

研究论文

DOI: 10.11949/j.issn.0438-1157.20171168

基于高斯模型的聚乙烯过程设计与控制集成优化

王矿磊¹, 谢磊¹, 陈荣辉^{1,3}, 苏宏业¹, 王靖岱²¹ 浙江大学控制科学与工程学院, 浙江 杭州 310027; ² 浙江大学化学工程与生物工程学院, 浙江 杭州 310027;³ 台湾中原大学化工系, 台湾 桃园 8863330)

摘要: 聚乙烯反应过程中物流-能流剧烈交叠、反应-传递相互耦合, 使得过程具有强非线性以及多重稳态。传统的顺序设计方法不能保证系统有足够的控制自由度, 当存在扰动和过程参数不确定性时, 仅依靠设计控制器很难提高产品质量。提出一种聚乙烯工艺稳态设计与运行控制的集成优化方案, 创造性地引入 Kriging 高斯模型同时预测模型动态和模型不确定性。另一个重要的贡献是在聚乙烯工艺设计阶段, 设计性能指标, 定量描述过程稳态设计对闭环动态的影响。所提出的方法已经通过对气相聚乙烯工艺设计和运行控制的集成优化进行了验证, 并在参数不确定性和扰动存在情况下仿真证实了集成优化设计方案的高效性。

关键词: 优化设计; 集成; 不确定性; 多重稳态; 聚合物加工; Kriging 模型; 模型预测控制

中图分类号: TQ 9

文献标志码: A

文章编号: 0438—1157 (2018) 03—0936—07

Simultaneous design and control of polyethylene process based on uncertainty Kriging model

WANG Kuanglei¹, XIE Lei¹, CHEN Junhui^{1,3}, SU Hongye¹, WANG Jingdai²

(¹College of Control Science and Engineering, Zhejiang University, Hangzhou 310027, Zhejiang, China; ²College of Chemical and Biological Engineering, Zhejiang University, Hangzhou 310027, Zhejiang, China; ³College of Chemical Engineering, Chung Yuan Christian University, Taoyuan, 8863330, Taiwan, China)

Abstract: Ethylene polymerization process has strong nonlinearity and multiple metastable states, driven by interaction between mass and energy transfer as well as compounded effect of polymerization and transport. Traditional sequential method of process design and control optimization in polymerization process is not capable of providing sufficient control freedom, which high quality products are difficult to manufacture by relying solely on design controller because of disturbance and uncertainty of process parameters. A new approach was proposed to integrate steady state design and control optimization for stable production of high performance polyethylene. The surrogate model (Kriging model) was introduced to simultaneously predict model dynamics and uncertainty. Model uncertainty was feasible space region of uncertain parameters bounded by coefficient confidence. A design performance index was defined to quantitatively interpret impact of steady state design on closed-loop dynamic behavior at process design stage. Closed-loop operating variability was quantified by model predictive controller that was to ensure process operate close to constraints and cost function of MPC that was to penalize deviations of predicted control outputs from reference operating point. The proposed method has been illustrated with integrated optimization of process design and operation control in gas-phase ethylene polymerization and method effectiveness

2017-08-24 收到初稿, 2017-09-05 收到修改稿。

联系人: 谢磊。第一作者: 王矿磊 (1992—), 男, 博士研究生。

基金项目: 国家重点研发计划项目 (2016YFB0303404); 国家自然科学基金创新研究群体项目 (61621002)。

Received date: 2017-08-24.

Corresponding author: Prof. XIE Lei, leix@iipc.zju.edu.cn

Foundation item: supported by the National Key Research and Development Plan (2016YFB0303404) and the Science Fund for Creative Research Groups of the National Natural Science Foundation of China (61621002).

is verified by process simulation under parameter uncertainty and disturbance.

Key words: optimal design; integration; uncertainty; multiple steady states; polymer processing; Kriging model; model-predictive control

引 言

在过去 150 年中, 聚乙烯材料一直是创新的关键推动力, 为社会的发展和进步做出了巨大贡献。全球对聚乙烯产品的需求每年增加 4.0%, 到 2018 年将上升至 9960 万吨, 总产值达到 1640 亿美元。大部分聚乙烯生产过程是在气相流化床反应器中进行的, 已被广泛应用于工业生产, 而中国的聚烯烃生产装置大多都是靠引进国外技术, 且生产的均是低档产品, 产品性能差, 缺乏市场竞争力^[1]。对聚乙烯流化反应过程进行设计与运行控制集成优化具有重要的科学意义。

