统动态优化方法的应用范围。

直接法中的进化算法通过模拟生物进化规律, 模拟信息重组和信息共享等方法对问题进行全局寻优。随着进化算法的不断发展, 使之在求解复杂的实际工业问题显示出了强大的生命力和潜力^[3]。直接法首先采用离散方法将原来的动态优化问题转化为有限维非线性规划(NLP)问题, 然后对 NLP 问题进行优化求解, 将优化出来的控制轨迹近似原问题的解。其中离散方法可以分为联立法和序列法^[6]。联立法也称为正交配置法(Orthogonal Collocation, OC)^[4,5], 其将控制变量和状态变量进行离散, 将原动态优化问题转化成为大规模的 NLP 问题, 容易导致不稳定收敛等问题, 因而需要特定的求解方法进行优化。序列法称为控制变量参数法(Control Vector Parameterization, CVP)^[7], 只对控制变量进行离散, 把随时间连续变化的控制变量的优化近似为对有限个参数优化的问题。控制向量参数法方法离散后待优化的参数个数较少, 方便结合优化算法进行求解。对于 NLP 问题的优化算法中, 早期主要是采用梯度算法。该算法种类繁多, 有牛顿法、SQP 法、内点算法等^[9]。但是基于梯度优化算法要求待优化的问题具有连

续、可导等性质，且对于非线性问题求解困难以及对给定初值敏感等缺点，大大限制了该方法的使用范围。随着人工智能的不断发展，智能优化算法如模拟退火算法、差分进化算法、粒子群优化算法等在动态优化中的研究逐渐增多^[10,38]。进化算法对模型依赖小，实现简单、处理非线性能力强、全局搜索能力强以及适应性强等优点。因此在动态优化领域中得到越来越广泛的关注，特别是处理复杂的工业动态优化问题^[8]。

石油化工产业因科学技术的进步、社会经济的发展以及人民生活水平的提高显示出了越来越重要的作用，是我国重要的支柱产业之一。乙烯生产是石油化工发展的重要标志，常常作为衡量国家石油化工行业的发展水平。随着社会经济的发展，对于乙烯的需求量不断增大^[11]。而乙烯生产装置的流程复杂、能耗大且装置在生产过程中存在着不确定性、耦合性和滞后性等特点，故对乙烯生产流程装置的控制和优化技术的研究具有重要的意义^[12]。

串联型乙炔加氢反应系统考虑了两段加氢反应器的不同反应状态，以及加氢反应过程相对较复杂、对条件变化反应灵敏、处于乙烯生产装置的中间环节、可变操作条件少等特点使串联型乙炔加氢反应系统控制困难。但是，加氢反应器的乙炔转化率、催化剂的选择性和活性直接影响产品的质量和产量。而过量的乙炔会使生产下游的乙烯聚合中的催化剂中毒，故其含量必须降低到 1ppm，才能保证乙烯产品质量。对串联型乙炔加氢反应系统的优化操作成为乙烯生产的瓶颈之一^[13]。考虑到加氢反应器的切换和催化剂的再生所产生的费用以及催化剂活性动态变化的条件下，同时对串联型反应器的切换周期和操作条件进行优化，对于提高整体经济效益具有重要意义。

在加氢反应器中主副反应都属于放热反应，不良的操作易引起飞温等不良现象。在串联型乙炔加氢反应系统中，加入氢气量过低容易导致绿油的发生，从而造成催化剂钝化速度加快。而加入过量的氢气会加剧对于氢气和乙烯消耗。为了满足串联型乙炔加氢反应系统出口的乙炔含量满足系统生产要求，需要利用入口加氢量来对催化剂的钝化作用进行补偿。虽然催化剂的活性会随着时间的变化不可逆转的降低，控制变量尽量延长催化剂的使用时间，降低反应器切换和催化剂切换再生所产生的费用。串联型乙炔加氢反应系统中，各加氢反应器的生产功用不同以及催化剂的性能的不一致，需要对两段加氢反应器进行控制，使系统在满足生产条件的情况下收益达到最优。温度会对催化剂的性能产生一定影响，温度越高，催化剂的使用周期将缩短，会增加切换反应器催化剂所产生的费用。而较低的入口温度会会加氢反应速率产生影响，造成出口乙炔气体含量不满足系统要求，从而影响产品质量^[16]。高温会促使生成副产物乙烷的生成^[17]，所以需将温度范围控制在合适的温度范围内。催化剂的活性和选择性受到反应器中的入口温度、加氢量和入口物料比例等因素的影响^[14]。已有的大量工作研究了乙炔加氢反应器的控制系统，使用稳定的加氢反应过程^[15]，通过的稳态优化注重产品收率的提高。同时大量的研究使用过程通常只关注了一段加氢反应器的运行状况，而没有考虑两段加氢反应器组合的性能。在串联型乙炔加氢反应系统中，

寻找出最佳的两段加氢反应器的催化剂切换周期使系统的目标函数值达到最优。一段加氢反应器中的催化剂通常使用 12 个月左右, 催化剂使用之初, 其具有较高的选择性和活性。使用较低的加氢量以及入口温度, 就能够实现乙炔的转化率达到 90% 以上。然而, 随着反应过程的进行, 催化剂的活性和选择性不断降低, 副反应生成的绿油会覆盖催化剂, 从而影响催化剂的性能, 故需要增加入口温度和氢气以满足系统要求。二段加氢反应器中的催化剂通常使用 3-6 个月时间, 催化剂的性能处于较高的活性状态, 故在生产过程中作为保护段保证出口乙炔气体含量满足系统要求。在工业应用中, 大量研究出的催化方法根据操作经验提高温度来保证乙炔的转化率。但是, 该方法没有综合考虑入口温度和加氢量之间的相互影响以及合理的对系统进行动态优化。

综上所述, 串联型乙炔加氢反应过程是带有约束的复杂动态优化问题。解决串联型乙炔加氢反应过程的整体经济效益达到最优的问题, 寻求两段加氢反应器不同催化运行周期下, 控制变量的动态优化控制轨迹。根据具体的串联乙炔加氢动态优化问题以及变量约束提出增量式编码差分进化算法(Incremental-Encoding Differential Evolution, IEDE)进行求解。为了提升 IEDE 算法的收敛性和精确性, 提出结合约束排名变异算法的约束排名增量编码差分进化算法(Incremental-Encoding Differential Evolution with Constraint Ranking-based Mutation Operator, CRMO-IEDE), 使其能够高效、准确和快速的求解该复杂的动态优化问题。

1.2 乙炔加氢的生产工艺

在乙烯生产过程中, 串联型乙炔加氢反应系统的乙炔转化率和加氢的选择性直接影响产品的品质和产量, 乙烯气体中的乙炔会引发副反应生产绿油, 使催化剂的活性降低, 影响乙烯产品的质量和产量^[18]。加氢反应系统的出口的乙炔会对乙烯装置的下游催化剂污染, 造成乙烯产品质量不合格。如何脱除乙烯气体中的乙炔是串联型乙炔加氢反应系统的主要目的。化工行业制取乙烯的装置工艺极其复杂, 且对原材料消耗大。在串联型乙炔加氢反应系统中, 存在不确定性、非线性、耦合性以及大滞后性等特点造成系统的控制更加复杂。应用智能优化算法实现对整个生产过程的优化控制, 合理配置两段加氢反应器的切换周期以及提高乙烯产量、降低原料消耗使系统整体经济效益最优。

催化选择加氢技术^[19,20]是指在催化剂选择加氢存在的条件下, 通过一系列的工艺操作, 使乙炔等不饱和烃加氢生成相应的烯烃和烷烃, 从而满足系统生产要求。加氢技术是一种流程简单, 能量消耗小、污染少的高效加氢催化剂的研发, 故催化选择加氢使乙炔转化为乙烯是最经济和最普遍接受的方法。由于加氢反应系统中脱除乙炔过程中裂解气体分离流程中所处部位的不同, 可以分为前加氢和后加氢两种方法^[21]。前加氢^[22,28]即在脱甲烷塔前进行的加氢脱炔, 其工艺流程是在高温裂解气脱除一氧化碳、硫化氢等酸性气体, 不经过精馏分离, 开始进行选择加氢工艺脱除乙炔的过程。

前加氢技术的优点有：分离流程简单，设备投资少；不需要外部加氢；操作能耗低、生产绿油少等。但是其缺点是物料中含有大量的氧气和一氧化碳，若操作不当，反应器容易发生飞温和漏炔现象，影响生产装置的稳定性以及产品质量。

后加氢^[23]工艺使用更为普遍，其位于脱乙烷单元之后。后加氢工艺流程是在分离出裂解气中含有氢气、甲烷和其他的碳三和碳四以上等气体，再将氢气适量的加入到所得到的纯碳二气体中进行选择性加氢，该过程的主要目标是生产出合格的乙烯产品。后加氢过程则具有以下优点：按需配入适量的氢气，提升生产装置的性能，降低了乙烯产物的损失；加氢产品质量稳定，通过控制外部变量，保证出口乙炔气体满足系统要求；引发催化剂中毒的杂质低，催化剂使用寿命延长，加氢反应平稳易控；反应温度容易控制，不易发生飞温的危险等^[24]。而对于后加氢反应模型，通过合理的加氢配置和入口温度的控制来对整个反应器产量和质量，从而使整个经济效益达到最优。其缺点是工艺流程更加复杂，投资费用也较高。

串联型乙炔加氢反应系统是工业乙烯装置流程中的重要设备之一，它对乙烯产品的收率和质量有着重要的影响。乙炔加氢指的是在催化剂的作用下，通过加入适量的高纯度氢气，使碳二馏分中的乙炔和氢气发生反应转换成乙烯以及少量的乙烯和氢气发生反应生成乙烷。串联型乙炔加氢反应系统的复杂性包括：其一，随着使用时间的增长，催化剂的活性和选择性都会下降，且副反应生成的绿油对催化剂的活性有着不良影响，这是一个不可控因素；其二，其位于乙烯装置的中部，可控条件少且没有足够的重视，其研究不像对裂解炉、精馏塔那么成熟，先进控制应用少。故对串联型乙炔加氢反应系统的优化控制是非常有必要的。在相对稳定的条件下，对乙炔加氢反应器进行建模与优化，不仅可以把乙炔加氢反应器出口的乙炔浓度降低到满足实际的工艺要求，而且还可以增加产品乙烯的产量和提高整个生产流程的经济效益。

1.3 乙炔加氢优化现状

在乙烯生产装置中，串联型乙炔加氢反应系统对乙烯产品的质量和产量有着重要的影响。进入串联型乙炔加氢反应器的乙烷含量、乙烯含量和乙炔含量分别占所有气体含量的 12%~20%，75%~84%，1%~1.6%。其中，乙炔气体流量均值约为 $40\text{ kmol}\cdot\text{h}^{-1}$ 。为保证系统出口乙炔气体含量降低到 1ppm 以下以及保证聚合乙烯产品质量要求，其氢炔比需满足范围 1-2.25。加氢反应是在催化剂的作用下，合理配置加氢量以及入口物料温度，使乙炔气体最大限度加氢反应转化成为乙烯，且避免副反应发生造成的乙烯损失。故对串联型乙炔加氢反应系统进行优化不仅能够满足系统出口乙炔浓度含量低于工业要求且使乙烯产品质量满足系统要求的前提下，使系统的整体效益达到最大。

近年来，国内外对一段加氢反应器进行了大量研究且取得显著的成果。蒋达等^[29]根据实际的生产数据，第一次考虑对两段反应器进行催化剂切换周期的优化，使两段反应器的催化周期达到最优。但通过稳态优化方案对加氢量进行优化，并未考虑到温

度以及漏炔状况。胡宝龙等^[30]利用 Fluent 软件模拟乙炔加氢生产过程, 分析控制变量对其影响, 避免不良参数对系统的影响。Azizi 等^[31]研究进料温度和加氢量对乙炔加氢选择性的影响。通过优化一段加氢反应器的控制参数, 提升乙炔加氢工艺以及装置性能, 但未对串联型乙炔加氢反应系统进行整体的分析研究。Abilov 等^[32]基于钨催化剂的乙炔加氢反应器进行模型建立, 并结合实时优化算法来适应变化的生产工艺条件。蒋明敬等^[33]利用化工模拟软件对乙炔加氢过程模拟计算, 得到最佳反应温度, 提高催化剂的性能。但没有对温度进行动态控制, 只找到满足系统要求的稳态温度。此外, 国内外大量研究人员对乙炔加氢反应装置、催化剂以及优化操作使乙炔加氢反应过程满足乙烯生产装置要求^[34]。通常只研究一段加氢反应器进行性能优化, 忽略对整体串联型乙炔加氢反应系统的角度进行对应的研究分析。其原因可能是因为: 二段反应器中乙炔含量非常少, 通过机理法建模实现比较困难且与实际工厂数据不符; 其二因为在进行优化的时候, 只考虑一段加氢反应器的乙烯产量或者出口乙炔含量, 而忽略了二段加氢反应器的作用。其三是因为加氢反应器位于整个乙烯装置的中部, 可控的操作条件少且反应灵敏。其四是加氢反应本身的复杂性。随着技术的发展, 建立精确的工业模型以及相应的优化控制技术越来越受到人们的关注。特别是各种智能优化算法的发展, 使得解决复杂的工业难题成为可能。

实际生产中, 加氢反应器通过常规控制器的设定值对入口氢气和入口温度进行手动控制, 其设定值并不是由科学计算, 而是根据操作经验和出口气体分析确定, 控制效率低且容易造成乙烯损失以及影响产品质量。通过对串联乙炔加氢系统动态模型的建立, 采用优化方法寻求最佳工艺操作条件, 实现在保证产品质量的前提下, 同时考虑切换加氢反应器和催化剂再生费用的基础上, 提高产量, 增加效益, 减少能耗。因此, 对乙炔加氢反应的过程进行研究具有重要的实用价值。本文将运用化学反应工程技术、动态优化建模技术、数据分析与处理技术以及智能优化算法等方法, 对乙烯装置中的串联型乙炔加氢反应系统进行流程模拟以及工艺操作条件的优化, 即建立与实际化工生产过程相符的串联型乙炔加氢反应动力学模型, 并根据其生产工艺的要求, 采用动态优化的方法找到乙炔加氢反应器的最优操作控制条件, 从而实现对串联型乙炔加氢反应系统的控制与优化。

1.4 动态优化问题描述以及现状

1.4.1 动态优化问题描述

化工过程动态优化是指在工业生产过程所给定的操作条件下, 求出使该过程系统的目标函数值达到最优的控制轨迹。动态优化也可以称作最优控制, 其模型包含一个随时间变化的动态系统, 动态系统一般由一组微分代数方程进行描述, 也称为动态模型。其中, 微分方程用来描述系统的动态特性, 例如质量、能量与动量守恒关系, 代数方程用来保证模型中的物理和热力学关系。简而言之, 动态优化就是对已经建立的

动态模型实施优化控制，使得整个优化过程的性能指标达到最优的方法。

过程优化问题可以按实际应用情况分为结构优化和参数优化。结构优化是对概念设计以及工艺和流程等进行优化。参数优化是对已确定的化工生产流程中的操作参数进行优化，用于对生产瓶颈的优化，通过分析生产过程并且对某个流程的关键设备操作参数进行优化。在满足各类约束的条件下，通过合理的控制使目标值达到最优^[40]。

动态优化问题的数学表达式来描述如下：

目标函数：

$$\max obj = \psi(x(t_f), t_f) + \int_{t_0}^{t_f} \varphi(x_i(t), u(t), p, t) dt \quad (1-1)$$

约束条件：

$$\frac{dx(t)}{dt} = f(x(t), u(t), p, t) \quad (1-2)$$

$$x(t_0) = x_0 \quad (1-3)$$

$$g_i^{path}(x(t), u(t), p, t) \leq 0, i = 1, \dots, m_1 \quad (1-4)$$

$$h_i^{path}(x(t), u(t), p, t) = 0, i = 1, \dots, m_2 \quad (1-5)$$

$$g_i^{end}(x(t_f), u(t_f), p, t_f) \leq 0, i = 1, \dots, m_3 \quad (1-6)$$

$$h_i^{end}(x(t_f), u(t_f), p, t_f) = 0, i = 1, \dots, m_4 \quad (1-7)$$

$$u^L \leq u(t) \leq u^U, p^L \leq p \leq p^U \quad (1-8)$$

其中， obj 表示目标函数值，包含与终端时刻 t_f 状态相关的 Mayer 项 $\psi(x(t_f), t_f)$ 和与时间区间 $[t_0, t_f]$ 相关的 Lagrange 项 $\int_{t_0}^{t_f} \varphi(x_i(t), u(t), p, t) dt$ ； $x(t) = [x_1(t), x_2(t), \dots, x_{n_x}(t)]$ 为系统状态变量， $u(t)$ 表示待优化的控制变量，其取值范围为 $[u^L, u^U]$ 。 p 表示待优化的时不变参数，其取值范围为 $[p^L, p^U]$ 。 $x(t), u(t)$ 都是关于时间的函数。(1-2)表示描述系统动态模型的微分方程组；(1-3)表示该系统的初始状态。(1-4)、(1-5)表示在整个动态系统的整个时间区间 $[t_0, t_f]$ 必须要满足的等式与不等式路径约束，(1-6)、(1-7)表示系统终端约束。(1-8)表示各种特性控制变量的取值范围。由以上描述可知，在给定的时间区间内寻找到最优控制 $u^*(t)$ ，使目标函数 obj 最大。与动态优化相对应的是静态优化，这里的静态优化使是没有时间变量的系统或者是处于稳定状态的动态系统。

1.4.2 动态优化方法的现状

随着科学技术的发展，传统的简单模型无法准确描述实际生产过程，而建立符合实际生产状况的复杂的模型能更精确的描述问题。动态优化问题在理论研究和工业应用领域等方面的发展都有着令人瞩目的成就。动态优化问题往往存在规模大、非线性强、非连续、非可导和多峰等特点，这些问题却普遍存在在实际生产过程中，成为研究的热点和难点问题。

上世纪 60 年代, 航天航空的高速发展促进了动态优化技术的迅速发展, Pontryagin 极大值原理^[42,43]和 Bellman 动态规划法^[6]的成为主流的求解动态优化方法。但该方法在实际运用中存在诸多约束, 故近年来对于应用间接法求解实际过程的动态优化问题很少得到研究。

基于梯度的传统动态优化算法要求动态优化问题具有连续性、可导性和简单等条件, 且对初值的取值较为敏感, 容易陷入局部最优, 以及对于动态优化问题的梯度计算复杂。这些原因大大限制了梯度算法的应用范围。而进化算法不需要梯度信息、处理非线性能力强、算法实现简单、不需要依赖于初值等优点, 使之在动态优化领域中得到广泛的应用。

进化算法, 也称为智能计算方法。进化算法有差分进化算法、遗传算法、蚁群优化算法和粒子群优化算法等。其中, 差分进化算法(Differential Evolution, DE)^[45]包括交叉、修复、变异和选择等操作。具有较强的优化性能, 在求解非线性反应器的动态优化问题具有较强的优势。Wang 和 Chiou^[46]为包含约束的微分代数系统的动态优化问题改进了 DE 算法, 并通过罚函数法来确保最终获取的解在可行域内。在求解实际问题中显示了较好的鲁棒性和求解效率, 并将其应用与化学反应器的设计和机器人手臂设计的问题中, 大大提升求解效率和鲁棒性。Badu 和 Angira^[47,48]为化工过程优化问题提出了改进的差分算法(Modified Differential Evolution, MDE), 在求解实际问题中表明, MDE 具有更快收敛速度的同时保证最优解的求解质量。Amgira 和 Santosh^[49]将三角差分进化算法(Trigonometric Differential Evolution, TDE)与经典 DE 用于动态系统的求解, 在计算精度和计算代价优势较大。Das 和 Suganthan^[50]在 DE 算法的综述文章中指出, DE 算法的变异算子完全随机选择个体参与变异, 存在选择压力低、收敛性能差的不足。为了更好处理带有约束的动态优化问题, 利用排名变异算子(Ranking-based Mutation Operator, RMO)^[51]来加强 DE 算法的收敛速度和精度。遗传算法(Genetic Algorithms, GA)^[54]是受生物遗传和进化机制的启发, 提出的一种适合于复杂系统优化的自适应概率优化技术, 并有效用于经典的最优补料问题。Pham 等^[55,56]应用 GA 算法或其改进的算法解决动态优化问题的效率和降低陷入局部最优解的概率, 并用于化工过程动态优化问题的求解。Qians 等^[57]提出区域收缩策略的迭代遗传算法求解动态优化问题。将有约束的动态优化问题转变为无约束动态优化问题。蚁群优化算法(Ant Colony Optimization, ACO)^[58]是一种新型的启发式搜索算法。Rajesh 等^[59]将蚁群优化算法应用于动态优化问题的求解中, 通过仿真结果可以得到与基于梯度的动态优化方法接近的结果。Zhang 等^[60]人采用基于迭代策略的蚁群算法提升了算法的求解精度和鲁棒性, 但是计算时间过长。模拟退火(Simulated Annealing, SA)^[61]是借鉴统计热力学中物质退火方法而提出来的, 在批式反应器中, 其主要应用与最大产量和最少操作问题中。混合算法是将两种智能优化算法混合应用的一种方法, Shelokar 等^[62]将门特卡罗随机算法与禁忌算法结合的一中动态优化算法。而 Sarkar 等^[63]提出了混合人工神经网络

络与模拟退火的混合算法，并应用于求解蛋白质合成优化问题，其优化结果相比与其他算法较优。粒子群优化算法(Particle Swarm Optimization, PSO)是一种新颖的群体优化计算方法，通过对粒子在搜索空间中追随当前的最优粒子来完成搜索。Wu 和 Zhu^[64]引入区域收缩策略到 PSO 中，应用迭代 PSO 算法来求解动态优化问题。Zhou 和 Liu^[65]为了进一步提升 PSO 算法的搜索效率和收缩速度，在 PSO 中引入控制离散的方法。在 IEEE 举行的约束优化竞赛中，DE 算法在求解负载约束优化等复杂优化问题上常常表现出比 PSO 等其他算法更好的搜索能力和鲁棒性。

与传统优化算法相比，进化算法的优势显著。首先，进化算法通常以种群实现组织搜索，从全局多点进行随机的搜索，故能够以较高概率找到全局最优解。然后，进化算法不需要依赖模型信息以及计算函数的导数信息等其他相关信息，而是根据评价值的优劣进行搜索指导。最后，进化算法能够有效处理有约束的复杂动态优化问题，且能够根据实际问题的模型进行针对性改造，应用范围更广。

1.4.3 动态优化和静态优化

动态优化问题是求解泛函极值的一类最优化问题，式(1-1)~(1-8)所描述的就是单目标约束动态优化问题。在实际生产过程中求取一般函数的极值的另一种较传统的求解最优化问题的方法是静态优化方法。静态是指无时间变量的系统或者处于平衡状态下的动态系统。静态系统的数学模型中只有代数方程，而没有微分或者差分方程。故静态优化问题，就是选择系统中的最优参数使目标函数值达到最优。

动态优化问题中目标函数值的自变量中含有动态系统的状态变量，动态优化问题中的状态变量一般是时间上的函数。简言之，动态优化问题也被称为最优控制问题，即选择系统中的运动轨线，在满足系统约束的同时使目标函数值达到最优。静态优化和动态优化的异同点如下^[40]：

静态优化与动态优化的相同点：度量目标函数的优劣；利用数学模型描述问题；处理方式有分析法和直接法。

静态优化与动态优化的不同点：数学模型上属于不同的范畴。静态优化问题是一种运筹学问题，而动态优化问题属于变分学问题；基础理论框架不同；数学模型表示方式不同，静态优化模型只有代数方程，动态优化模型存在微分代数方程来表示。