聚乙烯流化反应的一个重要特征是其操作运行条件要维持在相对较窄的温度范围内, 即反应温度必须高于反应物的露点同时低于其熔点, 以避免气相反应物的冷凝或颗粒熔化^[2-4]。而且由于聚乙烯反应过程中物流-能流剧烈交叠、反应-传递相互耦合, 使得过程具有强非线性以及多重稳态^[5-7]。Ghasem 等^[8]分析了反应参数对聚乙烯反应过程的多重稳态特性的影响, 但其分析仅限于稳态设计。McAuley 等^[9-10]从工艺稳态设计的角度比较了不同种类的操作条件对反应稳定性的影响, 并证实聚乙烯反应过程大多为不稳定过程, 需要适当的温度控制器。聚乙烯生产过程建模和稳态设计策略也持续受到广泛的关注, Mostoufi 等^[11]将流化床抽象分为几个串联的 CSTR 过程, 以描述反应器中的能量流和物料流, 以此预测工业规模 LLDPE 生产产品的性能。但串联的 CSTR 并不实际存在于流化反应装置中, 因此, 这种模型无法应用于控制器的设计。Hosen 等^[12]通过机理模型构建了关于温度的神经网络, 并且以此设计控制器进行温度控制, 然而, 神经网络的训练过程非常耗时且容易出现过拟合。上述建模只针对过程的某个确定操作点, 无法描述多重稳态。多重稳态的存在, 使过程在操作条件不变的情况下表现出不同的动态性能, 例如在多重稳态区域, 即使操作参数不变, 产品转化率会从一个高转化率的稳态点转移到低转化率的稳态点^[13], 严重时甚至会发生飞温爆聚停车, 经济损失巨大。

聚乙烯反应的这些特征如果在过程设计阶段

没有得到重视, 当反应装置参数和操作工况确定后, 试图通过后期设计控制器解决所有问题, 那么控制的难度和成本将是巨大的, 且由于自由度有限, 未必能够达到理想的控制效果。而且, 仅通过稳态设计阶段的优化, 很难在不考虑控制性能的情况下, 量化稳态参数对产品性能的影响。即便设计阶段达到成本最优, 也未必使得整体经济成本最优。

基于上述分析, 可以发现目前聚乙烯流化反应过程的工艺设计和控制系统的顺序设计方法, 无法全面考虑以下几点: ① 不同装置参数对稳态特性的影响, 例如反应装置体积越大, 多重稳态现象就越明显^[14]; ② 不同装置参数对系统动态特性的影响, 例如装置阀门尺寸越大, 控制可作动的范围越大, 就可以更快达到控制目标, 但同时也意味着更高的安装成本; ③ 不同稳态工况对闭环动态特性的影响, 例如在多重稳态区域, 有些稳态点是开环稳定, 有些为振荡, 有些则为开环不稳定^[15-16]。这些都会影响闭环控制设计的成本及控制效果, 使得过程难以达到生产高性能聚乙烯的要求, 对达到最优的经济性能造成了很大的限制。因此, 需要对聚乙烯生产过程进行设计与控制集成优化。

学术界在权衡工艺设计与控制之间进行了很多尝试^[17-20], Luyben 等^[21-22]构造了一个多目标优化问题来整合设计成本和控制成本, 但是对设计成本和控制成本之间权重的分配, 没有一个定量的标准。Perkins 等^[23-25]将表征控制性能的经济成本与设计成本结合, 形成动态优化问题。但是由于使用非线性动态模型, 随着问题规模的增加, 计算量急剧增大, 很难应用于实际过程。从设计和控制的角度来看, 针对聚乙烯流化反应过程强非线性, 多重稳态和工艺参数不确定性等特点, 构建同时表征过程动态以及模型的不确定性的代理模型, 是衡量稳态设计与动态性能的桥梁。由于能够描述模型不确定性的鲁棒模型使用线性模型加上模型参数不确定项的形式, 不确定项的设定没有固定的标准, 通常会过于保守, 而且线性模型描述非线性的能力非常有限。而 Kriging 高斯模型是一种基于数据的非参数模型, 不仅能够进行动态性能的预测, 而且能给出预测的方差^[26-27]。本研究一个主要的贡献点就是将高斯模

型的预测方差与过程的阶跃响应模型结合,模型的不确定项是根据 3σ 准则由预测方差得到。并设计了基于不确定项的模型预测控制器,以控制器的最优控制目标衡量稳态参数设计对控制成本的影响。