1.5 本文的主要内容和章节安排

本文以乙烯装置中的串联型乙炔加氢反应系统为研究对象，利用工业实际生产数据，考虑到加氢反应动力学、加氢反应原理、加氢反应器模型和催化剂失活模型等，建立一段加氢反应器的动态模型。因二段加氢反应器作为乙烯生产的保护段的特殊性以及加氢反应过程的特殊性无法用机理模型进行描述，故根据生产数据中加氢选择性拟合二段反应器动态模型。将建立的一段和二段加氢反应器模型，结合串联乙炔加氢系统生产约束要求，建立其串联乙炔加氢动态优化模型。根据建立的动态模型，对模

型中的操作条件进行动态特性分析, 确定控制变量以及系统出口气体含量要求。同时考虑加氢反应器切换以及催化剂的切换再生产生的费用。同时, 本文利用差分进化算法对串联型乙炔加氢反应问题进行求解, 考虑系统的实际生产状态中的约束情况, 结合增量编码法使系统的控制变量满足周期性递增的要求。从而使系统在满足所有系统要求的情况下, 使对应切换周期的系统效益达到最优。而基于标准的增量编码差分进化算法存在收敛性不足等缺点, 提出了采用约束排名算法来加速原来的增量编码差分进化算法来增强其收敛速度和选择性等。基于约束排名算法的增量编码差分进化算法能够有效的处理动态优化问题, 加速了个体的选择能力, 减少了算法求解最优值的时间消耗。同时, 与其他静态优化方案进行比较, 证明动态优化算法的优势。

全文共分为五章, 内容安排如下:

第 1 章, 本章首先介绍了本文的研究背景和意义, 然后介绍了乙炔加氢反应的生产工艺以及研究现状, 最后简单介绍了动态优化问题描述以及发展现状。

第 2 章, 本章建立了乙烯装置中的串联型乙炔加氢反应系统的动态模型。首先简述乙炔加氢反应过程和基本反应原理, 基于相关文献研究建立了考虑催化剂性能动态变化的一段加氢反应器的机理动态模型。同时根据二段反应器的特殊性, 依据实际生产数据拟合出二段加氢反应器动态模型。然后, 根据乙烯装置实际的生产数据和生产约束要求, 建立串联乙炔加氢动态优化模型同时与实际生产数据进行比较。最后, 根据所建立的动态模型, 对控制变量加氢量和入口温度进行灵敏度分析。讨论了相同进料工况下操作条件变化对出口物料变化的影响。

第 3 章, 本章提出了增量式编码差分进化算法对串联乙炔加氢反应系统动态模型进行动态优化。因控制变量需满足周期性递增的条件, 故应用增量编码法来处理这一约束。首先简单介绍了差分进化算法、控制变量参数法和增量编码法等。然后介绍了基于控制向量参数的差分进化算法的实现具体步骤和约束处理方法。最后介绍了固定两段加氢反应器催化剂切换周期条件下, 实现串联型乙炔加氢动态模型的动态优化并与实际生产进行对比, 验证其有效性。

第 4 章, 本章提出了基于约束排名增量编码的差分进化算法用以提升增量式编码差分进化算法的收敛性和准确性。首先, 简单介绍了约束排名算法以及实现过程和该算法的具体实现过程和处理方法。然后应用该方法以及枚举法求解出串联乙炔加氢动态模型的两段反应器最佳切换周期以及对应周期条件下的控制轨迹, 使用最少的加氢量使系统效益达到最优。最后将该方法与增量编码差分进化算法进行比较, 验证其收敛性和准确性并与其他优化方案进行比较, 验证动态优化方法的有效性。

第 5 章, 本章对全文所做的工作进行相关总结, 提出研究中尚需解决的问题并对相关领域研究方向做出展望。

第 2 章 串联型乙炔加氢反应过程模型

2.1 乙烯装置乙炔加氢反应流程

轻柴油和石脑油作为乙烯生产的主要原材料，通过管式裂解炉热裂解生产乙烯及其他副产品是乙烯生产的主要方式。两段加氢反应器是乙烯装置中的重要设备，其控制效果直接影响乙烯收率、质量以及后续反应系统的稳定性。串联乙炔加氢反应系统的主要设备有两段加氢反应器、乙烯干燥器和绿油塔等。将在线的一段加氢反应器和二段加氢反应器进行串联。乙烯工厂中，进入串联型乙炔加氢反应系统中的乙炔气体含量约为 1.8%。为了生产出满足产品质量的聚合级乙烯产品，最大限度的消耗乙炔气体，将乙炔脱除到 ppm 级别，且提升乙烯产品的产量和质量，延长催化剂的使用时间来最大化系统的效益。

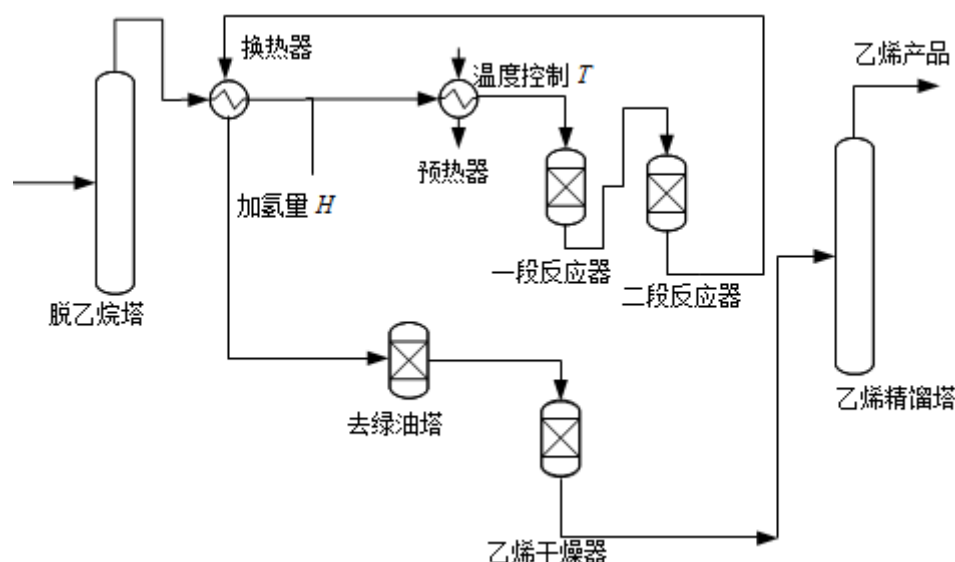


图 2.1 乙炔加氢反应过程

Fig. 2.1 Flowchart of acetylene hydrogenation process.

图 2.1 是后加氢工艺中串联型乙炔加氢反应过程的工艺流程图。在乙炔加氢工艺流程中，物料从脱乙烷塔塔顶流出，通过换热器与反应器出口物料进行热交换。随后，加入适量的高纯度氢气进入预热器，将物料加热到温度设定值后进入一段加氢反应器中，为满足生产工艺要求，其需要转化 60% 以上的乙炔气体，并最大限度避免副反应的发生。一段加氢反应器出口物料加入适量氢气混合后进入二段加氢反应器中。因一段加氢反应器消耗了大部分的乙炔气体，进入二段加氢反应器的乙炔气体占入口物料含量的 0.4%~0.8%。二段加氢反应器作为保护段，脱除剩下的乙炔，催化剂的活性和选择性很高，能够满足系统生产要求。最后经过脱绿油塔去除物料中的绿油，物料流入干燥器中的乙烯精馏塔生成乙烯产品^[67]。

准确的动力学模型是进行优化的基础，用来寻找最优控制集来提高乙炔加氢反应的选择性，同时减少氢气使用量。串联型乙炔加氢反应系统的重要控制目标是：在保证出口乙烯产品中乙炔浓度不超标的前提下，使得反应平稳、安全运行，同时满足乙烯损失最小，催化剂使用周期长，即使串联型乙炔加氢反应系统的整体效益达到最优。本文所解决的是串联型乙炔加氢反应过程中使经济效益最优的最佳催化剂切换周期及其各自周期下操作条件的优化过程。因一段加氢反应器中除去了大部分的乙炔，进入到二段加氢反应器内乙炔含量极少，无法用宏观或者微观的机理对二段加氢反应器内部机理进行相应的描述，其模型的建立是根据实际的生产数据进行拟合加氢选择性的线性模型。需要针对两段加氢反应器建立对应反应器的动态模型，同时考虑到催化剂失活特性。然后，根据建立的两段加氢反应器的动态模型，结合实际生产的工艺以及系统要求，建立串联型乙炔加氢反应系统的动态模型。最后，对建立的乙烯生产装置中的串联乙炔加氢反应系统过程的动态模型并进行模型的可用性分析以及对可控变量进行影响分析。

2.2 一段加氢反应器模型

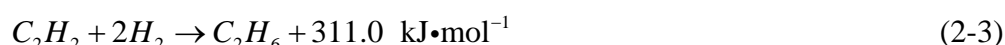
2.2.1 乙炔加氢反应原理

乙炔加氢反应在催化剂存在的条件下，将入口气体中的乙炔通过催化加氢反应转为乙烯。反应器中有可能发生如下几个反应^[66]：

主反应：



副反应：



高温时会发生如下裂解反应：



碳二加氢主反应式(2-1)主要分为以下三个步骤完成^[67]：

步骤 1：乙炔和氢气分子扩散到催化剂表面，催化剂的活性中心吸附乙炔或氢气分子。

步骤 2：吸附在催化剂活性中心上的乙炔分子再吸附氢气分子进行加氢反应，或在催化剂活性中心上的氢气分子吸附乙炔分子进行加成反应，都会在催化剂活性中心生成乙烯。

步骤 3：催化剂的活性中心吸附乙炔分子的能力远大于吸附乙烯分子的能力，所以乙炔加氢生成乙烯后，便很快脱附。若不能及时完成脱附，乙烯会进一步发生加氢反应生成乙烷，副反应发生造成乙烯和氢气的损失。

根据以上分析可知, 对与串联型乙炔加氢反应系统模型的整体经济效益而言, 只发生主反应(2-1)是最理想的状态, 这样既能实现除炔要求, 同时增加了乙烯的产量。而副反应(2-2)和(2-3)会造成额外的乙烯损失和氢气的消耗。当参与反应的氢气含量过低时, 会造成副反应(2-4)发生同时生成的绿油。生产的绿油会污染催化剂活性, 使催化剂的加氢能力降低, 催化剂使用周期变短。过高的温度会导致裂解反应(2-5)的发生, 造成重大事故。当氢气不足或温度过高时, 容易发生聚合反应生成绿油, 绿油会对加氢反应催化剂的性能造成不良影响。从式(2-1)~(2-5)中, 主反应是少量的乙炔与氢气进行反应, 副反应(2-2)是含量较多的乙烯和氢气发生反应。合理的控制操作条件, 动态控制入口的氢气, 避免过量的氢气加入促进副反应的发生; 合理的控制入口温度, 使主反应速率高于副反应速率, 减少乙烯消耗。利用控制变量控制催化剂的选择性和活性, 使整个加氢反应过程避免副反应的发生。满足生产要求的前提下, 提升两段加氢反应系统的乙烯收益。

2.2.2 乙炔加氢反应动力学模型

串联型乙炔加氢反应系统位于乙烯生产流程的中后段, 是乙烯生产过程中的重要组成部分之一, 对乙烯产品的产量和质量有着重要影响。而处于中间的串联乙炔加氢反应系统的控制变量少、反应灵敏以及反应复杂等问题。准确的动力学是成功模拟反应器的性能的基础, 是动态优化求解的关键因素。本文选用的加氢反应器动力学模型更接近实际工业应用的反应动力学模型^[68,69], 考虑加氢反应的主反应式(2-1)和副反应式(2-2)来描述加氢反应的动力学模型, 忽略其他的副反应过程, 乙炔和乙烯加氢反应动力学方程^[70]如下:

$$r_{C_2H_2} = \frac{k_1 p_{C_2H_2} p_{H_2}}{\left(1 + (K_{H_2} p_{H_2})^{0.5} + K_{C_2H_2} p_{C_2H_2} + K_{C_2H_4} p_{C_2H_4} + K_{C_2H_6} p_{C_2H_6}\right)^3} \quad (2-6)$$

$$r_{C_2H_6} = \frac{k_2 p_{C_2H_4} p_{H_2}}{\left(1 + (K_{H_2} p_{H_2})^{0.5} + K_{C_2H_2} p_{C_2H_2} + K_{C_2H_4} p_{C_2H_4} + K_{C_2H_6} p_{C_2H_6}\right)^3} \quad (2-7)$$

其中:

$$k_i = k_{0,i} \exp\left(-\frac{E_i}{RT}\right) \quad (2-8)$$

其中, $r_{C_2H_2}$ 表示主反应(2-1)乙炔的反应速率, 单位为 $kmol \cdot kg^{-1} \cdot hr^{-1}$; $r_{C_2H_6}$ 表示副反应(2-2)乙烯的反应速率, 单位为 $kmol \cdot kg^{-1} \cdot hr^{-1}$; $k_{0,i}$ 表示反应 i 表示反应式(2-1)和(2-2)的指前因子, 单位为 $kmol \cdot kg^{-1} \cdot hr^{-1} \cdot kPa^{-3}$; E_i 表示加氢反应 i 的活化能, 其大小表示的是反应的难易程度, 其值越大, 反应所需温度越高, 单位为 $kJ \cdot kmol^{-1}$; K_{H_2} 表示的是氢气的吸附常数, 单位为 kPa^{-1} ; $K_{C_2H_2}$ 表示为乙炔的吸附常数, 单位为 kPa^{-1} ; $K_{C_2H_4}$ 表示乙烯的吸附常数, 单位为 kPa^{-1} ; $K_{C_2H_6}$ 表示乙炔的吸附常数, 单位为 kPa^{-1} ;

示乙烷的吸附常数，单位为 kPa^{-1} ； p_i 表示气体 i 的分压，单位为 kPa ； T 表示反应的动力学温度，单位为 K ； R 表示气体常数，单位 $kJ \cdot kmol^{-1} \cdot K^{-1}$ 。通过拟合得到 $k_{0,i}$ 和 E_i 的值进行校正，使建立的模型与实际生产过程相吻合。

2.2.3 乙炔加氢反应器模型

建立串联型乙炔加氢动态模型，需要建立合理的数学模型来模拟实际反应器的运行状况^[71]。根据乙烯工厂中的串联型乙炔加氢反应系统特性，构建一段加氢反应器模型做出以下假设：第一，与流体的流动方向相垂直的横截面上来看，流体的流动速度是均匀分布；第二，加氢反应器的径向上的温度梯度、速度梯度、浓度梯度均可忽略不计；第三，轴向传热效果仅仅根据平推流的总体流动情况来确定；第四，反应过程中的体积变化和压力变化均可忽略不计；第五，加氢反应器于稳定的状态；第六，加氢反应器是绝对绝热的反应器。采用一维拟均相模型模拟实际生产的加氢反应器的主要特征，与实际的工业应用相符。故本文采用的乙炔加氢反应器模型是在等压、绝热、拟均相、一维、平推流模型如式(2-9)和式(2-10)所示。

物料平衡方程

$$\frac{dF_i}{dz} = \sum (\rho \times r_j) \times S \quad (2-9)$$

能量平衡方程

$$\frac{dT}{dz} = \frac{-S \times \rho \times \sum (\Delta H_i \times r_j)}{\sum (F_i \times C_i)} \quad (2-10)$$

其中， ρ 表示催化剂密度，单位为 $kg \cdot m^{-3}$ ； r_j 表示反应 j 表示反应式(2-1)和式(2-2)在催化剂上的反应速率，单位为 $kmol \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$ ； S 表示反应器的横截面积，单位为 m^2 ； F_i 表示气体 i 的摩尔流速，单位为 $kmol \cdot h^{-1}$ ； ΔH 表示反应焓变，单位为 $kJ \cdot kmol^{-1}$ ； z 表示反应器长度，单位为 m ； C_i 表示气体 i 的比定压热容，单位为 $kJ \cdot kmol^{-1}$ ； T 表示反应热力学温度，单位为 K 。

具体的反应在引入反应器模型在没有考虑催化剂失活条件下的形式如下：

$$\frac{dF_{C_2H_6}}{dz} = \rho_B \times (r_{C_2H_6}) \times S \quad (2-11)$$

$$\frac{dF_{C_2H_4}}{dz} = \rho_B \times (r_{C_2H_2} - r_{C_2H_6}) \times S \quad (2-12)$$

$$\frac{dF_{C_2H_2}}{dz} = -\rho_B \times (r_{C_2H_2}) \times S \quad (2-13)$$

$$\frac{dF_{H_2}}{dz} = -\rho_B \times (r_{C_2H_2} + r_{C_2H_6}) \times S \quad (2-14)$$

$$\frac{dT}{dz} = \frac{-S \times \rho_B \times [r_{C_2H_2} \times \Delta H_1 + r_{C_2H_6} \times \Delta H_2]}{F_{C_2H_6} \times C_{C_2H_6} + F_{C_2H_4} \times C_{C_2H_4} + F_{C_2H_2} \times C_{C_2H_2} + F_{H_2} \times C_{H_2}} \quad (2-15)$$

其中, $F_{C_2H_6}$, $F_{C_2H_4}$, $F_{C_2H_2}$ 和 F_{H_2} 分别是表示为乙烷、乙烯、乙炔和氢气气体的摩尔流速, 单位为 $kmol \cdot h^{-1}$, ΔH_1 表示的是主反应(2-1)的反应焓变; ΔH_2 表示副反应(2-2)的反应焓变, 单位为 $kJ \cdot kmol^{-1}$ 。而实际生产过程总是伴随着催化剂的性能逐渐减少, 故在实际应用中需要考虑到催化剂的变化情况。

2.2.4 催化剂失活动力学模型

在化工生产的过程中, 催化剂能够有效促进反应的进行, 对于复杂的反应过程有着一定的控制作用。随着反应的进行, 催化剂在反应过程中不可避免的失活。为了更精确、更有效的对串联型乙炔加氢反应系统进行优化控制, 对催化剂失活动力学的研究必不可少。催化剂失活反应动力学的描述很复杂, 因为催化剂的活性受到反应速率、操作条件和入口物料等的共同影响。定量地表示出随时间变化, 催化剂选择性和活性变化过程对于优化催化剂的使用寿命以及提升其效能具有重要意义。表观速率公式如下:

$$r_{i,d}(t, T) = r_i(T) a_i(t, T) \quad (2-16)$$

其中, $r_{i,d}(t, T)$ 是指某一时刻、温度下反应物在催化剂上的反应速率, $r_i(T)$ 是指反应物某一温度下在新鲜催化剂上的反应速率, 即式(2-6)和(2-7)求解的乙烷和乙炔的反应速率。 $a_i(t, T)$ 表示某一时刻, 某一温度下的失活系数, 其表达式如公式(2-17)所示。

$$\frac{da_i}{dt} = -k_{a,i} \exp\left(-\frac{E_{a,i}}{RT}\right) a_i^n \quad (2-17)$$

其中, n 表示反应的失活级数; i 分别表示的是乙炔加氢反应过程中的主反应(2-1)和副反应(2-2)的反应过程; $E_{a,i}$ 表示的是失活反应的活化能, 单位为 $kJ \cdot kmol^{-1}$; R 表示气体常数, 单位为 $kJ \cdot kmol^{-1} \cdot K^{-1}$; T 表示反应的热力学温度, 单位为 K ; $k_{a,i}$ 表示催化剂失活的指前因子, 单位为 $kmol \cdot kg^{-1} \cdot h^{-1} \cdot kPa^{-3}$ 。

考虑到催化剂失活条件下, 化学反应器模型应用如下:

$$\frac{dF_{C_2H_6}}{dz} = \rho_B \times (r_{C_2H_6} \times a_2) \times S \quad (2-18)$$

$$\frac{dF_{C_2H_4}}{dz} = \rho_B \times (r_{C_2H_2} \times a_1 - r_{C_2H_6} \times a_2) \times S \quad (2-19)$$

$$\frac{dF_{C_2H_2}}{dz} = -\rho_B \times (r_{C_2H_2} \times a_1) \times S \quad (2-20)$$

$$\frac{dF_{H_2}}{dz} = -\rho_B \times (r_{C_2H_2} \times a_1 + r_{C_2H_6} \times a_2) \times S \quad (2-21)$$

$$\frac{dT}{dz} = \frac{-S \times \rho_B \times [r_{C_2H_2} \times a_1 \times \Delta H_1 + r_{C_2H_6} \times a_2 \times \Delta H_2]}{F_{C_2H_6} \times C_{C_2H_6} + F_{C_2H_4} \times C_{C_2H_4} + F_{C_2H_2} \times C_{C_2H_2} + F_{H_2} \times C_{H_2}} \quad (2-22)$$

式(2-18)~(2-22)表示在催化剂失活条件下的反应器中的反应模型。在反应动力学模型、反应器模型和催化剂失活模型等基础上, 根据实际生产数据, 采用遗传算法和最

小二乘法等估计出模型参数。一段加氢反应器的动态模型根据生产数据中的各物料的摩尔流水以及入口温度，根据催化剂的使用时间。建立一段加氢反应器动态模型拟合出口处的乙烷、乙烯、乙炔、氢气的摩尔流速和反应器出口的热力学温度值等。

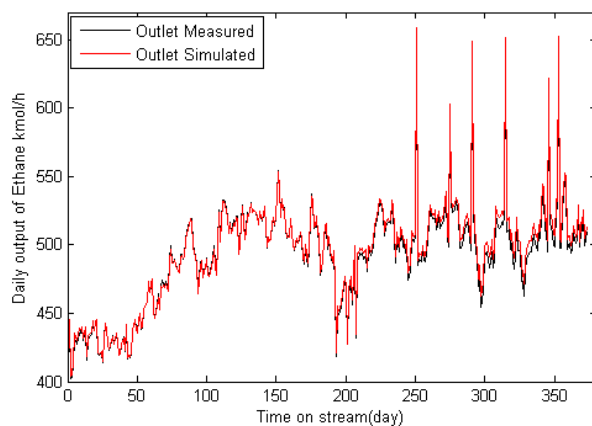


图 2.2 反应器出口乙烷的测量值与模拟值

Fig. 2.2 Measured and simulated values of reactor outlet ethane

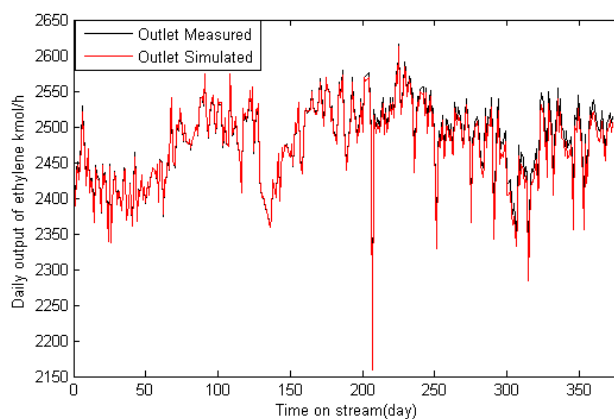


图 2.3 反应器出口乙烯的测量值与模拟值

Fig. 2.3 Measured and simulated values of reactor outlet ethylene

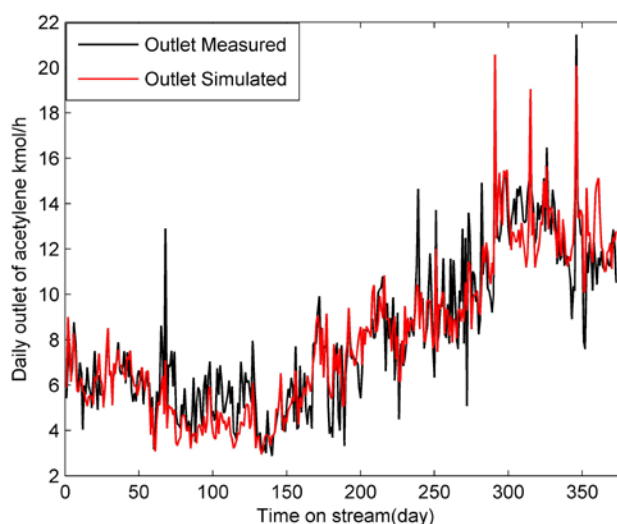


图 2.4 反应器出口乙炔的测量值与模拟值

Fig. 2.4 Measured and simulated values of reactor outlet acetylene

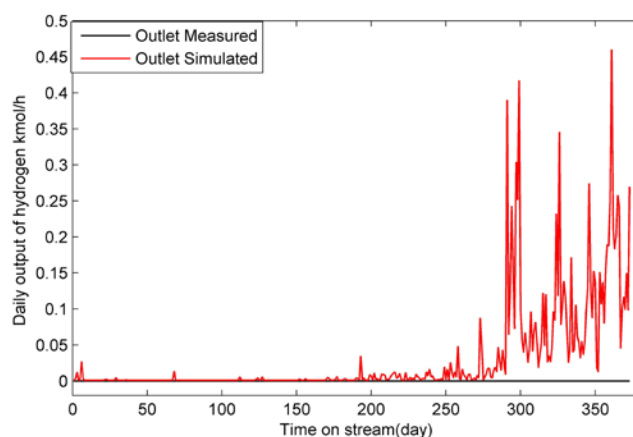


图 2.5 反应器出口氢气的测量值与模拟值

Fig. 2.5 Measured and simulated values of reactor outlet hydrogen

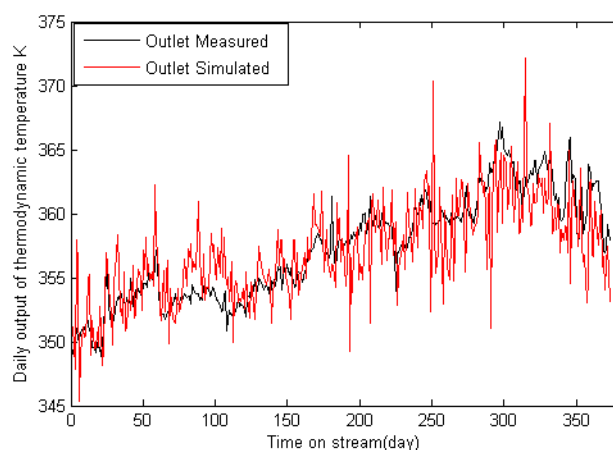


图 2.6 反应器出口热力学温度的测量值与模拟值

Fig. 2.6 Measured and simulated values of reactor outlet thermodynamic temperature

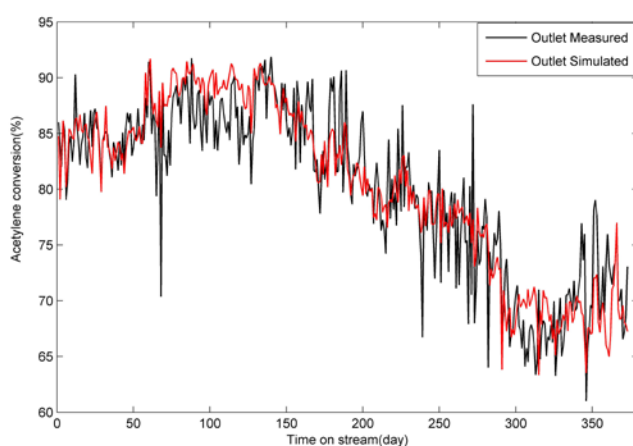


图 2.7 一段加氢反应器乙炔转化率

Fig. 2.7 Acetylene conversion of stage 1 reactor

在实际操作过程中，逐渐增加氢气的含量，同时入口温度相应的变化。图 2.2~2.6 显示了在相同的输入操作条件下（相同的入口乙炔、乙烯、乙烷、氢气含量和相同的热力学温度等），乙烷、乙烯、乙炔、氢气和热力学温度在生产过程中的测量值与模拟

值的出口含量变化。对应于不同的进料变化，相应的出口组成也会有所变化，只是不同时期的变化程度不同。其中，为了保证乙烯出口产品的质量，一段加氢反应器需除去 60% 以上的乙炔。图 2.7 显示在相同环境下，乙炔转化率的变化情况。在正常的工况条件下，一段加氢反应器中消耗的乙炔气体都达到 60% 以上。

2.3 二段加氢反应器模型

二段加氢反应器作为一段加氢反应器的保护段，需要将一段加氢反应器出口剩下的乙炔气体除去来满足系统的要求。少量的乙炔就会使乙烯装置下游反应中的催化剂中毒，为了保证乙烯产品的质量，串联乙炔加氢反应系统必须将乙炔气体降低到系统标准之下。串联的两段加氢反应器的除炔任务是一段加氢反应器除去大部分乙炔气体，二段加氢反应器除去剩余的乙炔，保证出口的乙炔气体含量低于 1ppm。同时，考虑反应器切换以及催化剂再生所需的费用，在满足系统生产条件的情况下，尽量延长催化剂的使用时间。因乙炔气体在二段加氢反应器中含量极少，无法用反应机理来描述实际的反应过程，故使用二段加氢反应器的历史数据拟合反应器的加氢选择性的线性规律。

在实际工业操作过程中，在二段加氢反应器的除炔能力下，减轻二段加氢反应器的除炔负荷分配，维持较高的一段加氢反应器中乙炔转化率。因二段加氢反应器催化剂使用周期较短，催化剂活性较强，根据实际生产数据，拟合得到二段乙炔增量与氢炔比近似为线性描述。其中二段氢炔比描述如下：

$$R2(d_{R2}) = s * (d_{R2})^2 + s1 * d_{R2} + s2 \quad (2-23)$$

其中， s 、 $s1$ 、 $s2$ 是拟合得到的参数值； d_{R2} 表示为二段加氢反应器的对应运行天数； $R2$ 表示的是二段加氢反应器的氢炔比，其是关于时间 d_{R2} 的数学表达式。二段乙炔增量描述如下：

$$x_{R2}(d_{R1}) = (2 - R2) * x_{R1C_2H_2}(d_{R1}) \quad (2-24)$$

其中， $(2-R2)$ 表示二段加氢反应器加氢选择性。 x_{R2} 表示的是出口乙炔增量，单位为 $kmol \cdot h^{-1}$ ； d_{R1} 表示的是一段反应器的运行天数； $x_{R1C_2H_2}$ 表示的是二段加氢反应器入口的乙炔流速，即一段加氢反应器出口的乙炔含量。对二段加氢反应器中的催化剂选择性变化过程用最小二乘法等拟合对应的线性数学表达式。加氢选择性用式(2-25)表示：

$$S = \frac{F_{C_2H_4,outlet} - F_{C_2H_4,inlet}}{F_{C_2H_2,inlet} - F_{C_2H_2,outlet}} \quad (2-25)$$

其中， S 表示的是反应器的加氢选择性， $F_{C_2H_4,outlet}$ 和 $F_{C_2H_4,inlet}$ 分别表示反应器出口和入口的乙烯流量。同理， $F_{C_2H_2,outlet}$ 和 $F_{C_2H_2,inlet}$ 分别表示反应器出口和入口的乙炔流量。

图 2.8 显示的是生产中的催化剂的选择性以及拟合出二段加氢反应器中的加氢选择

性。其中 120 天使用以内的催化剂的选择性近似为线性。图 2.9 显示的是二段加氢反应器出口乙烯增量的实际工业数据和模型数据的变化过程。

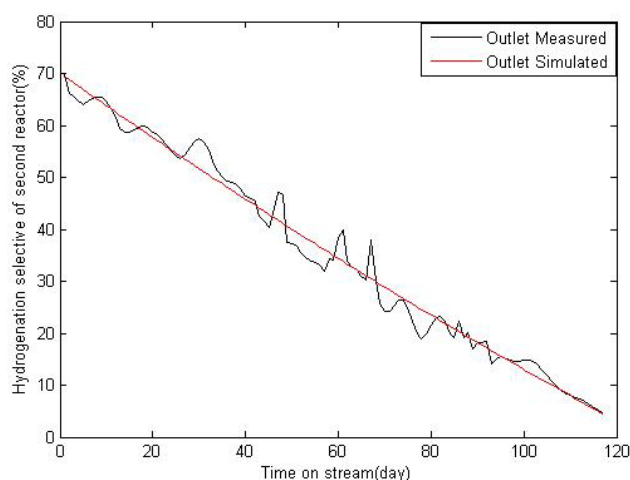


图 2.8 二段反应器加氢选择性

Fig. 2.8 Measured and simulated values of 2st reactor hydrogenation selectivity

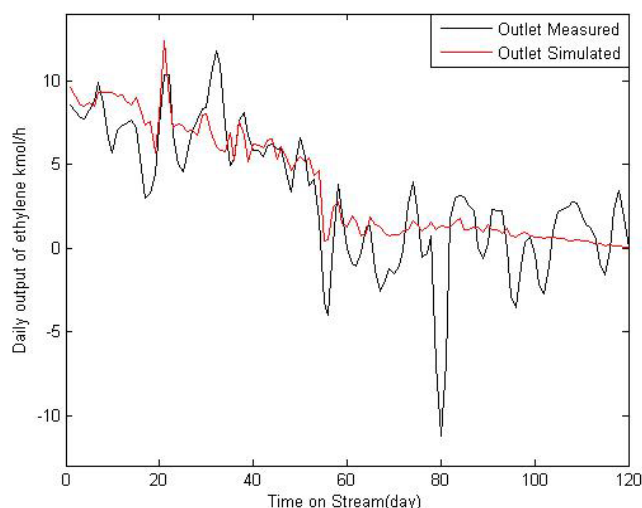


图 2.9 二段反应器出口乙烯的测量值与模拟值

Fig. 2.9 Measured and simulated values of 2st reactor outlet ethylene

2.4 串联型乙炔加氢动态优化问题描述

串联型乙炔加氢反应系统的重要控制目标是保证系统安全平稳运行条件下，出口乙烯质量达到标准，即出口乙炔浓度不超标，催化剂的运行周期长，乙烯损失最少以及使用最少的氢气等，即保证产品质量的前提下，整体的经济效益达到最优。使用动态优化方法，在满足系统要求的控制集中选择最优的可行控制集使系统的整体经济效益达到最优。通过已建立的串联乙炔加氢反应系统动态模型，采用优化方法寻求最佳工艺操作参数，可以实现在保证产品质量的前提下，提高产量，减少能耗，增加效益。根据以上描述以及动态优化问题的性能指标，可以将串联型乙炔加氢反应系统优化问题表述如下。

设定目标函数考虑到出口乙烯产量以及催化剂切换再生所需费用的整体效益最大，具体表达式如下：

$$\begin{aligned} \max \text{ obj} = & \left\{ \left(\sum_{d_{R1}=1}^{D_{i,R1}} (\Delta x_{R1C_2H_4}(d_{R1})) + \sum_{d_{R1}, d_{R2}=1}^{D_{i,R1}, D_{j,R2}} (x_{R2}(d_{R1}, d_{R2})) \right) * 24 * 28 * P_{C_2H_4} \right. \\ & \left. - P_{reg} (1 + [D_{i,R1} / D_{j,R2}]) \right\} / D_{i,R1} \end{aligned} \quad (2-26)$$

约束描述：

$$\begin{aligned} \frac{dx_{R1}(d_{R1})}{dz} &= f1(x_0, u(d_{R1}), r, d_{R1}) \\ x_{R2}(d_{R1}, d_{R2}) &= f2(x_{R1}(d_{R1}), d_{R2}) \\ x(t_0) &= x_0 \\ g(x_{R1}(d_{R1}), d_{R1}) &\leq 0 \\ H(d_{R2}) &\geq H(d_{R2}-1) \\ T(d_{R1}) &\geq T(d_{R1}-1) \\ u^L &\leq u \leq u^U \end{aligned} \quad (2-27)$$

其中，等式(2-26)表示的是一段和二段加氢反应器在一定的催化剂切换周期条件下使平均日收益达到最优， obj 表示为运行周期中的平均日收益。 $x_0 = (x_{0C_2H_6}, x_{0C_2H_4}, x_{0C_2H_2})$ 分别表示的是一段加氢反应器入口的乙烷、乙烯和乙炔气体的摩尔流速，单位为 $kmol \cdot h^{-1}$ 。 $x_{R1} = (x_{R1C_2H_6}, x_{R1C_2H_4}, x_{R1C_2H_2}, x_{R1H_2}, x_{R1T})$ 表示一段加氢反应器出口的乙烷、乙烯、乙炔和氢气的摩尔流速，单位为 $kmol \cdot h^{-1}$ ，以及出口物料的热力学温度，单位为 K。 $\Delta x_{R1C_2H_4}(d_{R1}) = x_{R1C_2H_4}(d_{R1}) - x_{0C_2H_4}$ 表示一段加氢反应器出口乙烯流速的摩尔增量，单位为 $kmol \cdot h^{-1}$ 。 x_{R2} 表示二段加氢反应器出口乙烯流速的增量，单位为 $kmol \cdot h^{-1}$ ，如式(2-23)和(2-24)。28 $kg \cdot kmol^{-1}$ 表示的是乙烯的分子量，24 表示加氢反应器的每日运行时间，求解出两段加氢反应器的每日乙烯产量； $P_{C_2H_4}$ 表示乙烯价格，其中 $P_{C_2H_4} = 7690$ 元/吨。 P_{reg} 表示每进行一次催化剂再生所需费用，其中， $P_{reg} = 300000$ 元。两段加氢反应器的切换周期以及取值范围分别为 $D_{i,R1} \in [300, 440]$ 和 $D_{j,R2} \in [100, 140]$ 。其中 i, j 根据离散阶段天数枚举出不同的一段和二段加氢反应器的切换周期进行标识， $[D_{i,R1} / D_{j,R2}]$ 取整表示两段加氢反应器一共进行催化剂再生的次数，用于计算切换成本。 $z \in [0, 3.16]$ 表示反应器的长度， d_{R1} 、 d_{R2} 分别表示为两段加氢反应器中催化剂当前使用天数，其取值范围分别为 $d_{R1} \in [0, D_{i,R1}]$ ， $d_{R2} \in [0, D_{j,R2}]$ 。 $x_{R1}(\bullet)$ 利用式(2-9)和(2-10)进行相应求解，表示一段加氢反应器进出口物料变化以及温度变化。 r 表示某一时刻的反应物在催化剂上的反应速率，利用式(2-16)、(2-17)以及(2-6)~(2-8)进行对应出口物料变化的求解。 $x_{R2}(\bullet)$ 表示二段加氢反应器进出口物料变化情况，利用式(2-23)和(2-24)进行二段加氢反应器乙烯增量的求解。 $g(\bullet)$ 不等式约束分别表示一段加氢反应器出口的乙炔气体流速含量低于系

统生产要求值、出口氢气流速含量小于系统生产要求。不等式约束 $H(d_{R2}) \geq H(d_{R2}-1)$ 和 $T(d_{R1}) \geq T(d_{R1}-1)$ 表示的是控制变量在控制过程中需要满足以下条件。加氢量根据二段反应器的运行天数呈现递增关系,则在反应器的整个运行期间内加氢量呈现周期性递增的条件;反应器入口温度在整个运行周期内逐渐递增。

上述优化问题是在反应过程满足物料平衡和能量平衡的前提下,通过控制一段加氢反应器的加氢流量、进料入口温度以及两段加氢反应器的合适运行周期(离散优化变量 $D_{i,R1}$, $D_{j,R2}$),在保证一段出口乙炔流速和氢气流速约束以及二段加氢反应器出口乙炔含量约束要求下,使得性能指标 obj 在一定意义下达到最优。考虑到目前加氢一段加氢反应器与二段加氢反应器中催化剂的活性随时间衰减特性明显,过程变量约束条件也随时变化,需要动态调整相应控制变量来寻求满足产品质量指标下的最优运行工况。处理复杂的工业问题不仅需要考虑内部复杂的内部关系,还需要考虑到运行的极端情况。而有效的优化方法在满足工业条件的同时,能够使产品的质量 and 产量都得以提升。

2.5 可控变量影响分析

实际操作过程中,通过控制反应器入口的加氢量和进料温度对整个两段加氢反应系统进行控制。不良的控制参数会影响反应器的安全以及产品质量。本文中,一段加氢反应器反应过程中可以控制的操作条件有:入口氢炔比,固定入口乙炔含量为 $40 \text{ kmol} \cdot \text{h}^{-1}$,通过控制入口加氢量改变入口物料的氢炔比。当加入氢气量过大时,造成乙烯的损失的同时引发反应器内温度增幅增大,易发生高温连锁现象。当加入过低的加氢量,会导致出口气体中的乙炔含量超标,影响乙烯产品的质量。当反应器入口温度过低,催化剂的活性和选择性低,催化剂的使用周期延长;当反应器入口温度越高,催化剂活性越高,但加氢反应是放热反应,过高的入口温度会造成“飞温”现象。必须合理控制反应器入口温度,保证加氢反应的正常进行的条件下,尽量较低的温度。综上分析需要对入口加氢量和入口温度进行合理的控制能够对增大乙烯产品的产量。利用实际的现场数据和建立的动态优化模型,对加氢反应的进口温度和加氢量进行影响分析,观察加氢反应器出口物料和热力学温度的变化情况。

2.5.1 加氢流量分析

氢气是乙炔加氢反应的主要原料,氢气的流量大小直接影响到乙炔加氢的选择性和转化率。本节以一段加氢反应器入口氢气流速为变量,变化范围为 $40\text{--}90 \text{ kmol} \cdot \text{h}^{-1}$,设定一段加氢反应器的入口原料:乙炔流速为 $40 \text{ kmol} \cdot \text{h}^{-1}$,入口乙炔含量为 $2600 \text{ kmol} \cdot \text{h}^{-1}$,入口乙烷含量为 $400 \text{ kmol} \cdot \text{h}^{-1}$,入口热力学温度为 303.15 K 。其中一段加氢反应器中的氢炔比控制范围为:1-2.25 之间变化,才能保证串联乙炔加氢反应器出口乙炔气体满足系统要求,故入口加氢量的控制范围为 $40\text{--}90 \text{ kmol} \cdot \text{h}^{-1}$ 。观察一段加氢反应器出口乙烷、乙烯、乙炔、氢气和出口温度的变化情况如图 2.10~2.14 所示。

图 2.10 分析可知, 加氢量过量时, 出口乙烷增量明显。加入过量的氢气易促进副反应的加剧, 系统中的乙烯容易发生加氢反应生成乙烷。如图 2.11 所示, 加氢量增高, 出口乙烯增量却发生了严重的减少, 过量的加氢气加入会消耗大量的乙烯气体, 降低乙烯产量。如图 2.12 所示, 在加氢量低的情况下出口乙炔含量较多, 氢气量不足以消耗多余的乙炔气体。随着加氢量的增多, 出口乙炔含量降低, 说明加入比较多的氢气也能消耗更多的乙炔气体。随着反应的进行, 催化剂的活性和选择性降低, 在相同的输入条件下, 出口乙炔气体会越来越高, 直到出口乙炔高于生产标准。图 2.13 表示加氢反应器出口氢气的含量随着加氢量的增多反而减少, 说明内部发生了过量加氢反应, 即可能发生了副反应过程。由图 2.14 分析可知, 反应器出口温度的变化随着加氢量的增多逐渐升高, 且出口温度与加氢量的关系是正比递增关系。而从图 2.10-2.14 综合分析可知, 随着一段加氢反应器中加氢量的增加, 反应加剧使出口温度上升。当加氢量过量时, 会促进反应器的副反应发生, 从而降低乙烯产量。而加氢量不足时, 反应器出口乙炔质量不能满足系统要求, 使催化剂寿命缩短。

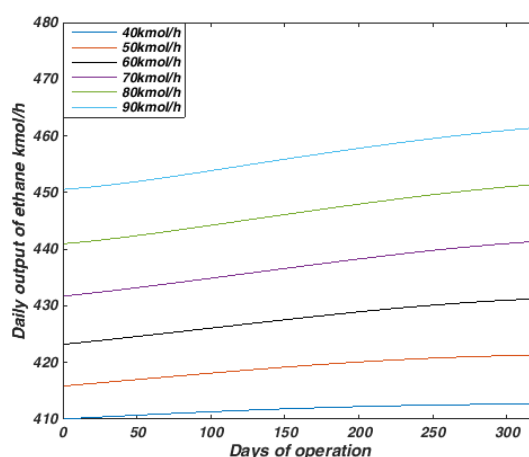


图 2.10 不同加氢量下反应器出口乙烷变化

Fig. 2.10 Changes of ethane flow of reactor outlet with different hydrogenation

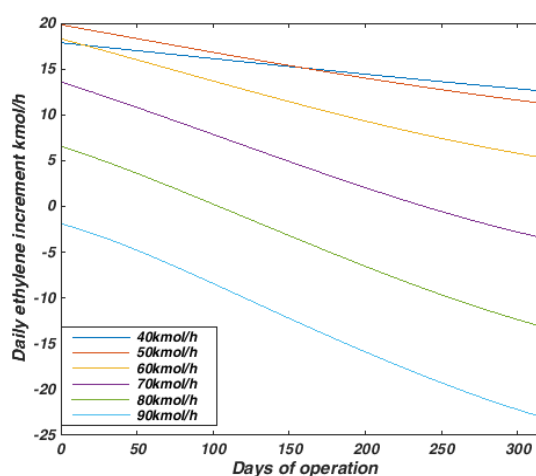


图 2.11 不同加氢量下反应器出口乙烯增量

Fig. 2.11 Changes of ethylene flow of reactor outlet with different hydrogenation

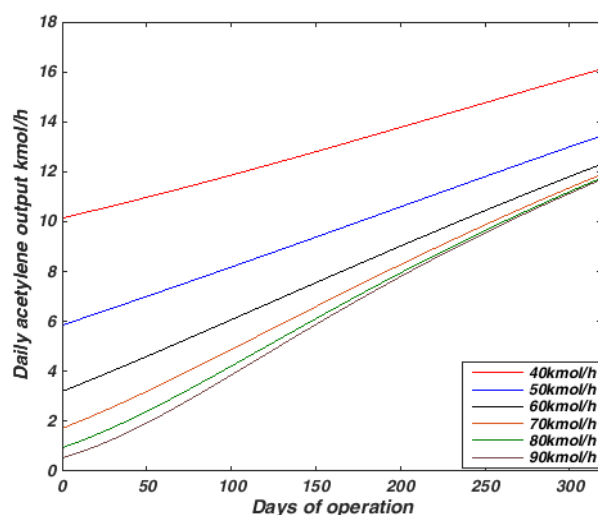


图 2.12 不同加氢量下反应器出口乙炔变化

Fig. 2.12 Changes of acetylene flow of reactor outlet with different hydrogenation

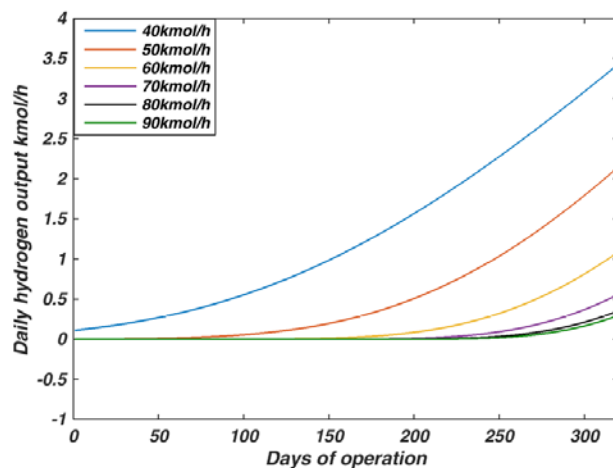


图 2.13 不同加氢量下反应器出口氢气变化

Fig. 2.13 Changes of hydrogen flow of reactor outlet with different hydrogenation