本研究将针对气相聚乙烯反应装置进行设计与控制集成优化。首先分析了聚乙烯反应复杂的多重稳态特性,以及不同操作点的选择对系统动态的影响。之后通过 Kriging 高斯模型的预测方差,设计含有不确定项的模型预测控制器,提出了控制器优化目标。最后综合控制的最优目标与稳态设计的经济成本,提出聚乙烯反应装置设计与控制集成优化问题的优化方案。并通过气相聚乙烯反应装置的仿真例子,以验证优化方案的有效性。

1 过程特性与建模

1.1 多重稳态特性

由于复杂的质量-能量相互作用、反应-传递相互耦合,聚乙烯反应过程的操纵变量和被控变量之间呈现强非线性。甚至出现操纵变量不变的情况下,被控变量可以在多个稳态值之间跳变,如图 1 所示。

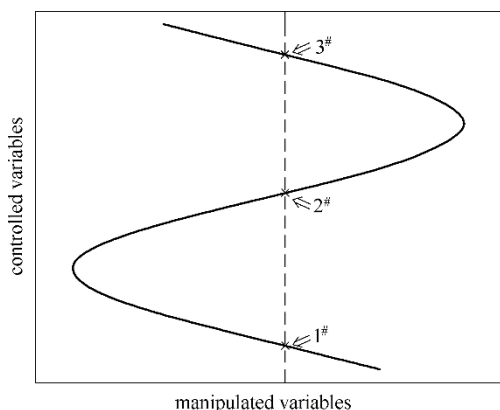


图 1 控制变量与被控变量之间的多重稳态

Fig.1 Illustration of steady state multiplicity

影响聚乙烯产品质量的因素有很多,工艺设计阶段为稳态工作点,反应器参数(如高度、直径、截面积等)。这些参数通过影响过程稳态操作点的特性间接影响产品质量,不同的稳态操作点也将直接影响控制设计的成本和控制效果。从控制的角度来看,1#、2#和3#稳态操作点的动态特性有很大不同,例如被控变量是温度时,1#操作点处于较低温度,对设备和冷却系统要求较低,对应的安装成本低。但1#操作点由于温度较低,产品转化率也会比较低。与之对应的3#操作点温度最高,产品转化率也是最高的,但对设备和冷却系统要求会比较严苛。2#操

作点是产品转化率和安装成本之间的折中方案,但由于2#开环不稳定,增加了对应的控制成本。而且,每一个设备参数都会确定一个或是一组稳态操作点,使用合适的模型既能准确描述过程非线性,同时也可以兼顾稳态点附近的不确定性,就显得非常重要。Kriging 模型由于训练过程能够根据性能指标自我改进提升模型质量,同时根据训练数据的质量给出预测的方差可信度,适合应用于描述具有多重稳态而且过程不确定性的聚乙烯反应过程。

1.2 Kriging 高斯模型

Kriging 高斯模型的基函数具有如下形式

$$\psi^{(i)} = \exp\left(-\sum_{j=1}^k \theta_j |x_j^{(i)} - x_j|^{\rho_j}\right) \quad (1)$$

选取采样数据 $\mathbf{X}=[\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \dots, \mathbf{x}^{(n)}]^T$ 和对应的过程输出 $\mathbf{y}=[\mathbf{y}^{(1)}, \mathbf{y}^{(2)}, \dots, \mathbf{y}^{(n)}]^T$ 。假定采样数据服从某种随机分布,那么相应的输出数据在统计意义上同样是相互相关的。根据式(1)定义的基函数,观测输出数据之间的相关函数可以定义为

$$\text{cor}[\mathbf{y}^{(i)}, \mathbf{y}^{(j)}] = \exp\left(-\sum_{j=1}^k \theta_j |\mathbf{x}_j^{(i)} - \mathbf{x}_j^{(j)}|^{\rho_j}\right) \quad (2)$$

并将模型的参数定义为集合形式 $\boldsymbol{\theta}=[\theta_1, \dots, \theta_n]$, $\mathbf{p}=[p_1, \dots, p_n]$ 。

那么可以得到相关性矩阵

$$\boldsymbol{\Psi} = \begin{bmatrix} \text{cor}[\mathbf{y}^{(1)}, \mathbf{y}^{(1)}] & \dots & \text{cor}[\mathbf{y}^{(1)}, \mathbf{y}^{(n)}] \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \text{cor}[\mathbf{y}^{(n)}, \mathbf{y}^{(1)}] & \dots & \text{cor}[\mathbf{y}^{(n)}, \mathbf{y}^{(n)}] \end{bmatrix} \quad (3)$$