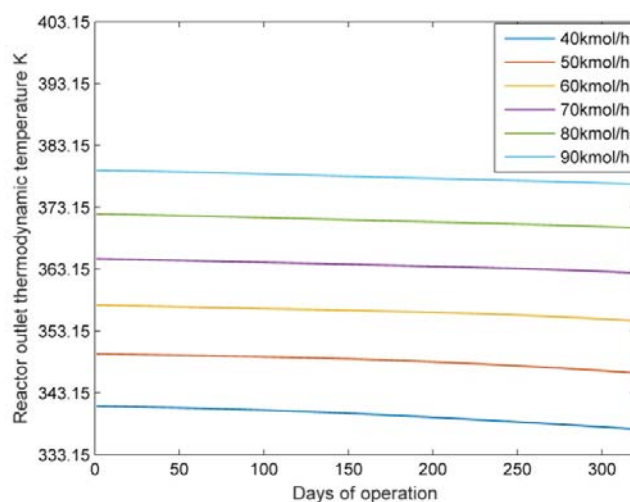


图 2.14 不同加氢量下反应器出口温度变化

Fig. 2.14 Changes of temperature of reactor outlet with different hydrogenation

2.5.2 进口温度分析

在较低温状态下，催化剂的选择性最高，但活性差；相反，在高温状态下，催化剂的活性增强，乙炔转化率上升，但是催化剂的选择性会降低和使用周期会降低。为了满足使目标函数值最优的工况，使加氢反应器性能得到提高。通过控制合理的反应器入口温度，提升整体的经济效益以及保证乙烯产品质量的合格。为了观察其变化过程，热力学温度的变化范围设定在：288.15~318.15 K 变化，一段加氢反应器入口乙炔流速为 $40 \text{ kmol} \cdot \text{h}^{-1}$ ，入口乙烯含量为 $2600 \text{ kmol} \cdot \text{h}^{-1}$ ，入口乙烷含量为 $400 \text{ kmol} \cdot \text{h}^{-1}$ ，反应器入口加氢量为 $40 \text{ kmol} \cdot \text{h}^{-1}$ ，观察一段乙炔加氢反应器出口乙烷、乙烯、乙炔、氢气流速和出口温度的变化情况如图 2.15-2.19 所示。

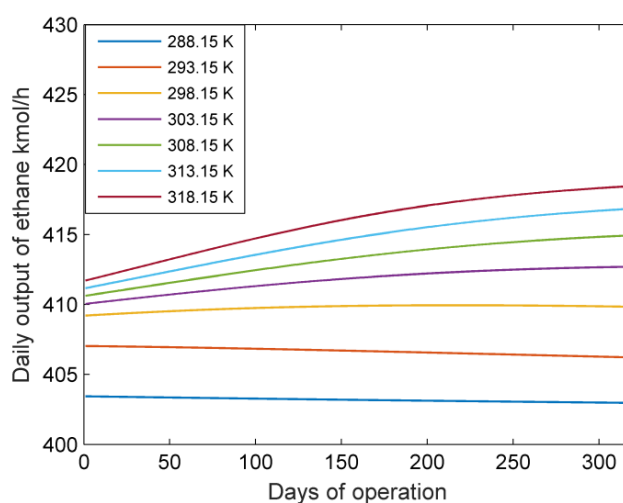


图 2.15 不同入口温度下反应器出口乙烷变化

Fig. 2.15 Changes of ethane flow of reactor outlet with different temperature

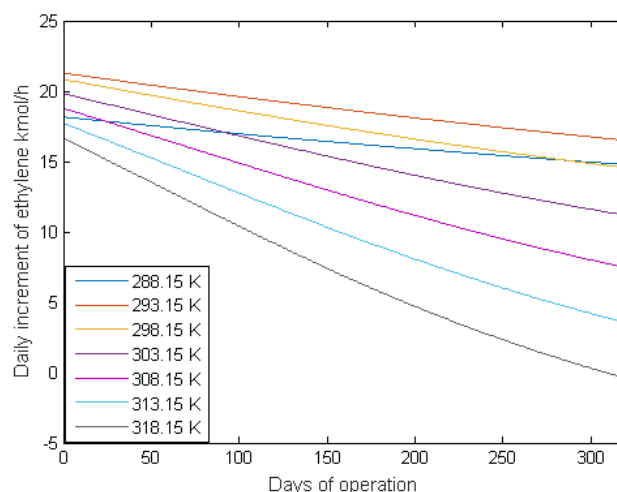


图 2.16 不同入口温度下反应器出口乙烯增量

Fig. 2.16 Changes of ethylene flow of reactor outlet with different temperature

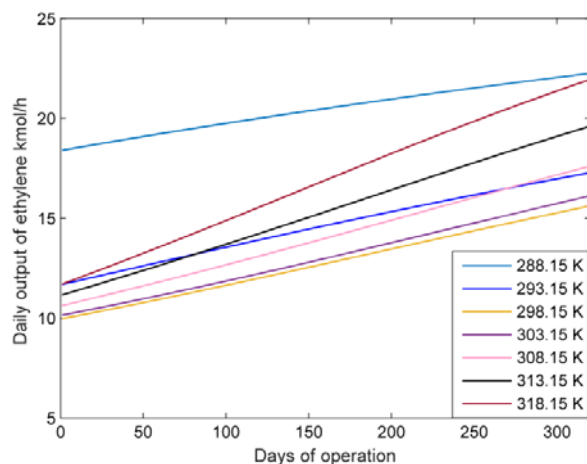


图 2.17 不同入口温度下反应器出口乙炔变化

Fig. 2.17 Changes of acetylene flow of reactor outlet with different temperature

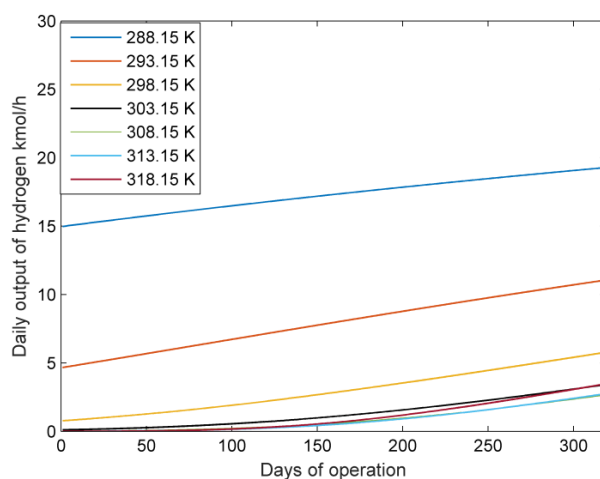


图 2.18 不同入口温度下反应器出口氢气变化

Fig. 2.18 Changes of hydrogen flow of reactor outlet with different temperature

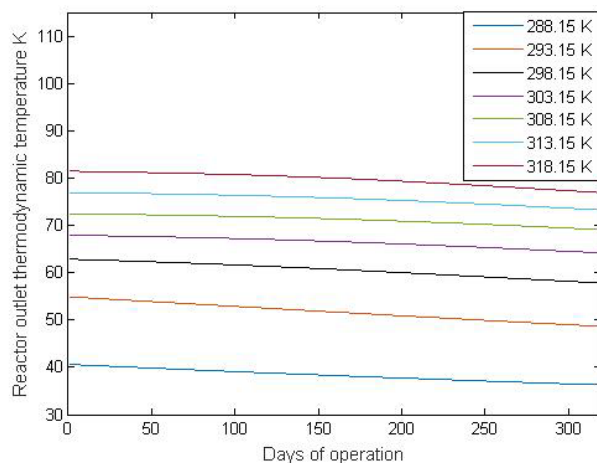


图 2.19 不同入口温度下反应器出口热力学温度变化

Fig. 2.19 Changes of thermodynamic temperature flow of reactor outlet

图 2.15 显示了出口乙烷气体的流速变化过程, 随着温度的上升, 出口处的乙烷含量越来越大。温度的升高会影响催化剂的选择性造成副反应增多。图 2.16 显示了过高

或者过低的温度，乙烯增量递减趋势都比较大，且出口乙烯增量所表现的都是递减的一个趋势，说明在反应后期，催化剂的选择性明显下降，副反应增多。而温度的上升，出口乙烯含量越少。图 2.17 显示了出口乙炔含量，明显发现不同温度条件下，出口乙炔含量变化曲线的不同。而过高或者过低的温度，出口的乙炔含量都较高。说明温度对系统出口乙炔影响较大。图 2.18 在相同的加氢量的情况下，入口温度越高，氢气的消耗量越多。在温度较低的情况下，氢气的消耗变化不明显，低温情况下，催化剂的活性收到影响。图 2.19 显示了不同的入口温度，反应器出口温度的变化情况。入口温度高，出口温度也相对较高，而随着温度的上升，出口温度反而上升的不明显。而温度过低，催化剂的活性过低。图 2.15-2.19 综合分析可知，在入口物料进口相同，而入口温度不同的条件下，出口气体含量以及对应的出口温度变化变化过程。随着反应器进口温度的提高，反应器内部的反应也变得非常剧烈。乙炔加氢反应速率加快，乙烯损失增加。处于低温状态时，乙炔加氢反应速率减慢，乙烯增加量降低。入口温度对乙炔加氢反应的也有着重要的影响。大量的乙炔加氢反应研究中，将温度变量作为静态温度，也就是在整个反应过程中，温度都是定值的。采用动态优化方法能够根据系统当时的运行环境对温度进行适量的调整，使催化剂的活性和选择性达到系统最优，且使催化剂使用寿命延长同时不会使系统造成飞温等不安全事件的影响。

综上所述，乙炔加氢反应器进口温度和加氢量是影响乙炔加氢反应器的较大的两个因素，通过建立与实际工况相符合的模型来优化操作，从而使系统在动态优化环境下使整个反应达到最优。

2.6 本章小结

本章介绍了加氢反应的反应原理、反应动力学模型、反应器模型以及催化剂的失活模型等建立乙炔加氢反应系统的一段加氢反应器的动态模型，并将建立的动态模型与实际工业数据进行对比。二段加氢反应器由其特殊性，无法建立其机理模型。故使用二段加氢反应器的实际生产数据进行拟合，考虑了催化剂性能的变化过程。根据建立的串联型两段加氢反应器模型，以及结合实际生产中的生产工艺条件，建立串联型乙炔加氢反应系统的动态模型。其中，根据建立的一段加氢反应器模型，针对乙炔加氢反应器的进料温度的变化和加氢量变化过程，对加氢反应器的可控变量进行动态影响因素分析，讨论了在相同的进料工况下，可控变量变化对反应过程的影响。结果表明，进料温度和加氢量都会影响乙炔加氢反应器出口物料。

第 3 章 基于增量式编码差分进化算法的动态优化

3.1 引言

串联型乙炔加氢反应系统是工业乙烯生产装置的重要设备之一。系统的两段加氢反应器催化剂的切换周期、入口温度、入口加氢量等对乙烯产品的质量和产量都有着重要的影响。本章主要研究的是串联型乙炔加氢反应系统在确定的催化剂切换周期条件下, 利用基于增量式编码差分进化算法(Incremental-Encoding Differential Evolution, IEDE)实现对串联型乙炔加氢动态模型的动态优化方法, 使之在满足系统生产要求的前提下, 使整个串联型乙炔加氢反应器的经济效益达到最优。

本章提出了增量式编码差分进化算法。首先介绍了差分进化算法及其变异、修复、交叉和选择操作的执行流程。接下来简单介绍了控制向量参数法的离散过程, 通过该方法实现将无限维的动态优化问题转化成为有限维非线性规划问题。然后, 引入增量式编码法, 该方法对于系统入口温度和加氢量的时间节点约束问题进行处理, 使控制参数在优化之前就已经满足系统控制变量要求。接下来, 介绍了动态优化问题中对于状态约束问题的处理方法。由第二章介绍可知, 乙烯装置中的串联乙炔加氢动态模型是含有约束的动态优化问题, 即根据能够描述催化剂失活特性的乙炔加氢反应过程模型, 采用基于控制向量参数化方法的增量式编码差分进化算法(CVP-based IEDE), 通过控制反应器的加氢流量和入口温度, 在保证乙烯产品质量、满足系统生产工艺和能源消耗最小的条件下, 使串联型乙炔加氢系统的整体经济效益达到最优。

3.2 差分进化算法

差分进化(Differential Evolution, DE)算法是由 Price 与 Storn^[72]提出的新颖的进化算法。在 IEEE 的国际进化计算大赛中多次取得优秀的成绩, 特别是处理带有各类约束的动态优化问题。DE 采用是基于种群的全局搜索策略, 能够不依赖初值条件实现全局收敛能力最强。DE 算法通过编码机制, 实现变异、修补、交叉和选择等一系列操作。其产生子代的方法是根据父代个体间存在的差向量来产生新的变异个体, 变异后的个体可能并不满足变量的使用范围, 通过修补操作, 使变异后的每个个体可行范围内。然后, 将父代个体和新的变异个体进行交叉的操作。最后采用贪婪选择策略选出当前种群的最优的子代个体。差分进化算法结构简单、搜索能力和收敛性能强等优点, 在解决复杂的带有约束的动态优化问题方面具有较大的优越性^[50]。其中最重要的是试验向量的产生, 而变异和交叉用于生产试验向量, 然后选择决定下一代最优个体。DE 算法执行步骤如下:

步骤 1. 种群初始化, DE 算法在可行域内随机初始化 NP 个个体, 第 i 个体表示为

$X_i^g = [x_{i,1}^g, x_{i,2}^g, \dots, x_{i,D}^g], i=1,2,\dots, NP$ 。当前代数表示为 $g=0,1,2,\dots, MaxGen$ ， D 为待优化变量的个数。随机初始化公式 $x_{i,j}^0 = x_{j,\min} + rand[0,1] \cdot (x_{j,\max} - x_{j,\min})$ ，其中 $j=1,2,\dots,D$ 表示个体优化维数， $x_{j,\max}$ 和 $x_{j,\min}$ 表示的是待优化个体变量中的第 j 维的上界和下界， $rand[0,1]$ 表示的是 $[0,1]$ 内的均匀分布随机数， $x_{i,j}^0$ 始终是在可行域中取值的。

步骤 2. 评价操作，对每个个体进行评价，找出初始化种群中的最优个体。

步骤 3. 变异操作，对于每个个体 $X_{r_1}^g$ ，使用变异算子生成变异向量记为 V_i^g ，变异表达式(3-1)为：

$$V_i^g = X_{r_1}^g + F(X_{r_2}^g - X_{r_3}^g) \quad (3-1)$$

上式中， r_1, r_2 和 r_3 为区间 $[1, NP]$ 上互不相同且不等于 i 的随机整数；参数 F 被称为缩放因子，控制搜索步长，一般在 $[0,1]$ 内取值。

DE 算法的变异操作使其主要特色，且变异操作产生后代个体的主要方式。式(3-1)为 DE/rand/1 策略，其他五种常用变异搜索策略介绍如下^[73]：

DE/rand/2 策略：

$$V_i^g = X_{r_1}^g + F(X_{r_2}^g - X_{r_3}^g) + F(X_{r_4}^g - X_{r_5}^g) \quad (3-2)$$

DE/current-to-rand /1 策略：

$$V_i^g = X_{r_1}^g + F(X_{r_1}^g - X_i^g) + F(X_{r_2}^g - X_{r_3}^g) \quad (3-3)$$

DE/best/1 策略

$$V_i^g = X_{best}^g + F(X_{r_1}^g - X_{r_2}^g) \quad (3-4)$$

DE/best/2 策略

$$V_i^g = X_{best}^g + F(X_{r_1}^g - X_{r_2}^g) + F(X_{r_3}^g - X_{r_4}^g) \quad (3-5)$$

DE/current-to-best/1

$$V_i^g = X_{r_1}^g + F(X_{best}^g - X_i^g) + F(X_{r_1}^g - X_{r_2}^g) \quad (3-6)$$

其中， $X_{r_1}^g, X_{r_2}^g, \dots, X_{r_5}^g$ 表示为随机在种群中选择的不同于 X_i^g 的个体， X_{best}^g 表示的是当前种群中的最优个体。

步骤 4. 修补操作，如果变异向量 $V_i^g = [v_{i,1}^g, v_{i,2}^g, \dots, v_{i,D}^g]$ 的第 j 个元素 $v_{i,j}^g$ 超出参数搜索范围，采用修补算子对变异向量进行修补，使其成为可行解。

$$v_{i,j}^g = \begin{cases} \min\{u_{j,\max}, 2 * u_{j,\min} - v_{i,j}^g\} & \text{if } v_{i,j}^g < u_{j,\min} \\ \min\{u_{j,\min}, 2 * u_{j,\max} - v_{i,j}^g\} & \text{if } v_{i,j}^g > u_{j,\max} \end{cases} \quad (3-7)$$

步骤 5. 交叉操作，采用离散交叉算子来增加 DE 种群的多样性。在通过二项式交叉的方式产生一个实验向量(Trial Vector)，记为 $U_i^g = [u_{i,1}^g, u_{i,2}^g, \dots, u_{i,D}^g]$ ：

$$u_{ij}^g = \begin{cases} v_{ij}^g, & \text{if } rand \leq CR \text{ or } j=j_{rand} \\ x_{ij}^g, & \text{otherwise} \end{cases}, j=1,2,\dots,D \quad (3-8)$$

上式中, $u_{ij}^s, v_{ij}^s, x_{ij}^s$ 分别为 U_i^s, V_i^s, X_i^s 的第 j 个元素; CR 为交叉概率, 一般在 $[0,1]$ 内取值, 其值越大则选择交叉的元素越多, 故 U_i^s 更倾向于 V_i^s ; $rand$ 为 $[0,1]$ 内均匀分布的随机数, j_{rand} 为 $[1, NP]$ 上的均匀随机整数。

步骤 6. 选择操作, 经过交叉、修补和变异操作生成新一代种群后, 使用贪婪选择算子选择目标向量 X_i^s 和试验向量 U_i^s 中优胜者进入下一代种群中。选择操作如式(3-9)所示:

$$X_i^{g+1} = \begin{cases} U_i^s, & \text{if } U_i^s \text{ is better than } X_i^s \\ X_i^s, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (3-9)$$

步骤 7. 终止准则, 若满足预先定义的终止准则, 输出群体中的最优解; 否则当前代数 $g = g + 1$, 重复执行变异、修复、交叉和选择操作。

差分进化算法已在动态优化问题中得到了很好应用^[76], 影响其优化效率的主要在于变量离散化方法、变量的约束表达以及最优解的选取准则等, 本文即在 DE 算法的框架下, 提出了这一问题的求解方法。

3.3 控制向量参数法

控制向量参数化法(Control Vector Parameterization, CVP)^[7]是求解动态优化问题的常用的数值计算方法。将控制时域进行离散化, 将随时间变化的控制变量在时域上离散为有限个控制参数, 对每个控制参数使用基函数去逼近最优解。动态优化问题中的待优化变量是时间区间上的无限维变量, 通过 CVP 将无限维动态优化问题转化为有限维非线性规划问题。CVP 方法的执行步骤如下:

步骤1: 将原来需要求解的动态优化问题, 在时间区间 $[t_0, t_f]$ 上平均分成 N 段, 将时间分割为 $t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_N = t_f$, 其中时间节点 t_i 表示如下:

$$t_i = t_0 + \frac{i * (t_f - t_0)}{N}, i = 0, 1, 2, \dots, N \quad (3-10)$$

步骤2: 将时间区间 $[t_{i-1}, t_i]$, $i = 1, 2, \dots, N$ 上的控制变量 $u(t)$ 用基函数进行近似, 常用的基函数有二次函数、线性函数、常函数等。

常函数法是最常用到的方法, 该方法是将控制变量 $u(t)$ 用常函数 u_i 分段表示^[77], 具体描述等式如下:

$$u(t) = \begin{cases} u_i, & t \in [t_{i-1}, t_i] \\ 0, & \text{else} \end{cases}, i = 1, 2, \dots, N \quad (3-11)$$

步骤3: 使用优化算法将基函数去逼近最优值, 使在满足系统要求的前提下, 目标函数值达到最优。

将原无限维动态优化问题转变成为对 (u_1, u_2, \dots, u_N) 有限维数值控制轨线的优化求解问题, 图 3.1 给出了控制向量的离散示意图。

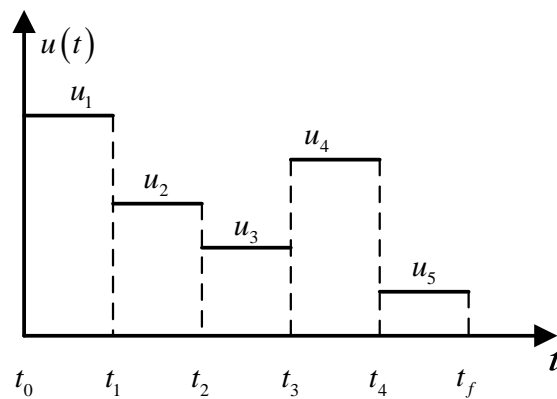


图 3.1 控制向量参数离散化示意图

Fig. 3.1 Discretization of control trajectory

3.4 增量式编码

由第二章介绍可知，随着加氢反应的不断进行，催化剂的活性不可逆转的逐渐降低，而系统的生产要求以及工艺条件不变。为了满足系统生产要求以及节约生产成本，需要减缓催化剂的活性和选择性下降来延长催化剂的使用周期，再通过控制合理的加氢量和入口物料温度使加氢反应过程中除去乙炔气体，来保证整个生产过程满足系统生产条件下，实现获取最大经济效益的目标。在实际应用中，入口温度在一段加氢反应器内根据催化剂活性和选择性递减的条件以及对于温度的调控需满足周期性递增的条件；而加氢量在两个加氢反应器的共同协调除快的生产过程中，满足两段加氢反应器催化剂切换周期内递增的要求。故控制变量都需要在稳定生产条件下，逐渐增大控制变量来使串联型乙炔加氢反应系统满足生产要求。

为满足控制变量的时间节点约束问题，提出增量式编码法(Incremental Encoding, IE)来有效处理带有时间节点的控制约束问题。不同于传统的动态优化问题中状态变量约束的处理方法，而是通过提前处理控制变量，使进入优化的控制变量都是满足系统要求的前提下进入算法中进行优化。增量式编码法是一种简单而且易于实现的方法，该方法通过增量编码参数 $r_i \in [r_{i\min}, r_{i\max}]$, $i=1, \dots, N+1$ ，将其编码到待优化参数向量 $U = [u_1, u_2, \dots, u_N]$ ，使控制参数与增量编码参数之前存在一种映射关系。其中增量式编码需要满足以下条件： $r_i \in [0, 1]$ ，且 $r_1 / \sum_{i=1}^{N+1} r_i$ 等于第 i 个优化区间 $[u_{i-1}, u_i]$ 差值与控制变量的取整范围 $[u_{\min}, u_{\max}]$ 的比值：

$$\frac{r_i}{\sum_{i=1}^{N+1} r_i} = \frac{(u_i - u_{i-1})}{(u_{\max} - u_{\min})}, i = 1, 2, \dots, N \quad (3-12)$$

待优化参数 $U = [u_1, u_2, \dots, u_N]$ 转变为对分数参数 $R = [r_1, r_2, \dots, r_{N+1}]$ 的优化，其映射关系如式(3-13)所示：

$$\begin{cases} u_1 = u_{\min} + (u_{\max} - u_{\min}) \cdot r_1 / \sum_{i=1}^{N+1} r_i \\ \dots \\ u_k = u_{\min} + (u_{\max} - u_{\min}) \cdot \sum_{i=1}^k r_i / \sum_{i=1}^{N+1} r_i \\ \dots \\ u_N = u_{\min} + (u_{\max} - u_{\min}) \cdot \sum_{i=1}^N r_i / \sum_{i=1}^{N+1} r_i \end{cases} \quad (3-13)$$

综上，通过增量式编码方式能够满足串联型乙炔加氢反应系统对控制参数周期性递增的要求。

3.5 状态约束处理方法

上一节介绍了控制变量约束的处理方法，本节将主要介绍动态优化问题中的状态变量约束如式(1-4)~(1-7)问题的处理。常见的动态优化问题的约束有：过程不等式约束、过程等式约束、终端不等式约束、终端等式约束，分别用(3-14)~(3-17)表示。具体数学表达式如下：

$$g_i^{path}(x(t), u(t), p, t) \leq 0, i = 1, \dots, m_1 \quad (3-14)$$

$$h_i^{path}(x(t), u(t), p, t) = 0, i = 1, \dots, m_2 \quad (3-15)$$

$$g_i^{end}(x(t_f), u(t_f), p, t_f) \leq 0, i = 1, \dots, m_3 \quad (3-16)$$

$$h_i^{end}(x(t_f), u(t_f), p, t_f) = 0, i = 1, \dots, m_4 \quad (3-17)$$

过程约束(3-14)和(3-15)在整个时间区间内必须满足系统要求，而终端约束(3-16)和(3-17)只需要在终端时刻 t_f 得到满足。那么，过程约束和终端约束的处理方式各不相同。过程变量约束用 y_i 表示，需满足条件如下：

不等式过程约束：

$$\frac{dy_i(t)}{dt} = \max \{ g_i^{path}(x(t), u(t), p, t), 0 \}, i = 1, \dots, m_1 \quad (3-18)$$

等式过程约束：

$$\frac{dy_i(t)}{dt} = |h_i^{path}(x(t), u(t), p, t)|, i = m_1 + 1, \dots, m_1 + m_2 \quad (3-19)$$

根据(3-18)、(3-19)用 $\frac{dy_i(t)}{dt}$ 表示过程约束在 t 时刻的约束违反度，将其在时间区间 $[t_0, t_f]$ 进行积分，可以得到第 i 个约束违反度 $y_i(t_f) = 0$ 。其中，初始时间的状态变量为： $y_i(t_0) = 0, i = 1, 2, \dots, m_1 + m_2$ 。对于不等式约束，在违反度值与 0 中选择最大值，保证了符合要求情况下的都不计入违反度中。

如式(3-16)和(3-17)表示的终端约束，只需要考虑在时间 t_f 时刻是否满足系统的要求，其约束处理机制如下：

不等式终端约束：

$$\max \left\{ g_i^{end} \left(x(t_f), u(t_f), p, t_f \right), 0 \right\}, i=1, 2, \dots, m_3 \quad (3-20)$$

等式终端约束：

$$h_i^{end} \left(x(t_f), u(t_f), p, t_f \right), i=1, 2, \dots, m_4 \quad (3-21)$$

由以上分析可知，总的约束违反度 vio 综合考虑式(3-18)~(3-21)可表示如下：

$$vio = \sum_{i=1}^{m_1+m_2} y_i(t_f) + \sum_{i=1}^{m_3} \max \left\{ g_i^{end}, 0 \right\} + \sum_{i=1}^{m_4} |h_i^{end}| \quad (3-22)$$

含有状态约束的动态优化问题中，种群中的每个个体 x_i 可以计算获得其目标函数值 obj_i 和约束违反度 vio_i 。一般约束的处理机制有惩罚函数法和多目标法等。其中惩罚函数法将约束违反度与目标函数相结合，但是该方法无法应用于对约束条件必须满足的系统之中，因为求解出的最优解可能是带有约束的最优值，且需要对目标函数值和约束违反度的影响分子进行相应分析，增大原问题的复杂性。多目标法是将目标函数值与约束违反度值进行区分形成的多目标优化问题，根据约束违反度和目标值来对个体进行评价。本文采用 Deb's^[79]提出的多目标法来处理约束，按照可行解优先准则对优化出的个体进行评价。

比较两个个体 x_i 和 x_j ，其中 $i \neq j$ ，对应的目标函数值和约束违反度分别为 (obj_i, vio_i) 和 (obj_j, vio_j) ，若个体 x_i 优于 x_j ，则满足下面三条准则。

准则 1 $vio_i > 0 \ \&\& \ vio_j > 0$ 且 $vio_i < vio_j$ ；

准则 2 $vio_i = 0 \ \&\& \ vio_j = 0$ 且 $obj_i > obj_j$ ；

准则 3 $vio_i = 0 \ \&\& \ vio_j > 0$ 。

与惩罚函数相比，可行解优先准则的优点在于不需要引入任何参数，而且 Deb's 准则是一种简单有效的约束处理方法。

3.6 加氢反应过程优化实现步骤

3.6.1 串联型乙炔加氢系统处理

第二章建立了串联型乙炔加氢反应系统动态模型，如式(2-26)、(2-27)。串联型乙炔加氢反应过程的有效控制控制主要包括反应器进料温度和加氢流量，在满足约束违反度的条件下，使式(2-26)的值最优。本章固定两段加氢反应器的切换周期分别为 $D_{R1}=320$ ， $D_{R2}=120$ ，离散阶段天数分别为 $k=20$ 天，细化离散天数 k 可以提高预测精度，同时相应的计算时间增多，在具体问题中可以根据实际问题需求去设定。其中加氢量 H 需要满足阶段性递增的条件，而入口温度 T 在反应过程中是满足周期性递增的条件的，那么在使用增量式编码方法之前需要针对这个问题进行对应处理。加氢量 H

的增量式编码参数用 R_H 表示，如式(3-24)。其中：

$$\begin{aligned} m1 &= \lfloor D_{i,R1} / D_{i,R2} \rfloor \\ m2 &= D_{i,R2} / k \end{aligned} \quad (3-23)$$

$$\begin{aligned} m3 &= (D_{i,R1} - m1 * D_{i,R2}) / k \\ R_H &= (r_{H1,1}, r_{H1,2}, \dots, r_{H1,(m2+1)}, \dots, r_{Hm1+1,1}, \dots, r_{H(m1+1),(m3+1)}) \\ &= (r_{H1}, r_{H2}, \dots, r_{H(N+m1+1)}) \end{aligned} \quad (3-24)$$

加氢量 H 根据二段切换周期分成 $(m1+1)$ 次增量式编码，可以根据二段切换后催化剂活性的改变对二段加氢量的影响。

热力学温度 T 对应的增量式编码参数用 R_T 表示，其中：

$$R_T = (r_{T1}, r_{T2}, \dots, r_{T(N+1)}) \quad (3-25)$$

3.6.2 IEDE 算法实现步骤

根据所建立的串联型乙炔加氢反应系统动态模型。采用基于控制向量参数法的增量式编码差分进化算法寻求系统正常运行以及保证乙烯产品质量的前提下，减少能源消耗，使目标函数值 obj 达到最优。图 2.2 显示了基于 CVP 离散方法的 IEDE 算法执行流程图。

确定串联型乙炔加氢反应器的一段、二段加氢反应器的催化剂切换周期分别为 320 天、120 天以及每个阶段的天数 $k=20$ 。利用 CVP 法将两段串联组合的乙炔加氢系统动态模型进行离散，确定离散维度 N ，分别对两段加氢反应器进行离散。其中控制变量包括加氢量和入口温度 $U = [H \ T]$ 。DE 算法的 NP 表示种群大小，对增量式编码参数可以表示为 $R = [R_H, R_T] = (r_1, r_2, \dots, r_{2*N+m1+2}) = (r_1, r_2, \dots, r_D)$ 。基于 CVP 方法的 IEDE 算法具体实施步骤如下：

Step1: 初始化增量编码种群 $R^0 = [R_1^0, R_2^0, \dots, R_{NP}^0]$ 。其中，种群个体用表示增量编码表示为 $R_i^0 = [r_{i,1}^0, r_{i,2}^0, \dots, r_{i,D}^0]$ ， D 为优化问题的维度；通过增量式编码方式求解出相应的 $U_i^0 = [u_{i,1}^0, u_{i,2}^0, \dots, u_{i,N}^0]$ ，从而求解出所有种群的目标值 $obj(U_i^0)$ 和约束违反度 $vio(U_i^0)$ ，利用 Deb's 准则找到最优解。

Step2: IEDE 算法实现.其中 $F=0.5$ ， $CR=0.9$ ， $MaxGen=2000$ 和 $NP=3*D^{[80,81]}$ 。

Step2.1: 变异操作，生成变异向量 $V^g = [V_1^g, V_2^g, \dots, V_{NP}^g]$ ；

Step2.1: 修复操作，若变异向量超出控制变量的使用范围 $v_{i,j}^g \notin [u_{j,\min}, u_{j,\max}]$ ，使用修复操作使 $v_{i,j}^g \in [u_{j,\min}, u_{j,\max}]$ ；

Step2.3: 交叉操作，根据种群所得参数进行交叉操作，丰富种群的多样性；

Step2.4: 评价操作，根据求解出来的 $R^g = [R_1^g, R_2^g, \dots, R_{NP}^g]$ ，依据增量式编码法求解出对应的 $U^g = [U_1^g, U_2^g, \dots, U_{NP}^g]$ ，然后求解出种群的目标值和约束违反度，最后利用

Deb's 准则找到最优解;

Step2.5: 选择操作: 进行 DE 算法的选择操作。

Step3: 终止准则。如果种群个体满足终止条件或达到最大迭代次数 $MaxGen$, 则输出最优解。否则回到 step2, 且 $g=g+1$ 。

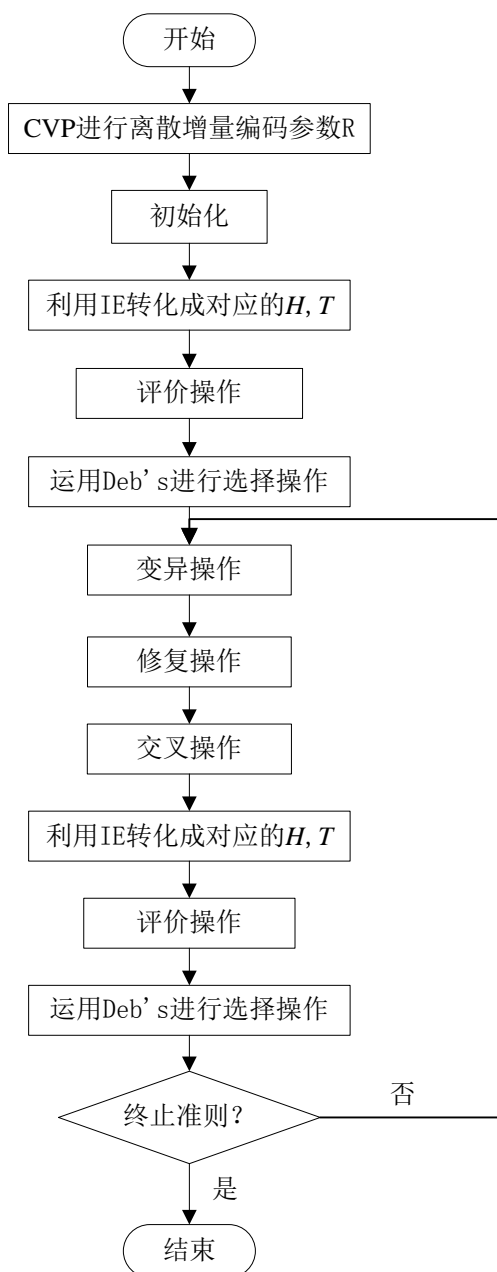


图 3.2 基于 CVP 的 IEDE 算法的流程图

Fig. 3.2 Flow diagram of the CVP-based IEDE algorithm

3.7 串联型乙炔加氢动态优化仿真与分析

为了避免下游反应中的催化剂中毒以及减少乙烯不必要的损失, 使用最少的氢气使一段加氢反应器去除大部分乙炔气体, 尽量避免副反应的反生。二段加氢反应器作为保护段, 去除剩下的乙炔, 以及避免多量的乙烯与氢气发生副反应, 造成乙烯的损

失。经过二段加氢反应器后,使出口乙炔含量低于 1ppm。根据实际的工业装置生产情况,使串联乙炔加氢动态模型中的优化变量求解出的 $vio=0$ 且 obj 最优。在实验中一段加氢反应器采用工业数据拟合出一段反应器模型参数^[29]。二段加氢反应器模型是采用工业数据拟合加氢选择性,其中式(2-23)中拟合出来的参数值分别为: $s=-6\times 10^{-6}$, $s1=6.3\times 10^{-3}$, $s2=1.3$ 。根据上章介绍可知,当加入过量的氢气时,使量大的乙烯和过多的氢气发生副反应,降低乙烯收率。当加入氢气量不足时,没有充足的氢气与乙炔发生反应,将无法满出口乙炔要求,且容易产生绿油影响催化剂的活性。入口物料温度过低时,催化剂的选择性和活性低,加氢反应无法正常进行,易发生副反应生成绿油从而影响催化剂的活性和使用周期。温度过高,催化剂活性较大,且温度对加氢反应速率的影响,会加速乙烯加氢反应。乙烯产率下降且因反应剧烈造成飞温现象。故串联型乙炔加氢反应系统通过优化控制变量加氢量 H 和入口温度 T ,且将其控制在合理运行范围内。根据实际的工业操作情况,使操作条件满足条件 $H\in[40,80]$ 、 $T\in[25,35]$,其中一段加氢反应器出口的乙炔流量小于 $15\text{ kmol}\cdot\text{h}^{-1}$,氢气流量小于 $2\text{ kmol}\cdot\text{h}^{-1}$ 。保证两段反应器能够在理想的氢炔比环境下运行,且式(2-26)目标函数值达到最优。

在确定的切换周期下,通过控制可控变量延长催化剂的活性和选择性,满足生产稳定以及产品质量的前提下,使目标函数值 obj 最优。图 3.3 显示了在该催化剂切换周期条件下的目标函数值随着评价次数的变化过程。目标函数值在 350 代内目标函数值一直处于不断上升的过程中。优化过程后期,目标函数值已经没有明显的变化过程。说明利用基于 CVP 方法的 IEDE 算法能够求解出串联型乙炔加氢反应系统的收敛解。根据所得到的优化结果,其平均日收益为 $obj=110353.1$ 元,且满足系统约束条件 $vio=0$,说明所求的最优目标函数值是满足系统要求的。而实际生产过程平均日收益达到 $obj=88378.2$ 元,基于 CVP 方法的 IEDE 算法所得最优值比实际收益多 21974.9 元,增幅达到 24.9%。

基于 CVP 算法的 IEDE 动态优化方法对串联型乙炔加氢系统动态模型进行求解时。在找到全局最优目标函数值的过程中,会得到在该切换周期条件下,使系统目标值最优的控制轨迹。加氢量 H 和入口温度 T 的最优控制轨迹如图 3.4、3.5 所示。图 3.4 表示一段加氢反应器的入口加氢量的控制轨迹,在催化剂使用的前期,使用最少的氢气量就能够满足系统生产要求,此刻两段加氢反应器中的催化剂的活性和选择性处于活跃状态,催化剂表面的绿油含量很少。当二段加氢加氢反应器运行 120 天后进行切换,虽然一段加氢反应器入口的加氢量下降,但是切换后的二段加氢反应器中的催化剂处于最活跃的状态,可以消耗更多的乙炔气体,保证加氢反应系统满足系统出口乙炔要求。随着反应的进行,反应器中催化剂活性、选择性不可逆转的降低。250 天以后系统需要的氢气量越来越多,才能满足系统的生产要求。从整个加氢量轨迹来看,加氢量的幅度是呈现一种递增的趋势,需要的氢气量的增势非常明显。整个催化剂切换

周期来看, 加氢量满足在一段加氢反应器催化剂切换周期内根据二段加氢反应器的催化剂切换状态呈现阶段性递增的现象。图 3.5 显示了在该催化剂切换条件下, 一段加氢反应器入口温度 T 的最优控制集, 在催化剂活性较高的条件下, T 的增量具有一定的规律性, 催化剂在反应前期的活性和选择性是比较稳定变化的。从图中可以发现温度的控制轨迹整体呈现递增的趋势, 满足系统控制要求。在加氢反应的过程 T 和 H 都会影响反应器出口变化, 在催化剂活性收到时间和绿油影响的条件下, 需要不断增加氢气和温度共同控制出口气体变化。增大加氢量也会引发副反应的加剧, 造成乙烯气体的损失。随着反应温度的变化, 主副反应速率发生变化, 从而影响加氢反应的选择性和活性。当然, 在整个反应周期内, 催化剂的活性和选择性逐渐发生变化, 对应的控制变量需要进行调整来满足系统要求。

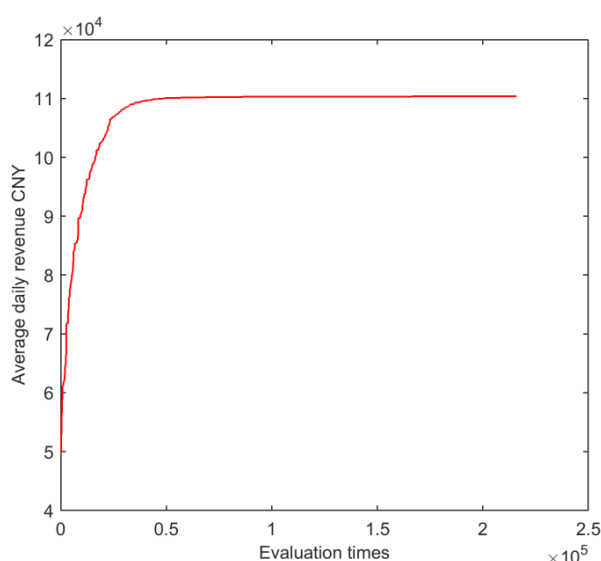


图 3.3 目标函数值变化过程

Fig. 3.3 Variation of objective function value with time

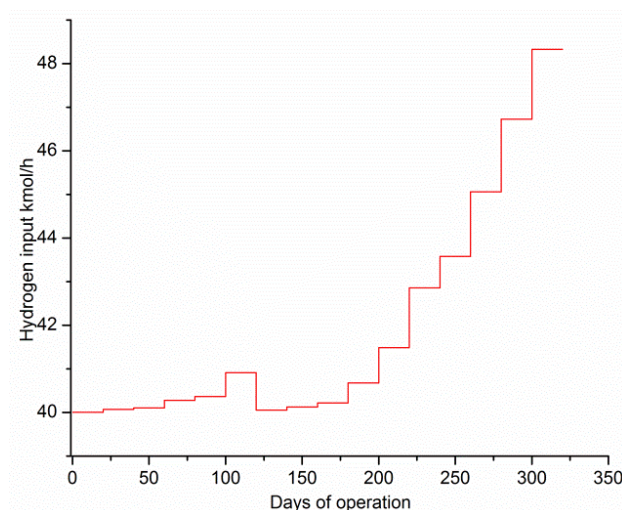


图 3.4 一段加氢反应器入口加氢量

Fig. 3.4 Hydrogen input with stage 1 reactor

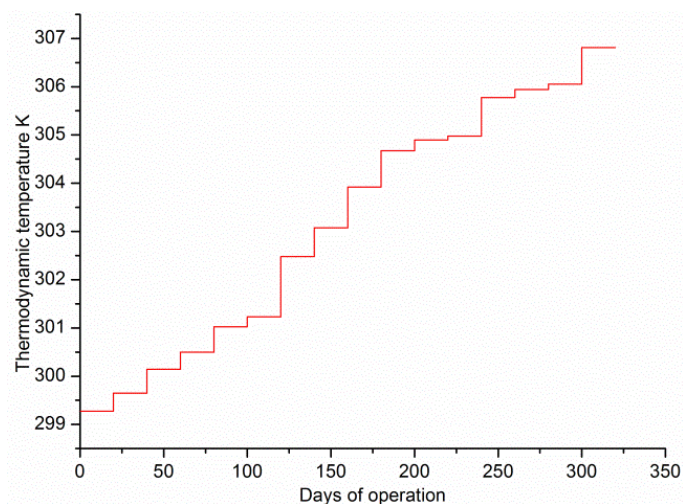


图 3.5 一段反应器入口温度

Fig 3.5 Inlet temperature with stage 1 reactor

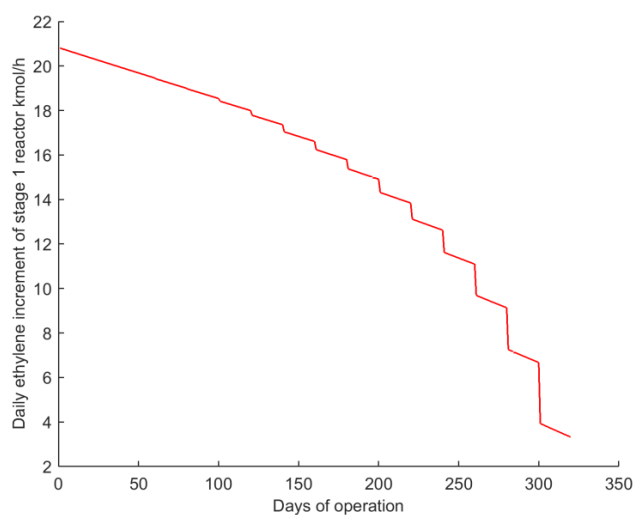


图 3.6 一段反应器乙烯每日增量

Fig. 3.6 Daily ethylene increment of stage1 reactor over time

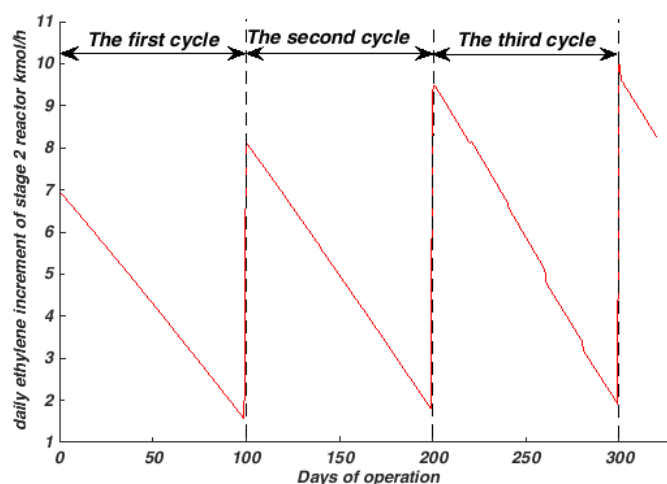


图 3.7 二段反应器乙烯每日增量

Fig. 3.7 Daily ethylene increment of stage 2 reactor over time

从式(2-26)可以看出, 目标函数值的计算需要计算每日乙烯增量生产总和, 根据乙炔加氢的动态模型分别计算两段加氢反应器的每日的乙烯增量情况。图 3.6、图 3.7 分别表示一段和二段加氢反应器中的乙烯每日增量。如图 3.6 所示, 在反应的 140 天之内, 乙烯每日增量可以近似为一条下降曲线。随着反应不断进行, 催化剂的活性下降, 乙烯增量逐渐减少。从这个趋势也可以发现, 若继续进行加氢反应, 乙烯增量为负。即生产的乙烯气体无法弥补副反应对于乙烯气体的消耗。从图 3.4、3.5 和 3.6 分析可知, 虽然提高加氢量和入口温度, 然而乙烯增量却不可遏制的越来越少。说明控制变量是无法抑制催化剂活性和选择性下降, 只能尽量减缓活性下降来延长催化剂的使用周期。加氢反应后期, 副反应增多, 对于乙烯的消耗增大; 而主反应减少, 乙烯产量减少。故整体而言, 乙烯的增量更少。考虑到反应器的切换以及催化剂的再生费用, 为满足整个系统效益仍然保持最优, 必须对催化剂的切换周期进行优化。图 3.7 中催化剂的活性和选择性都处于较优的状态, 图中每个切换周期的乙烯增量曲线都类似与图 3.6 中的 120 天之内的曲线都是处于相对平滑的阶段, 从而使串联乙炔加氢反应器在满足系统要求条件下, 寻找到使系统最优的控制变量的控制轨迹。

综上所述, 当两段加氢反应器的催化剂活性较高时, 使用最少的加氢量和入口温度便能满足系统的要求。120 天以后, 二段加氢反应器中催化剂切换再生, 使反应器中的催化剂活性和选择性足够好, 能够消除过量的乙炔气体。此时, 一段加氢反应器出口乙炔含量可以适当增大, 二段加氢反应器能够消耗更多的乙炔气体, 使该系统满足生产工艺要求。两段加氢反应器的切换周期不同表现出不同的反应状态和活性, 会造成加氢量呈现出周期性的变化过程, 这样能够有效利用系统效能。使系统的控制变量约束以及系统各类约束都得到了一定的满足, 动态优化能够结合反应器的不同运行状态, 合理的控制外界的可控条件, 使系统找到可行解中的最优解集。从优化结果来说, 基于 CVP 方法的 IEDE 算法是能够处理复杂的带有约束的串联型乙炔加氢动态优化问题, 且能够找出全局最优解。

3.8 本章小结

对于串联型乙炔加氢反应系统进行动态优化求解。首先, 需要根据建立串联型乙炔加氢反应系统的动态模型。然后, 介绍了基于 CVP 离散方法的 IEDE 算法的具体实现, 具体包括差分进化算法、控制参数向量法、增量式编码法和状态约束处理策略。接着, 根据动态优化方法固定两段加氢反应器的催化剂切换周期, 找到满足系统要求的最优控制轨迹, 使两段乙炔加氢反应系统的经济效益最大。通过对模型计算分析, 合理分配两段加氢反应器的转化乙炔任务。因一段和二段加氢反应器切换周期以及催化剂活性不同, 加氢量也随反应过程表现出周期性的变化, 而 IEDE 动态优化方法能够跟踪这种周期性的变化过程并动态调优控制变量的对应操作控制轨迹, 实时优化操作过程, 达到增强系统性能, 提升生产效益的目的。

第 4 章 基于约束排名增量编码差分算法的动态优化

4.1 引言

由上章介绍可知, 基于 CVP 离散方法的 IEDE 动态优化方法能够有效处理串联型乙炔加氢反应系统问题。但该算法的收敛性和快速性需要进一步得到提升, 减少时间消耗且能更快速的得到系统的最优值。除了考虑算法的性能之外, 需要在两段加氢反应器的可行范围内找到两段加氢反应催化剂的最优切换周期, 以及在该切换周期下的最优目标函数值。上一章介绍的是基于 CVP 方法的 IEDE 基础上的动态优化方法来求解串联型乙炔加氢系统的动态问题。为了提升原算法的收敛性和选择性。采用约束排名变异算子(CRMO)方法参与差分进化算法的变异过程来处理原串联型乙炔加氢系统动态优化问题。

本章提出约束排名增量编码差分进化算法 (Incremental-Encoding Differential Evolution with Constraint Ranking-based Mutation Operator, CRMO-IEDE)方法。首先介绍约束排名变异算法以及算法实现过程。采用基于控制向量参数法的约束排名变异算法后的增量式编码差分进化算法对于串联型乙炔加氢动态优化问题的求解进行详细的介绍。然后, 利用 CRMO-IEDE 与 IEDE 算法对串联型乙炔加氢反应模型进行求解对比, 验证 CRMO-IEDE 算法能够有效提升原算法的收敛性和选择性。为了求解两段加氢反应器催化剂的最佳切换周期以及对应时间的反应器的入口温度和入口加氢量的控制。通过枚举法, 找出不同催化剂切换周期组合的目标值及其优化的控制集。最后, 简单介绍了各类稳态优化方案以及结果, 对比说明动态优化方法在求解复杂化工问题中的优势。

4.2 约束排名变异算法

DE 算法通过完全随机选择个体的方法参与变异操作, 故存在有收敛性能低、易陷入局部最优解。为了加强 IEDE 算法的选择性, 改进原来的无约束的单目标的差分排名变异算法(RMO)^[81]中的约束排名法, 并将其与 IEDE 算法相结合, 提出了约束排名变异算子(Constraint Ranking-based Mutation Operator, CRMO)。将 CRMO 机制运用到 IEDE 的变异的的操作过程中, 大大提升 IEDE 的收敛性和选择性。串联型乙炔加氢反应模型是带有时间节点约束的复杂动态优化问题, 而应用 CRMO 能够加快处理这类问题的速度和求解精度。对于整个种群, 使用约束排名法对种群按可行解优先准则从优到劣进行排序, 然后对于每个个体根据优劣赋予选择概率, 优秀的个体参与到差分进化算法中的几率更大。约束排名法对 DE 算法中的种群进行排序, 具体实现流程图如图 4.1 所示的。

首先, 进行个体评价操作, 计算出每个个体的 *obj* 和 *vio*, 然后, 利用约束排名法

将种群的个体进行优劣排序，排在前面的优秀个体将被赋予较高的排名。其中，排到第 i 个位置的排名值 R_i 计算如下：

$$R_i = NP - i, i = 1, 2, \dots, NP \quad (4-1)$$

排在第 i 个个体的选择概率计算如下：

$$p_i = \frac{R_i}{NP}, i = 1, 2, \dots, NP \quad (4-2)$$

Input: 评价种群中所有个体的目标函数值 obj 和约束违反度 vio

- 1: $vio=0$ 且 $fitness = obj$
 - 2: 选择最小的 $fitness$ ($minfit$)
 - 3: $vio \neq 0$, 则 $fitness = minobj - vio$
 - 4: 根据当前种群个体的 $fitness$ 进行从大到小排序
-

图 4.1 约束排名法

Fig.4.1 Constraint ranking technique

由式(4-2)可知，优秀个体被赋予较大的选择概率参与差分进化算法的变异过程，从而优秀个体的信息将以更大概率传递给下一代个体。图 4.2 描述的是处理个体排名的方法，根据式(4-2)所得到的选择概率进行相关的个体选择，为变异操作选择三个不同的个体参与系统的变异过程中。

Input: 种群个体排名值 R_1, R_2, \dots, R_{NP} ；选择概率 p_1, p_2, \dots, p_{NP}

Output: 选择个体随机整数 r_1, r_2, r_3

- 1: 随机选取整数 $r_1 \in [1, NP]$
 - 2: **While** $rand > p_{r_1}$ 或 $r_1 = i$
 - 3: 随机选取整数 $r_1 \in [1, NP]$
 - 4: **END**
 - 5: 随机选取整数 $r_2 \in [1, NP]$
 - 6: **While** $rand > p_{r_2}$ 或 $r_2 = i$ 或 $r_2 = r_1$
 - 7: 随机选取整数 $r_2 \in [1, NP]$
 - 8: **END**
 - 9: 随机选取整数 $r_3 \in [1, NP]$
 - 10: **While** $rand > p_{r_3}$ 或 $r_3 = i$ 或 $r_3 = r_2$ 或 $r_3 = r_1$
 - 11: 随机选取整数 $r_3 \in [1, NP]$
 - 12: **END**
-

图 4.2 基于排名的个体选择

Fig. 4.2 Ranking-based individual selection

4.3 约束排名变异算法的增量编码差分进化算法介绍

由第三章介绍可知基于 CVP 方法的 IEDE 算法能够求解串联型乙炔加氢动态优化问题，但是求解效率和收敛性有待进一步提升。在第三章中并没有考虑不同的两段反

应器催化剂切换周期组合对串联型乙炔加氢反应系统的目标函数值的影响。为了提升原算法的性能，应用 CRMO-IEDE 方法对串联型乙炔加氢动态优化问题进行求解。

对于串联型乙炔加氢反应系统动态优化，其中，设定一段加氢反应器催化剂的切换周期范围为 $D_{i,R1} \in [300, 440]$ ，二段加氢反应器催化剂的切换周期范围为 $D_{j,R2} \in [100, 140]$ ，离散阶段天数 $k=20$ 天。基于 CVP 的 CRMO-IEDE 算法的具体实现步骤如下：

Step1: 确定两段加氢反应器分别的催化剂切换周期 $D_{i,R1}$ ， $D_{j,R2}$ 以及根据实际需求确定每个阶段的天数 k 。利用 CVP 方法将串联型乙炔加氢反应系统进行离散，确定离散维度 N ，其中控制变量包括加氢量和入口温度 $U=[H \ T]$ ，取值范围为 $U \in [U_{\min}, U_{\max}]$ ；DE 的种群的个体数目为 NP 。其中，增量编码参数表示如下 $R=[R_H, R_T]=(r_1, r_2, \dots, r_{2*N+m1+2})=(r_1, r_2, \dots, r_D)$ 。

Step2: 初始化种群为 $R^0=[R_1^0, R_2^0, \dots, R_{NP}^0]$ ，种群中的个体表示为 $R_i^0=[r_{i,1}^0, r_{i,2}^0, \dots, r_{i,D}^0]$ ， D 为优化问题的维度；通过增量式编码方式求解出相应的 $U_i^0=[u_{i,1}^0, u_{i,2}^0, \dots, u_{i,N}^0]$ ，从而求解出所有种群的目标值 $obj(U_i^0)$ 和约束违反度 $vio(U_i^0)$ ，利用 Deb's 准则找到当前种群中的最优解。

Step3: CRMO-IEDE 算法实现， $F=0.5$ ， $CR=0.9$ ， $MaxGen=2000$ 和 $NP=3*D^{[80,81]}$ 。

Step3.1: CRMO 算法，在进行变异操作之前，先对种群个体进行排序。对种群中的个体按照可行解优先准则从好到坏进行排序，然后对所有个体根据优劣特性赋予选择概率，优秀的个体以较大的选择概率参与变异，而低劣的个体以较小的选择概率参与到变异操作；

Step3.2: 变异操作，进行变异操作，得到新的变异种群 $V^s=[V_1^s, V_2^s, \dots, V_{NP}^s]$ ；

Step3.3: 修复操作，如果变异算子 $v_{i,j}^s \notin [0,1]$ ，使用修复算子使变异算子 $v_{i,j}^s \in [0,1]$ 在取值范围之内；

Step3.4: 交叉操作：根据种群所得参数进行交叉操作；

Step3.5: 评价操作：根据求解出来的 $R^s=[R_1^s, R_2^s, \dots, R_{NP}^s]$ ，依据增量式编码法求解出对应的 $U^s=[U_1^s, U_2^s, \dots, U_{NP}^s]$ ，然后求解出种群的目标值 obj 和约束违反度 vio 。

Step3.6: 选择操作：利用 Deb's 准则选出最优个体。

Step4: 终止条件，如果种群满足终止条件或达到最大迭代次数 $MaxGen$ ，则输出最优解。否则回到 step3。

图 4.3 是根据上述的算法步骤所描述的约束排名变异算法的增量编码差分进化算法的整体流程图，其简单描述了算法处理串联型乙炔加氢动态优化问题的方法步骤。

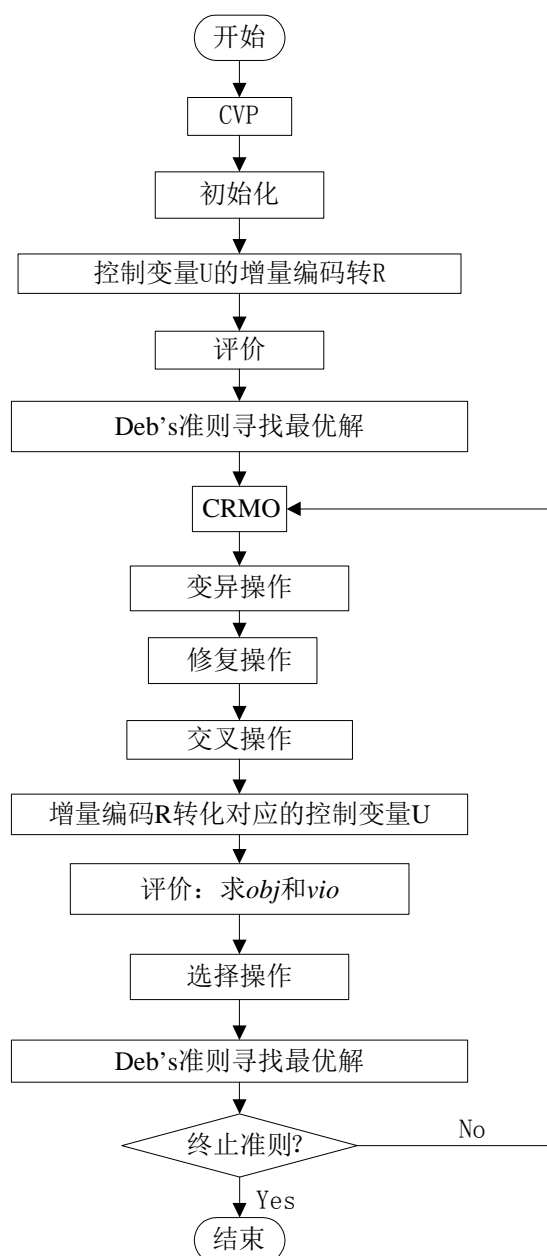


图 4.3 基于 CVP 的 CRMO-IEDE 算法流程图

Fig. 4.3 Flow diagram of the CVP-based CRMO-IEDE algorithm

4.4 动态优化方法比较

第三章采用的基于 CVP 离散方法的 IEDE 动态优化方法来求解串联型乙炔加氢反应系统的动态优化问题，证明了动态优化方法能够有效的处理复杂的串联型乙炔加氢反应系统的动态问题。为了提升原算法的收敛性和准确性，在原算法中结合 CRMO 方法。并将对 CRMO-IEDE 方法和 IEDE 方法对串联乙炔加氢反应系统进行求解，验证 CRMO-IEDE 能够提升 IEDE 算法的收敛性和准确性。

表 4.1 显示了两种不同优化方法在不同的串联型两段反应器的不同切换周期的组合下优化控制变量所得到的目标函数值，其中约束违反度都为 0，说明都能够找到满足系

统条件的最优函数值。CRMO-IEDE 算法所得到的优化结果都优于 IEDE 所得到的结果,说明前者方法在求解带有严格约束的动态优化问题时,能够更好更快的找到全局最优解。其中,两种优化结果最大的目标函数值相差 1098.07 元,那么整体的收益在原来的基础上提升 1.6%。图 4.4 显示了 IEDE 算法和 CRMO-IEDE 算法的目标函数值随着评价函数的变化过程,放大中间变化过程。CRMO-IEDE 算法已经趋于稳定而 IEDE 算法却还处于优化变化的过程之中。故 CRMO-IEDE 方法能够更快的收敛于最优值,且反应后期更快趋于稳定,能够更快更好的得到系统的最优目标值。CRMO-IEDE 提升了 IEDE 算法的收敛性和选择性,能够降低最大迭代次数降低时间消耗等优势。故使用 CRMO-IEDE 算法对串联型乙炔加氢反应系统进行求解,寻找出不同切换周期条件下的最优目标函数值及其最优控制轨迹具有重要意义。

表 4.1 IEDE 和 CRMO-IEDE 不同切换周期优化结果比较

Table 4.1 Optimization results of IEDE and CRMO-IEDE

一段切换 周期	二段切换 周期	目标值	
		IEDE	CRMO-IEDE
300	100	103767.8579	103830.4375
	120	103498.6303	103535.1576
	140	99076.15296	99113.379
320	100	101242.6359	101449.5895
	120	110353.0924	110315.1605
	140	96328.54221	964625.9141
340	100	97673.02121	97831.52809
	120	94546.51867	94604.38986
	140	92549.38948	92718.76663
360	100	92973.64617	93118.63002
	120	88115.066	88251.86904
	140	87864.88276	88047.90799
380	100	87236.09288	87547.33109
	120	83927.03746	84254.20324
	140	82324.13186	82506.84907
400	100	80046.81842	80506.51826
	120	78910.86502	79319.8002
	140	75666.03823	76075.50106
420	100	74175.55301	74602.75429
	120	72638.56146	73072.79295
	140	67606.36589	68704.43615
440	100	68279.53026	68792.3292
	120	66296.23287	66677.28848
	140	62794.56268	63263.03987

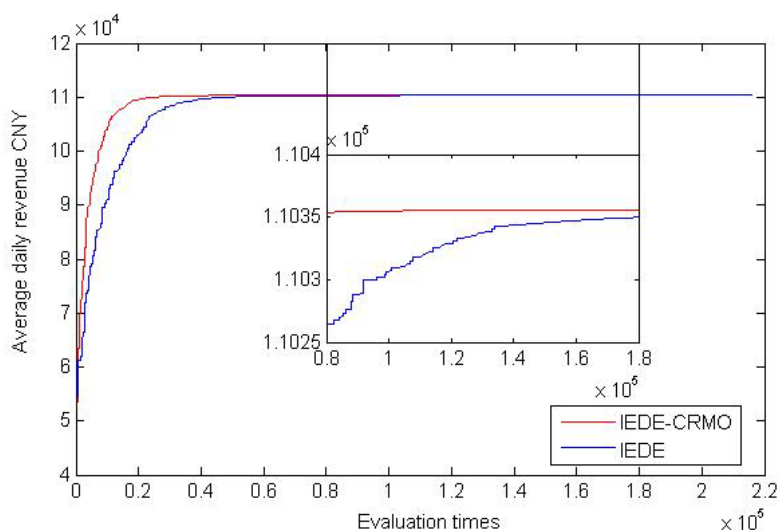


图 4.4 最优切换周期下的目标函数值变化过程

Figs. 4.4 Comparison of the objective function value applying IEDE and IEDE-CEMO

4.5 串联型乙炔加氢系统动态优化结果以及分析

根据建立了串联型乙炔加氢反应系统的动态模型，将原问题描述成式(2-26)和(2-27)的数学表达式。针对实际的工业装置以及实际生产情况，本文将离散阶段天数 k 设置为 20 天，以及根据实际生产数据设定两段加氢反应器的切换周期分别为 $D_{i,R1} \in [300, 440]$ 和 $D_{j,R2} \in [100, 140]$ 。一段加氢反应器的切换周期为 $D_{i,R1} \in \{300, 320, 340, 360, 380, 400, 420, 440\}$ ，二段加氢反应器催化剂的切换周期 $D_{j,R2} \in \{100, 120, 140\}$ 。表 4.2 列出了串联型乙炔加氢反应系统的一段和二段反应器催化剂的切换周期组合。应用枚举法在满足系统要求的条件下，找到最优两段加氢反应器的切换周期以及在该切换周期条件下的控制轨迹，使目标函数值达到最优。从而验证 CRMO-IEDE 方法的收敛性和精确性，提升算法的运行效率。

图 4.5 显示了不同两段加氢反应器切换周期组合的目标函数随评价次数的变化过程，其中二段反应器的催化应用周期为 120 天。如图所示，当一段反应器的切换周期大于 400 天后，满足系统的可行解减少，需要经历更多的代数才能找到系统的可行解。一段加氢反应切换周期越短，系统能够更快找到系统可以解以及更快的找到系统的最优值，说明随着催化剂性能的降低，越来越难以满足系统的生产工艺要求。图 4.6 显示了在最优的切换周期 $D_{2,R1} = 320$, $D_{2,R2} = 120$ 下的目标函数值随评价次数变化的过程。如图所示，在评价后期，目标函数值基本保持不变，保证复杂的串联乙炔加氢反应系统问题能够收敛于全局最优解。且在实际应用中可以减少种群的最大迭代次数，更好更快得到优化结果。在该切换周期条件下，两段串联的加氢反应系统的乙烯产量收益再扣除再生催化剂的费用，平均日收益达到平均每天 110353.1 元。

在串联型乙炔加氢反应系统中，优化控制轨迹 H 和 T 使系统在满足生产要求的前提下，整体经济效益达到最优。在最优的切换周期条件下，控制变量 H 和 T 的最优控

制轨迹如图 4.7、4.8 所示。图 4.7 中显示加氢量随着反应的进行的优化控制轨迹，在 260 天之内，只需最少的加氢量就能够满足系统的要求，260 天之后，催化剂的活性降低，为了满足系统的生产要求，对氢气的需求量越来越多。在系统的加氢反应过程中 T 与加氢反应密切相关，随着反应温度的变化，主副反应速率发生变化，从而影响催化剂的选择性。图 4.8 显示了最优切换周期条件下入口热力学温度 T 的最优控制轨迹。其中， T 的变化呈现出递增的趋势，这是为了在整个反应过程中维持催化剂的选择性和反应的方向，保证乙炔气体的消耗。220 天内，温度处于最小值，说明在催化剂性能较好的反应阶段，可以对温度进行定量的控制，当催化剂的性能降低，需要控制变量来满足系统要求时，在对控制变量进行设定，减少操作次数。

图 4.9、图 4.10 分别表示一段和二段加氢反应器中的每日乙烯平均增量。图 4.9 分析可知随着加氢反应的不进行，催化剂的活性和选择性降低以及副反应加剧等，使平均乙烯增量逐渐减少。前期乙烯产量减少呈现线性规律，不受二段加氢反应器催化剂切换的影响。220 天后，乙烯增量衰减程度越来越高，加入适当的入口温度，使催化剂的活性增大来满足系统生产要求。催化剂活性的降低是不可逆转的，通过控制加氢量和入口温度来最大限度提升当前催化剂的活性。图 4.7 和图 4.9 中，虽然加氢量随着反应进行不断加大，但是乙烯的增量却依旧不可逆转的降低。造成这一现象的原因有一段加氢反应器催化剂活性和选择性越来越差，需要更多的氢气去除反应器中的乙炔气体，同时造成大量的副反应进行。图 4.10 中显示的是二段加氢反应器中的乙烯增量，会根据二段加氢反应器的切换周期呈现出周期性变化的过程。在二段加氢反应器中的催化剂活性一直处于最优的性能，能够保证系统生产要求。从图中可以发现催化剂的活性是处于比较活跃的一种状态，故反应的过程中作为保护反应段，消耗由一段反应器剩下的乙炔含量。根据图示，发现峰值呈现出一种递增趋势，说明一段反应器出口乙炔含量越来越大，在相同条件下导致二段加氢反应器出口的乙烯增量得到增多。

图 4.7、图 4.11 和图 4.12 分别表示一段加氢反应器切换周期为 $D_{2,R1} = 320$ ，二段加氢反应器催化剂切换周期分别为 $D_{2,R2} = 120$ ， $D_{1,R2} = 100$ ， $D_{3,R2} = 140$ 得到对应切换周期条件下的加氢量 H 的优化控制轨迹。当一段和二段加氢反应催化剂活性较高时，加入很少的氢气就能够满足系统的要求。但随着反应的进行，二段加氢反应器在催化剂切换后，其加氢量因催化剂活性的变化而减少。因其二段加氢反应器切换周期不同表现出不同的加氢量控制。图 4.12 可以看出，随着催化剂性能的变差，为了满足系统的要求，其可行解范围是减少的，即一段反应器的切换周期越长，在反应器后期越容易违反系统的生产要求，其控制轨迹也相比与 320 天的控制轨迹更加提前进行优化来延缓催化剂性能的降低。图 4.13 表示切换周期为 $D_{8,R1} = 440, D_{2,R2} = 120$ 中 H 的每阶段控制量，在该切换周期条件下式(2-26)最优。在前期催化剂良好的条件下，需要很少的加氢量很少，随着反应的进行，需要的氢气越来越多。

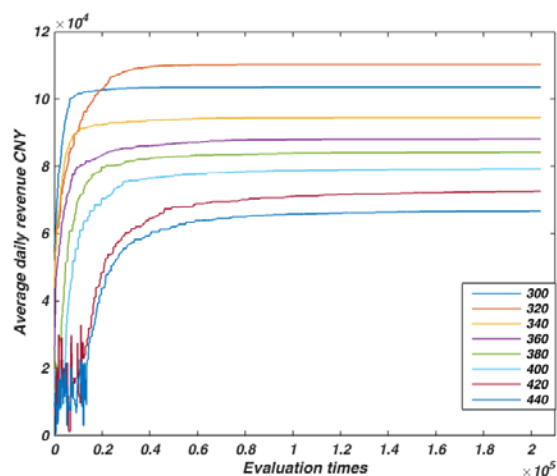


图 4.5 不同切换周期的目标函数值变化过程

Fig. 4.5 Variation of objective function with time for different switching periods

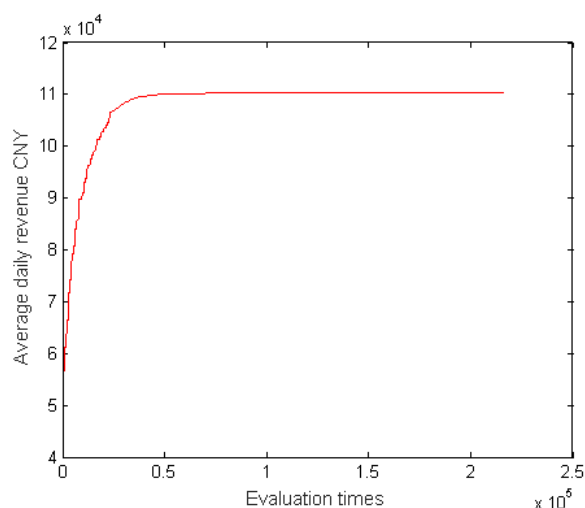


图 4.6 最优切换周期的目标函数值变化过程

Fig. 4.6 Variation of objective function value with time for the optimal switching periods

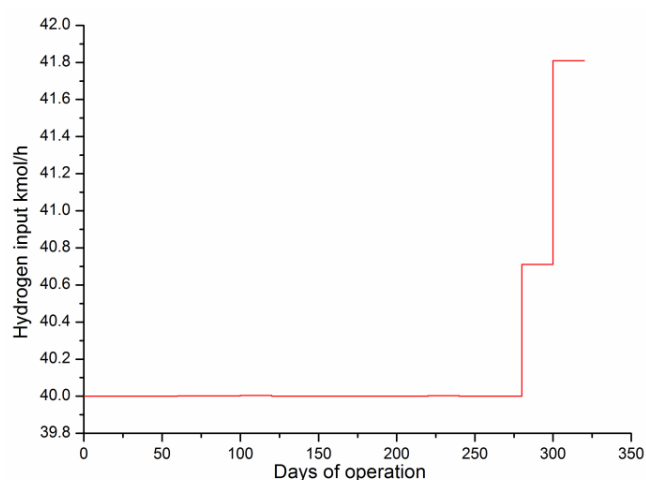


图 4.7 切换周期分别为 320 天和 120 天的加氢量控制轨迹

Fig. 4.7 Hydrogen input with switching periods 320 d for stage 1 and 120 d for stage 2

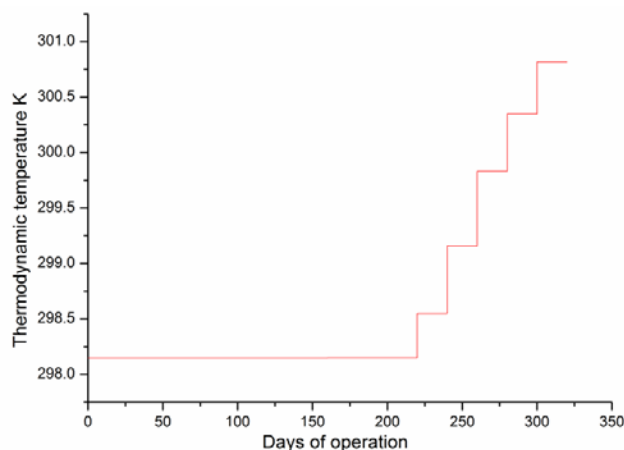


图 4.8 切换周期分别为 320 天和 120 天的入口温度的控制轨迹

Fig. 4.8 Thermodynamic temperature with switching periods of 320 d and 120 d

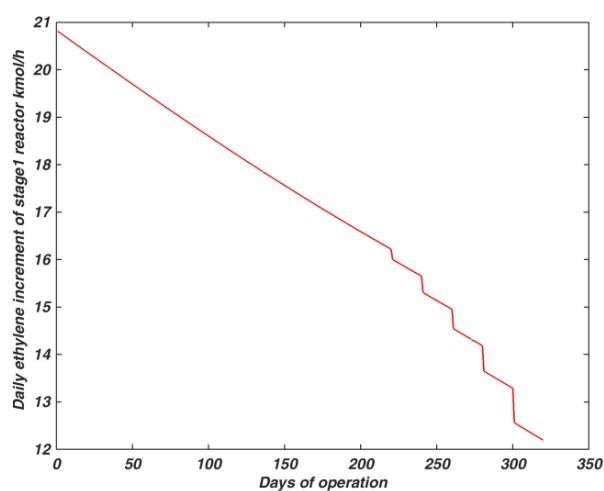


图 4.9 一段反应器平均乙烯增量

Fig. 4.9 Daily ethylene increment of stage 1 reactor over time

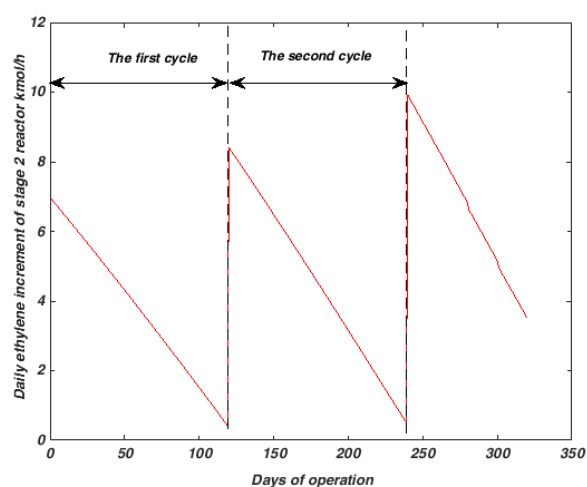


图 4.10 二段反应器平均乙烯增量

Fig. 4.10 Daily ethylene increment of stage 2 reactor over time

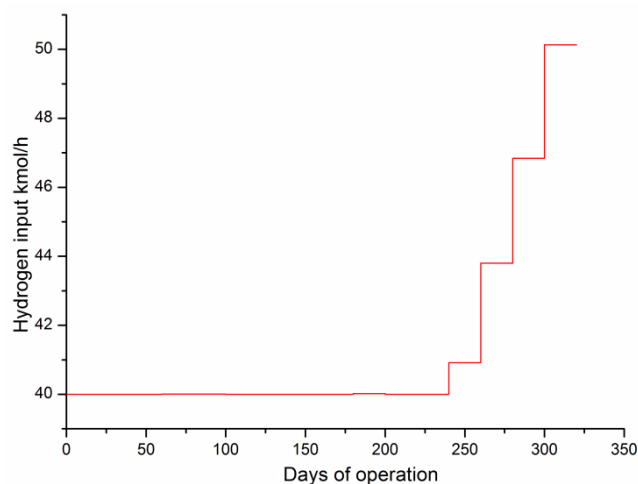


图 4.11 切换周期分别为 320 天和 100 天的加氢量控制轨迹

Fig. 4.11 Hydrogen input with switching periods of 320 d for stage 1 and 100 d

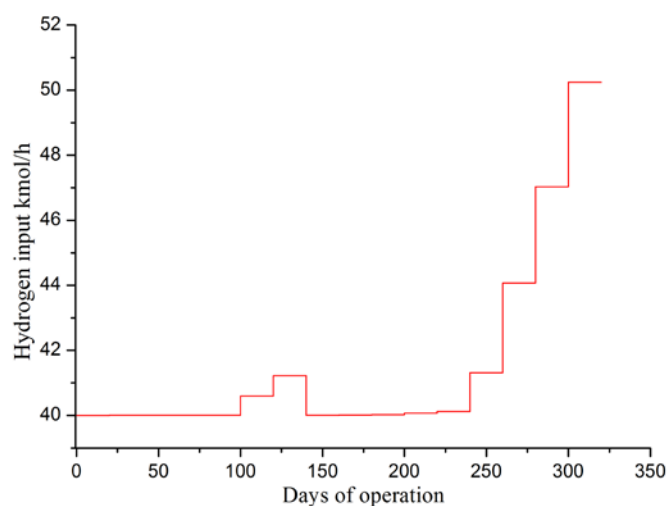


图 4.12 切换周期分别为 320 天和 140 天的加氢量控制轨迹

Fig. 4.12 Hydrogen input over time with switching periods of 320 d and 140 d

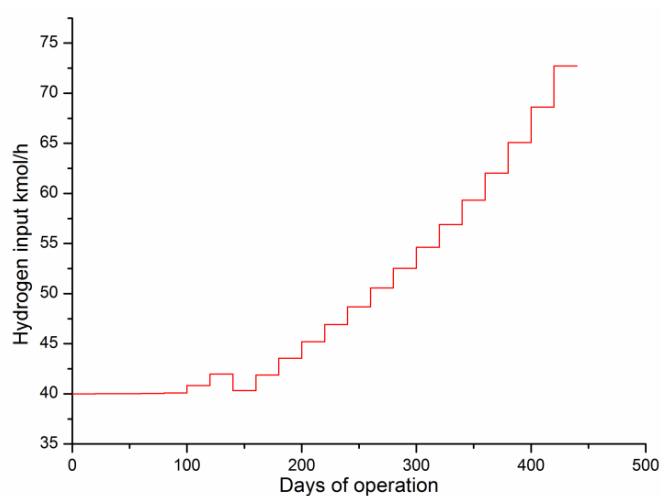


图 4.13 切换周期分别为 440 天和 140 天的加氢量控制轨迹

Fig. 4.13 Hydrogen input with switching periods of 440 d and 140 d

表 4.2 一段、二段反应器不同切换周期的优化结果

Table 4.2 Optimization results for different switching periods for the stage 1 and stage 2 reactors

一段切换周期	二段切换周期	目标值	约束违反度
300	100	103830.4375	0
	120	103535.1576	0
	140	99113.379	0
320	100	101449.5895	0
	120	110315.1605	0
	140	964625.9141	0
340	100	97831.52809	0
	120	94604.38986	0
	140	92718.76663	0
360	100	93118.63002	0
	120	88251.86904	0
	140	88047.90799	0
380	100	87547.33109	0
	120	84254.20324	0
	140	82506.84907	0
400	100	80506.51826	0
	120	79319.8002	0
	140	76075.50106	0
420	100	74602.75429	0
	120	73072.79295	0
	140	68704.43615	0
440	100	68792.3292	0
	120	66677.28848	0
	140	63263.03987	0

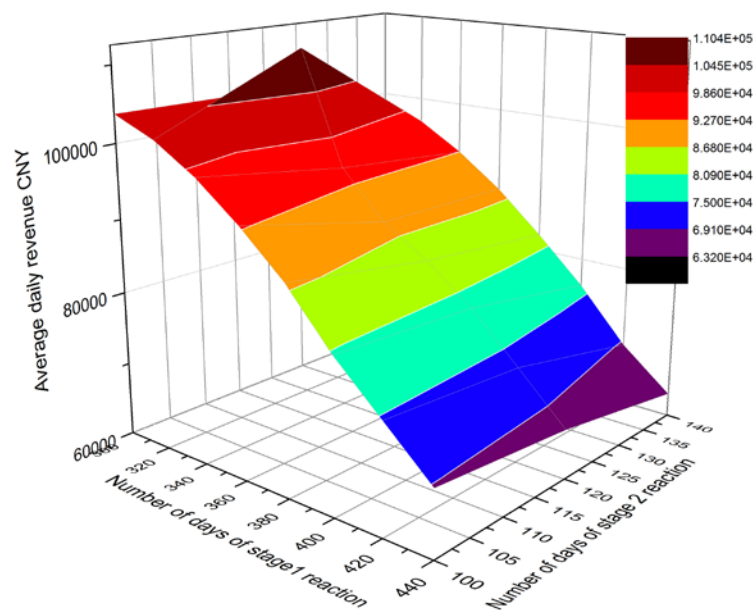


图 4.14 反应器切换周期与效益的关系

Fig. 4.14 Relationship between reactor life cycle and economic benefits

表 4.2 显示了在不同切换周期 $D_{i,R1}$ 与 $D_{j,R2}$ 组合下, 算法求解出的最终的目标函数值、约束违反度以及对应的控制参数 H 、 T 。其中, 约束违反度值为 0, 表示最终系统生产要求都得到了满足, 只需比较不同切换周期的目标函数值的优劣。

图 4.14 表示的是反应器切换周期与效益关系的三维图示, 考虑了串联型乙炔加氢反应系统的切换周期组合对于系统整体经济效益增量的影响, 明显发现当一段加氢反应器催化剂切换周期为 320 天, 二段加氢反应器切换周期为 120 天时, 系统的整体经济效益最大。当二段加氢反应催化剂在使用了 120 天以后, 对于转化微量乙炔反应出现困难, 需要更多的氢气才能使得乙炔含量降低到系统要求。而每次再生催化剂的费用比较高, 因此在生产的过程中需要权衡再生操作费用和提高总选择性后增加效益, 使整体效益最大化。使系统在保证安全生产的同时, 获取的经济利益最大。从切换周期目标值比较来说, 通过优化切换策略和通过相应的加氢量和温度的优化, 得到的经济效益十分可观。

4.6 稳态优化方案对比

前面介绍了动态优化方法求解串联型乙炔加氢动态优化的求解方法。本节简单介绍各种稳态优化方案, 以及在相同条件下所优化出的目标函数值和约束违反度。将静态优化出的结果与动态优化结果进行比较, 验证动态优化方法的有效性。

静态优化方案在传统的处理串联型乙炔加氢的优化中可以将控制变量作为唯一的定量进行优化^[67], 或者对控制变量进行定量递增^[29]。下面这些方法组合处理串联型乙炔加氢的优化问题的加氢量和入口温度的控制变量应用静态优化去进行优化。控制变量的变化范围加氢量 $H \in [40, 80]$; 入口温度 $T \in [298.15, 308.15]$ 。一段加氢反应器切换周期为 320 天, 二段加氢反应器的切换周期分别为 100 天、120 天和 140 天。下面简单介绍各类稳态优化方案。

C-HT 表示为定量递增的加氢量和定量递增的入口温度。加氢量每个阶段递增 $2.5 \text{ kmol} \cdot \text{h}^{-1}$, 如图 4.15 所示, 加氢量的控制轨是等量递增。入口温度每个阶段递增 0.625 K , 如图 4.16 所示, 入口温度的控制是等量递增。满足生产要求的最优的二段加氢反应器的切换周期为 100 天, 其最优的平均日收益为 30387.71 元。C-T(maxH)表示的是加氢量为最大值和定量递增的入口温度。其中加氢量值为固定最大值 $H = 80 \text{ kmol} \cdot \text{h}^{-1}$, 入口温度每个阶段递增为 0.625 K 。满足生产要求下的最优的二段反应器切换周期是 140 天, 目标函数值为 60675.7 元。说明足量的氢气对整个加氢反应过程有着促进作用。

C-T(minH)表示的是最小的加氢量和定量递增的入口温度。其中加氢量的值为最小值 $H = 40 \text{ kmol} \cdot \text{h}^{-1}$, 入口温度控制轨迹与 C-T(maxH)一样。最优的二段反应器切换周期为 100 天, 最优的目标函数值为 101918.65 元, 但并不满足系统约束条件。这是因为反应的后期, 少量的氢气已经无法满足失活的催化剂进行乙炔转化。

C-H(maxT)表示的是定量递增的温度和最大的反应器入口温度。即加氢量每个阶段递增 $2.5\text{ kmol}\cdot\text{h}^{-1}$ ，反应器的入口温度为 308.15 K 。该方法得到的最优二段切换周期是 100 天，最优的目标函数值为 19371.95 元。这是所有方法中目标函数值最小的一种方法。与 C-HT 方法对比显示温度控制对于加氢反应系统的控制具有重要意义。

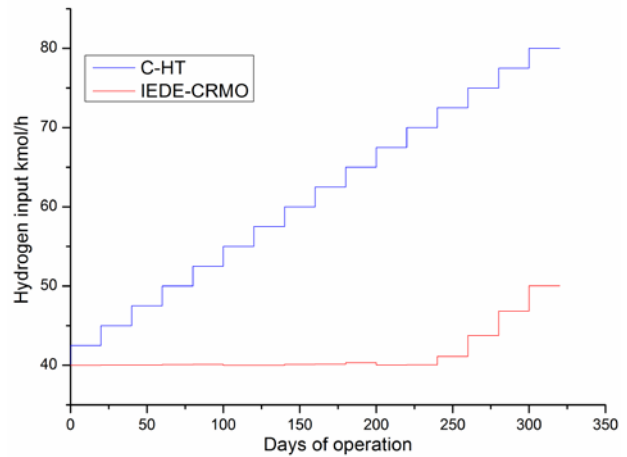


图 4.15 不同方案的切换周期(一段 320 天，二段 100 天)加氢量控制轨迹

Fig. 4.15 Hydrogen input over time with switching periods 320 d for stage 1 and 100 d for stage 2 of the different methods

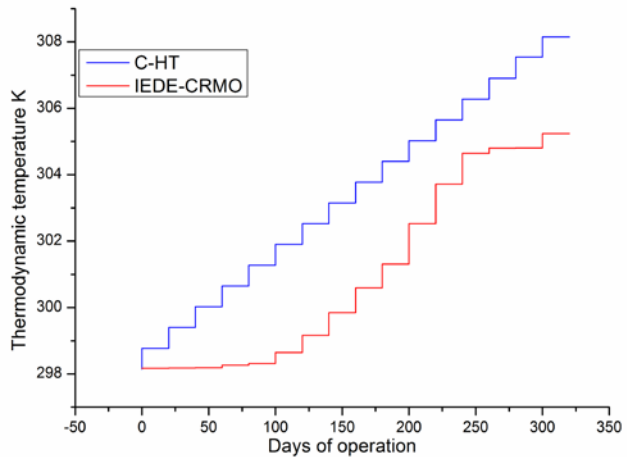


图 4.16 不同方案的切换周期(一段 320 天，二段 100 天)入口温度控制轨迹

Fig. 4.16 Thermodynamic temperature over time with switching periods of 320 d for stage 1 and 100 d for stage 2 of the different methods

C-H(minT)方法与 C-H(maxT)方法类似，只是反应器的入口温度由最高的反应温度转变为最低的反应温度。即反应器的入口温度为 298.15 K 。该方法得到的最优二段切换周期是 100 天，最优的目标函数值为 44465.61 元。从这两种方法的优化结果可以看出，温度高对于整个加氢反应过程而言不总是积极促进的作用，需要通过合理的控制入口温度才能对整个加氢反应过程起到积极促进的作用。

min HT 方法表示入口的加氢量和入口温度为最低。即入口加氢量为 $40\text{ kmol}\cdot\text{h}^{-1}$ ；反应器的入口温度为 298.15 K 。该方法得到的最优二段切换周期是 100 天，最优的目标函数值为 114151.24 元，但系统的违反度不为 0，即不满足系统生产要求。

max HT 方法表示的是加氢量的控制轨迹为 $H = 80\text{ kmol}\cdot\text{h}^{-1}$ ，入口温度的控制轨迹为 308.15 K。该方法得到的最优二段切换周期是 120 天，最优的目标函数值 72603.63 元。其能够满足系统的生产要求，但是过量的氢气和温度造成氢气损失以及促进副反应的发生。

min T 方法表示加氢量为最大值 $H = 80\text{ kmol}\cdot\text{h}^{-1}$ ，入口温度为最低温度 298.15 K。该方法所得到的最优二段切换周期为 140 天，最高收益为 45453.46 元。

min H 表示的是加氢量为最小值 $H = 40\text{ kmol}\cdot\text{h}^{-1}$ ，入口温度为 $T = 308.15\text{ K}$ 。该方法优化结果是不满足系统条件的，最优目标函数值为 92610.09 元。

表 4.3 显示了在相同的优化条件下的不同方法的优化结果。从违反度值 *vio* 显示情况下，在最低的入口加氢量的情况下，虽然目标值相对较高，但是无法满足系统生产要求，即出口乙炔含量不满足系统要求。满足系统生产要求的方法中最优的目标值为 72603.63 元。而动态优化方法所获得的最优解为 110353.09 元。日均收益提升了 37749.46 元，效益提升了 51.99%。对于整个系统的效益提升是十分可观的。

表 4.3 不同方案在相同条件下的优化结果

Table 4.3 Results of the different method under the same condition						
一段切换周期	320					
二段切换周期	100		120		140	
	<i>obj</i>	<i>vio</i>	<i>obj</i>	<i>vio</i>	<i>obj</i>	<i>vio</i>
C-HT	30387.71	0	29352.38	0	27367.6	0
C-T(maxH)	58508.57	0	59087.19	0	60675.7	0
C-T(minH)	101918.65	118.51	99934.18	118.51	96888.19	118.51
C-H(maxT)	19371.95	0	18025.74	0	15665.33	0
C-H(minT)	44465.61	0	43810.03	0	42206.17	0
min HT	114151.24	400.2	112265.84	400.2	109292.43	400.2
max HT	69682.71	0	72603.63	0	70603.24	0
min T	44088.75	0	44266.42	0	45453.46	0
min H	92610.09	167.98	90437.14	167.98	87161.68	167.98
CRMO-IEDE	101242.64	0	110353.09	0	96328.54	0

采用动态优化方法 CRMO-IEDE，入口加氢量的控制轨迹如图 4.15 所示，入口温度的控制轨迹如图 4.16 所示。采用动态优化方法所得到的目标函数值满足系统条件最优解为 110353.09 元。其中方案 C-HT 与方案 C-T(maxH)比可以发现，在乙炔加氢的反应过程中，加氢量对于整个目标函数值的优化结果有这重要的影响，最大的加氢量与递增加氢结果显示最大加氢有着优势，而从动态优化中得出的加氢量的控制轨迹可以发现，合理的控制加氢量，能够合理控制乙炔加氢的反应中催化剂的选择性，促进系统朝主反应反向进行。方案 max HT 与方案 min T 和方案 C-H(maxT)与方案 C-H(minT)显示出来温度能够在系统中根据系统情况影响乙炔加氢反应。动态优化方法能够将控制变量进行合理的配合，其中加氢量的控制轨迹如图 4.15 所示；入口温度的控制轨迹如图 4.16 所示。与静态优化方法的控制轨迹相比，动态优化的控制轨迹更加灵活多

变。在满足系统要求的条件下，目标值达到最优，实现对于乙炔加氢反应系统的动态优化控制。

4.7 本章小结

为了更有效的求解带有时间节点约束的串联型乙炔加氢系统动态优化问题，本章提出将约束排名变异算子结合到原来的 IEDE 算法中。为了验证 CRMO-IEDE 算法能够提升原算法的选择性和收敛性，将 IEDE 与 CRMO-IEDE 算法的优化结果进行比较。求解串联型乙炔加氢系统动态优化问题，利用枚举两段加氢反应器的不同切换周期组合，利用动态优化方法找到对应切换周期的满足系统生产要求的最优经济效益以及对应的加氢量和入口温度的控制轨迹，最终找出最优的切换周期组合。通过对串联型乙炔加氢模型计算，可以合理分配两段反应器的乙炔转化率任务。而因一段和二段切换周期以及催化剂活性不同，加氢量随反应过程中表现出周期性的变化，而动态优化能够表现出这种周期性的变化过程以及控制变量的对应量，相比以前的反应能够得到相对精确的优化值。根据切换周期不同，考虑到再生费用和产品价格，通过比较目标值的大小找到最优的二段反应器的切换周期为 120 天，一段反应器的最佳切换周期应该为 320 天，同时可以对切换周期内相应的加氢量和温度进行优化控制。与稳态优化方案进行对比，验证了动态优化方法的有效性以及合理性。

第 5 章 总结与展望

5.1 研究工作总结

动态优化问题广泛存在于当今各类实际化工生产过程中，而动态优化方法能对复杂的系统进行系统的分析，并对生产过程进行实时分析与控制，从而实现化工生产过程的最优控制。本文以乙烯装置中的串联型乙炔加氢反应系统为研究对象，根据串联反应器的生产状态建立两段串联的乙炔加氢反应动态模型，并应用动态优化方法求解这一复杂的串联乙炔加氢反应系统模型进行研究，验证了动态优化方法的有效性。本文主要的研究工作如下：

(1) 论文背景及现状研究。本文首先简单介绍了研究背景和研究意义。然后，对乙烯装置中的串联乙炔加氢生产流程进行描述，并简述了国内外在乙炔加氢建模与优化领域的研究现状。最后介绍了动态优化方法的问题描述和现状，以及动态优化方法和静态优化方法的区别。

(2) 对串联型乙炔加氢反应动态建模及可控变量进行影响分析。叙述了串联型乙炔加氢反应生产流程以及两段加氢反应器各自满足生产条件。介绍了一段加氢反应器的反应原理、动力学模型、反应器模型和催化剂动力学模型，并根据实际生产数据建立一段加氢反应器的动态模型。因二段加氢反应器在生产中的保护作用，根据实际生产数据的拟合出二段加氢反应器的加氢选择性线性模型，并根据串联乙炔加氢反应系统的实际生产状况建立串联型乙炔加氢系统动态模型并与实际生产装置出口物料进行比较。同时讨论了不同进料工况下的操作参数变化对反应过程的影响，验证了串联型乙炔加氢反应器动态模型的稳定性，可以用于指导实际工业生产。

(3) 提出了增量式编码差分进化算法对串联型乙炔加氢反应动态模型进行动态优化求解。首先对差分进化算法、控制向量参数法、增量式编码法、状态约束处理方法等进行简单的介绍。并将基于控制向量参数法的 IEDE 算法求解串联型乙炔加氢动态模型执行步骤进行详细描述。最后，利用 IEDE 算法求解串联型乙炔加氢反应系统模型，结果显示该方法能够求解系统的收敛解，并将其优化结果与实际生产状态数据进行比较，证明动态优化方法的有效性。

(4) 提出基于约束排名增量编码差分进化算法来求解串联型乙炔加氢动态模型。简单介绍了约束排名变异算法的实现过程，并将算法的实现过程流程步骤进行详细介绍。将 IEDE 算法与 CRMO-IEDE 算法对串联型乙炔加氢反应模型进行求解，并比较收敛状态和结果说明 CRMO-IEDE 算法提升了 IEDE 算法的收敛性和求解精度，能够更好更快处理串联型乙炔加氢动态优化问题。枚举了两段加氢反应器的不同的切换周期的组合找到使经济效益最优的最佳两段催化剂切换周期，并给出对应控制变量的最优控

制轨迹。最后，将动态优化与静态优化方案结果进行比较，说明 CRMO-IEDE 算法的能够满足乙烯生产工业要求和乙烯产品质量要求，利用最少的氢气消耗，带来最大的经济效益。通过合理配置催化剂的再生周期，使日平均效益达到最优，为乙烯工厂优化生产具有重要意义。

5.2 工作展望

动态优化在工业生产应用领域的研究是当前的热点研究方向之一，动态优化在求解复杂工业模型有着显著的优势。本文实现了串联型乙炔加氢反应系统动态模型的建立以及利用动态优化方法求解该复杂的化工生产问题。动态优化方法能够求解出串联型乙炔加氢反应系统的合理的催化剂切换再生周期，以及得到使目标函数值最优的控制轨迹。但是对于两段加氢反应系统动态优化的研究仍然存在许多不足之处，有待进一步改善和深入对于复杂工业模型的研究。主要包括以下几点：

(1) 对两段乙炔加氢反应器催化剂的合理配置使用。串联型两段乙炔加氢反应器中的催化剂类型是相同的。由本文求解可知，一段加氢反应器的最优切换周期为 320 天，二段加氢反应器的最优切换周期为 120 天。在实际工业生产中，为了节约成本以及节能减耗，将二段加氢反应器切换下来的催化剂再继续作为一段反应器的催化剂继续使用，本文只简单的对理想状态下的两段催化剂的使用周期进行分析。

(2) 混合基函数的 CVP 方法研究，能够根据复杂工业反应特征，使用不同的基函数去逼近最优控制轨线，能够更好的解决实际化工问题。

(3) 新型进化算法求解串联型乙炔加氢反应系统问题有待进一步研究。第四章虽然实现了寻求串联型乙炔加氢反应的最优切换周期组合，但利用的是枚举方法。虽然尝试使用动态优化方法在每次运算过程中都能求解出系统的最佳催化剂再生切换周期以及使系统效益最优的控制轨迹，但每次求解出来的结果都陷入局部最优解。其求解结果与效率远不及通过枚举法。故对串联型乙炔加氢反应模型的动态优化需要进一步研究。

参考文献

- [1] Storen S, Hertzberg T. The sequential linear quadratic programming algorithm for solving dynamic optimization problems[J]. Computers and Chemical Engineering, 1995, 19: 495-500.
- [2] 顾幸生, 刘漫丹, 张凌波. 现代控制理论及应用[M].上海: 华东理工大学出版社, 2008.
- [3] 段海滨, 张祥银, 徐春芳. 仿生智能计算[M].北京: 科学出版社, 2011.
- [4] Biegler L T. An overview of simultaneous strategies for dynamic optimization[J]. Chemical Engineering and Processing: Process Intensification. 2007, 46(11): 1043-1053.
- [5] Kameswaran S, Biegler L T. Simultaneous dynamic optimization strategies: Recent advances and challenges[J]. Computers and Chemical Engineering. 2006, 30(10):1560-1575.
- [6] Bellman R. Dynamic Programming[M]. Princeton University Press Princeton, USA, 2010.
- [7] Lin Q, Loxton R, Teo K L. The control parameterization method for nonlinear optimal control: a Survey[J]. Journal of Industrial and Management Optimization. 2014, 10(1):275-309.
- [8] Jiménez-Hornero J E, Santos-Dueñas I M, García-García I. Optimization of biotechnological processes. The acetic acid fermentation. Part III: Dynamic optimization[J]. Biochemical Engineering Journal. 2009, 45(1):22-29.
- [9] 袁亚湘, 孙文瑜. 最优化理论与方法[M]. 北京: 科学出版社, 1997.
- [10] Shelokar P, Kulkarni A, Jayaraman V R, Siarry P. Metaheuristics in process engineering: a historical perspective[M]. Applications of Metaheuristics in Process Engineering. Springer International Publishing, 2014, 23(4):1-38.
- [11] Zehnder S. What are Western Europe's petrochemical feedstock options[J]. Hydrocarbon Process. 1998, 77(2):59-64.
- [12] 戴维, 朱警. C2 馏分选择加氢工艺和催化剂研究进展[J]. 石油化工. 2000, 29(7):535-540.
- [13] Molnár Á, Sárkány A, Varga M. Hydrogenation of carbon-carbon multiple bonds: chemo-region and stereo-selectivity [J]. Journal of Molecular Catalysis A Chemical. 2001, 173(1/2): 185-221.
- [14] Näsi N, Alikoski M, White D C. Advanced control of acetylene reactor [J]. Hydrocarbon Process, 1985, 6: 57-60.
- [15] Gobbo R, Soares R P, Lansarin M A, Secchi A R, Ferreira J M P. Modeling, simulation,

- and optimization of a front-end system for acetylene hydrogenation reactors [J]. Brazilian Journal of Chemical Engineering, 2004, 21(4):545-556.
- [16] Abilov A, Kocak MC. An optimal control application to an industrial hydrogenation reactors[J]. Chemical Engineering Research and Design, 2000, 78(4): 630-632.
- [17] Khan N A, Shaikhutdinov S, Freund H J. Acetylene and ethylene hydrogenation on alumina supported Pd-Ag model catalysts [J]. Catalysis Letters. 2006,108(3):159-164.
- [18] 王飞, 罗娜, 蒋达, 钱峰. 乙烯装置碳二加氢反应器动态建模与控制[J]. 计算机与应用化学, 2012, 29(1): 85-89.
- [19] Khodamorad S H, Fatmehsari D H, Rezaie H. Analysis of ethylene cracking furnace tubes[J]. Engineering Failure Analysis. 2012, 21(2):1-8.
- [20] 王红梅, 王志. 碳二选择加氢催化剂研究进展[J]. 河北化工. 2009, 32(4): 4-6.
- [21] Weirauch W. Naphtha, gasoline demand is forecast[J]. Hydrocarbon Process. 1998, 77(9):25-27.
- [22] Gobbo R, Soares R P, Lansarin M A, Secchi A R, Ferreira J M P. Modeling, simulation, and optimization of a front-end system for acetylene hydrogenation reactors [J]. Brazilian Journal Chemical Engineering, 2004,21(4):545-556.
- [23] 周俊. 浅谈乙烯装置乙炔后加氢技术[J]. 中国化工贸易. 2012, 4(4): 247-249.
- [24] 车春霞, 赵育榕, 谭都平. 碳二加氢工艺流程比较[D]. 第十一届全国青年催化学术会议论文集. 兰州:2007.
- [25] Chachuat B, Singer A B, Barton P I. Global methods for dynamic optimization and mixed-integer dynamic optimization[J]. Industrial and Engineering Chemistry Research. 2006,45(25):8373-8392.
- [26] Tian Liang, Hu Guanghua, Du Wenli, Qian feng. Comprehensive CFD simulation of the optimizations of geometric structures and operating parameters for industrial acetylene hydrogenation reactors[J]. The Canadian Journal of Chemical Engineering, 2016, 94(12), 2427-2435.
- [27] Luo Xionglin, Tu Fei, Du Dianlin, Zuo Xin. Advanced control of acetylene hydrogenation reaction (III): Control strategy and its application[J]. Control and Instruments in Chemical Industry, 2003, 30(3): 10-15.
- [28] 罗雄麟, 刘建新, 许锋, 等. 乙炔加氢反应器二维非均相机理动态建模及分析[J]. 化工学报. 2008, 59(6): 1454-1461.
- [29] 田亮, 蒋达, 钱峰. 乙炔加氢反应系统操作优化策略[J]. 化工学报. 2015, 66(1): 373-377.
- [30] 胡宝龙, 胡贵华, 蒋达, 等. 碳二加氢等温反应过程模拟与操作参数优化[J]. 化工学报. 2015, 66(1): 366-372.

- [31]Azizi M, Zolfaghari Sharak A, Mousavi S A, et al. Study on the Acetylene Hydrogenation Process for Ethylene Production: Simulation, Modification, and Optimization[J]. Chemical Engineering Communications. 2013, 200(7): 863-877.
- [32]Abilov A, Kocak M C. An optimal control application to an industrial hydrogenation reactor[J]. Chemical Engineering Research and Design. 2000,78(4):630-632.
- [33]蒋明敬, 王吉平. 碳二加氢反应器运行性能的优化[J]. 齐鲁石油化工. 2002,30(4):305-307.
- [34]Caetano R, Lemos M A, Lemos F, et al. Modeling and control of an exothermal reaction[J]. Chemical Engineering Journal. 2014, 238(4): 93-99.
- [35]张东平, 王功华. 乙炔加氢反应器的模拟与分析[J]. 石油化工. 2003, 32(5): 414-417.
- [36]Gordon Weiss. Modeling and Control of an Acetylene Converter[J]. Journal of Process Control. 1996,6(1):7-15.
- [37]Kim W J, Moon S H. Modified Pd catalysts for the selective hydrogenation of acetylene[J]. Catalysis today. 2012, 185(1): 2-16.
- [38]N S Schbib, A F Errazu. Dynamics and Control of Industrial Front-End Acetylene Converter[J]. Computers and Chemical Engineering. 1994,18(1):S355-S369.
- [39]Biegler L T, Cervantes A M, Wachter A. Advances in simultaneous strategies for dynamic process optimization[J]. Chemical Engineering science. 2002, 57(4):575-593.
- [40]陈旭. 基于进化计算的动态多目标优化方法研究[D]. 上海: 华东理工大学, 2015.
- [41]Luus R. Iterative dynamic programming[M]. USA: CRC Press, 2010.
- [42]Pontryagin L S, Boltyanskil V G, Gamkrelidge R V, Mishchenko E F. The mathematical theory of optimal processes[M].USA: Inter science, 1965.
- [43]Bryson A E, Ho Y C. Applied optimal control: optimization, estimation and control[M]. Hemisphere Publishing Corp. Washington, DC, 1975.
- [44]Cervantes A, Biegler L T. Optimization strategies for dynamic systems[M]. C.floudas P.pardalos Encyclopedia of Optimization, 2009: 2847-2858.
- [45]Store R, Price K. Differential evolution Differential Evolution – A Simple and Efficient Heuristic for global Optimization over Continuous Spaces[J]. Journal of Global Optimization, 1997, 11(4):341-359.
- [46]Chiou J P, Wang F S. Hybrid method of evolutionary algorithms for static and dynamic optimization problems with application to a fed-batch fermentation process[J]. Computer & Chemical Engineering. 1999,23(9):1277-1291.
- [47]Babu B V, Angria R. Modified differential evolution for optimization of non-linear chemical processes[J]. Computers and Chemical Engineering.2006, 30(6): 989-1002.
- [48]Angira R, Badu B V. Optimization of process synthesis and design problem: A modified

- differential evolution approach[J]. Chemical Engineering Science. 2006, 61(14): 4707-4721.
- [49]Angira R, Santosh A. Optimization of dynamic system: A trigonometric differential evolution approach[J]. Computers and Chemical Engineering. 2007,31(9): 1055-1063.
- [50]Das S, Suganthan P N. Differential evolution: A survey of the state-of-the-art[J]. Evolutionary Computation, IEEE Transactions on, 2011, 15(1):4-31.
- [51]Gong W, Cai Z. Differential evolution with ranking-based mutation operators[J]. Cybernetics, IEEE Transactions on, 2013, 43(6): 2066-2081.
- [52]Debasis S, Jayant M M. Optimization of fed-batch bioreactors using genetic algorithms[J]. Computers and Chemical Engineering, 2004,28(5):789-798.
- [53]Zhang B. Chen D Z. Iterative genetic algorithm and its application to policies optimization for bioreactor[J]. Industrial and Engineering Chemistry Research. 2005, 56: 100-104.
- [54]Debasis S, Jayant M M. Optimization of fed-batch bioreactors using genetic algorithms[J]. Chemical Engineering Science, 2003. 58(11), 2283-2296.
- [55]Pham Q T. Dynamic optimization of chemical engineering processes by an evolutionary method[J]. Computers and Chemical Engineering. 1998.22(7): 1089-1097.
- [56]Pham Q T. Using fuzzy logic to tune an evolutionary algorithm for dynamic optimization of chemical processes[J]. Computers and Chemical Engineering. 2012, 37(1):136-142.
- [57]Qian F, Sun F, Zhong W, Luo N. Novel Hybrid Evolutionary Algorithm for Dynamic Optimization Problems and Its Application in an Ethylene Oxide Hydration Reactor [J]. Industrial & Engineering Chemistry Research. 2012, 51(1):15974-15985.
- [58]Dorigo M, Maniezzo V, Colorni A. The ant system: optimization by a colony of cooperation agents[J]. IEEE Transactions on Systems, Man & Cybernetics. 1996, 26(1): 29-41.
- [59]Rajesh J, Gupta K, Kusumakar H S, Jayaraman V K, Kulkarni B D. Dynamic optimization of chemical processes using ant colony framework[J].Computers and Chemistry, 2001, 25, 583-595.
- [60]Zhang B, Chen D Z, Zhao W X. Iterative ant-colony algorithm and its application to dynamic optimization of chemical process[J].Computers and Chemical Engineering. 2005, 29(10), 2078-2086.
- [61]Kirkpatrick S. Optimization by simulated annealing: Quantitative studies[J]. Journal of Statistical Physics. 1984, 34(5):975-986.
- [62]Shelokar P S, Jayaraman V K, Kulkarni B D. Multicanonical jump walk annealing assisted by tabu for dynamic optimization of chemical engineering processes[J].

- European Journal of Operational Research. 2008, 185(3): 1213-1229.
- [63] Sarkar D, Modak J M. ANNSA: a hybrid artificial neural network/simulated annealing algorithm for optimal control problem[J]. Chemical Engineering Science. 2003, 58(14): 3131-3142.
- [64] Wu X J, Zhu X J. Optimization of a solid oxide fuel cell and micro gas turbine hybrid system[J]. International Journal of Energy Research. 2013, 37(3): 242-249.
- [65] Zhou Y, Liu X. Control parameterization-based adaptive particle swarm approach for solving chemical dynamic optimization problems[J]. Chemical Engineering and Technology. 2014, 37(4): 692-702.
- [66] 王松汉, 何细藕. 乙烯工艺与技术[M]. 北京: 中国石化出版社. 2000.
- [67] 张飞. 乙烯装置中碳二加氢反应器的稳态_动态建模与优化[D]. 上海: 华东理工大学. 2011.
- [68] Borodzinski A. Selective hydrogenation of ethyne in ethene-rich streams on palladium catalysts(Part 1): Effect of changes to the catalyst during reaction[J]. Catalysis Reviews, 2006, 48: 91-144.
- [69] 田亮, 蒋达, 钱锋. 钯金属催化剂上的乙炔工业选择性加氢反应动力学比较[J]. 计算机与应用化学, 2012, 29(9): 1031-1035.
- [70] Schbib N S, García M A, Gigola C E, Errazu A F. Kinetics of front-end acetylene hydrogenation in ethylene production [J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 1996, 35(5): 1496-1505.
- [71] Szukiewicz M. Modeling of fixed-bed reactor: two models of industrial reactor for selective hydrogenation of acetylene[J]. Chemical Engineering Science, 1998, 53(1): 149-155.
- [72] Store R, Price K. Differential Evolution: A Simple and Efficient Adaptive Scheme for Global Optimization over Continuous Space[J]. Journal Global Optimization, 1997, 23(1): 341-359.
- [73] M Epitropakis, D Tasoulis, N Pavlidis. Enhancing differential evolution utilizing proximity-based mutation operators[J]. IEEE Transactions on Evolutionary Computation, 2011, 15(15), 99-119.
- [74] Kapadi M D, Gudi R D. Optimal control of fed-batch fermentation involving multiple feeds using differential evolution algorithm[J]. Process Biochemistry. 2004, 39(11): 1709-1721.
- [75] Wang F S, Chiou J P. Optimal control and optimal time location problems of differential-algebraic systems by differential evolution[J]. Industrial and Engineering Chemistry research. 1997, 36(12): 5348-5357.

- [76] Carolina G, Marcelino, Elizabeth F, Wanner Paulo E M. A novel mathematical modeling approach to the electric dispatch problem: case study using differential evolution algorithms[J]. Proceedings of Conference: IEEE Congress on Evolutionary Computation (CEC). 2013.20(23):400-407.
- [77] Schlegel M, Marquardt W. Adaptive switching structure detection for the solution of dynamic optimization problems[J]. Industrial & Engineering Chemistry Research. 2006, 45(24), 8083–8094.
- [78] Chen X, Du W L, Huaglory T, Qi R B, He W L, Qian F. Dynamic optimization of industrial processes with nonuniform discretization-based control vector parameterization[J]. IEEE Transactions on Automation Science and Engineering, 2014, 11(4):1289-1299.
- [79] Deb K. An efficient constraint handling method for genetic algorithms[J]. computer methods in applied mechanics and engineering. 2000,186(2):311-338.
- [80] Mallipeddi R, Suganthan P N, Pan Q K, Tasgetiren M F. Differential evolution algorithm with ensemble of parameters and mutation strategies[J]. Applied Soft Computing 2011, 11(2): 1679-1696.
- [81] Qin A K, Huang V L, Suganthan P N. Differential evolution algorithm with strategy adaptation for global numerical optimization[J]. IEEE Transactions on Evolutionary Computation, 2009, 13(2):398-417.
- [82] Borodzinski A. Selective hydrogenation of ethyne in ethene-rich streams on palladium catalysts(Part 2): steady-state kinetics and effects of palladium particle size, carbon monoxide, and promoters[J]. Catalysis Reviews, 2008, 50(3): 379-469.

致 谢

时光荏苒，岁月如梭，三年的硕士学习生涯即将结束。这次是真的该和母校说再见了。华东理工大学以其浓厚的学习气氛教我求学，勤奋求实勇攀科研高峰，更以其丰富的内涵教我成人，励志明德脚踏实地做人。值此毕业论文完成之际，我谨向所有支持、关心和帮助我的人们表示由衷的感谢和美好的祝愿。

衷心地感谢我的导师杜文莉教授在这三年的研究所对我的成长所倾注的心血。杜老师在科研上给与我悉心的指导，同时提供了良好和宽松的学术氛围。让我可以选择自己感兴趣的研究方向，鼓励和帮助我在学术的道路上大胆创新，面对困难时，提供给我全面的帮助。同时，杜老师严谨的治学态度、广博的学识、锐意创新的学术精神和勤奋的工作态度是我此生的学习榜样。在此，谨向杜老师致以崇高的敬意。

感谢学校和学院对我们的悉心培养和教育指导，感谢各位授课老师对我们的辛勤教育！感谢钱锋老师、和望利老师、朱远明老师、蒋达老师，正是因为他们无私、严格、仔细、高质量地教导，我才能快速汲取专业知识，迅速提升科研能力，收获丰富的经验。

感谢陈旭师兄，在建模阶段和优化方面的指导和帮助，尤其是分享了大量的动态优化方面的知识以及在实现串联乙炔加氢动态优化给我提供了大量的指导和帮助，让我顺利对乙炔加氢优化领域有较清楚的认识。

感谢我的师兄师姐们在这几年来对我的关心、帮助、鼓励与支持；同时，感谢江朋、崔承瑄、吕露露、毛福星等实验室的兄弟姐妹们。在这个大家庭里，共同学习、分享、进步，能在这样的团队中度过我的硕士生活，我感到万分幸运。

感谢我的好友，陈立芳、唐玲艳和张静，三年来，我们一起营造了温暖的小家，感谢你们在生活中给我的包容和帮助。

深深地感谢我的家人，抚养我长大，教会我做人的道理，鼓励我面对挫折。让我充满勇气和力量，坚定的前行。

最后，感谢各位老师对我的论文进行评审和答辩，你们给了我审视自己学习成果的机会。我会再接再厉，勇往直前。

攻读硕士期间发表的论文以及参与的项目

攻读硕士期间发表的论文：

[1] Wenli Du, Chunyu Bao, Xu Chen, Liang Tian, Da Jiang. Dynamic optimization of the tandem acetylene hydrogenation process[J]. Industrial & Engineering Chemistry Research. 2016, 55(46),11983–11995.

[2] 杜文莉, 鲍春瑜, 陈旭. 串联型乙炔加氢反应过程的动态优化[J]. 信息与控制.2017, 46(1), 83-89.

攻读硕士期间参与的项目：

参与上海石油化工股份有限公司“乙烯装置乙炔加氢反应过程的建模与优化”项目