要训练 Kriging 高斯模型,首先根据贝叶斯公式,定义如下的似然函数

$$L(\mathbf{y}^{(1)}, \dots, \mathbf{y}^{(n)} | \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\sigma}) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{n/2}} \exp\left(-\frac{\sum_{i=1}^n (\mathbf{y}^{(i)} - \boldsymbol{\mu})^2}{2\sigma^2}\right) \quad (4)$$

式中的 $\boldsymbol{\mu}$ 、 $\boldsymbol{\sigma}$ 即为观测数据的期望和方差,通过使似然函数最大的方法得到它们的估计值。用采样数据表示并同时取自然对数的形式

$$\ln L = -\frac{n}{2} \ln(2\pi) - \frac{n}{2} \ln(\sigma^2) - \frac{1}{2} \ln |\mathbf{K}| - \frac{(\mathbf{y} - \mathbf{F}\boldsymbol{\mu})^T \mathbf{K}^{-1}(\mathbf{y} - \mathbf{F}\boldsymbol{\mu})}{2\sigma^2} \quad (5)$$

其中, $\mathbf{F}=[1, \dots, 1]_{1 \times n}, [0, \dots, 0]_{1 \times n}^T$ 。

通过式(5)分别对 $\boldsymbol{\mu}$ 和 σ^2 求导,可以得到其极大似然估计。训练完成之后可以得到 Kriging 高斯模型的超参数 $\boldsymbol{\theta}$ 、 \mathbf{p} ^[28],使用这组超参数进行预测时可以得到模型输出的均值以及方差。均值即为模型在

特定训练输入下对输出的预测值, 方差表征了输出预测的可信度^[29]。

当需要新的输入 \hat{x} 下预测对应的输出 \hat{y} 时, 新的输入输出数据对同样要使得模型参数取得极大似然估计。因此新的预测输出与训练数据的输出构成增广相关矩阵如式(6)所示。

$$\xi = \begin{bmatrix} \text{cor}[y^{(1)}, \hat{y}] \\ \vdots \\ \text{cor}[y^{(n)}, \hat{y}] \end{bmatrix} \quad (6)$$

继而, 可以得到所有训练输出与预测数据的相关性矩阵

$$\tilde{\Psi} = \begin{bmatrix} \Psi & \xi \\ \xi^T & 1 \end{bmatrix} \quad (7)$$

那么在取得极大似然估计下的输出预测值为

$$\hat{y} = \hat{\mu} + \xi^T \Psi^{-1} (y - I\hat{\mu}) \quad (8)$$

$\hat{\mu}$ 为其预测均值

$$\hat{\mu} = \frac{1^T \Psi^{-1} y}{1^T \Psi 1} \quad (9)$$

以及对应的预测方差 σ^2 为

$$\sigma^2 = \frac{(y - 1\hat{\mu})^T \tilde{\Psi}^{-1} (y - 1\hat{\mu})}{n} \quad (10)$$

2 含有不确定模型的 MPC

与传统控制 PID 控制相比, MPC 能够允许操作工况更接近约束边界, 而且, 可以实现对过程变量的约束, 保证聚乙烯反应过程的温度始终维持在操作点附近。取预测时域为 P , 系统的预测模型可以由 Kriging 高斯模型得到 $S=[a_1, \dots, a_j, \dots, a_P]$, 考虑到外界扰动以及过程参数的不确定性, 为了增加模型鲁棒性, S 中的每一个阶跃响应系数都包含不确定项 $a_j = \bar{a}_j \pm \Delta a_j$, \bar{a}_j 是 Kriging 模型的预测均值, Δa_j 是对应的预测方差。由此, 可以得到含有不确定性的系统动态矩阵

$$A = \begin{bmatrix} \bar{a}_1 \pm \Delta a_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \bar{a}_M \pm \Delta a_M & \cdots & \bar{a}_1 \pm \Delta a_1 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \bar{a}_P \pm \Delta a_P & \cdots & \bar{a}_{P-M+1} \pm \Delta a_{P-M+1} \end{bmatrix} \quad (11)$$

其中, 标称动态矩阵为 \bar{A}

$$\bar{A} = \begin{bmatrix} \bar{a}_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \bar{a}_M & \cdots & \bar{a}_1 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \bar{a}_P & \cdots & \bar{a}_{P-M+1} \end{bmatrix} \quad (12)$$

图 2 给出了包含不确定项的阶跃响应。其中, 实线是由预测均值构成的标称模型, 虚线区域是考虑不确定参数以及扰动之后模型可能到达的区域。

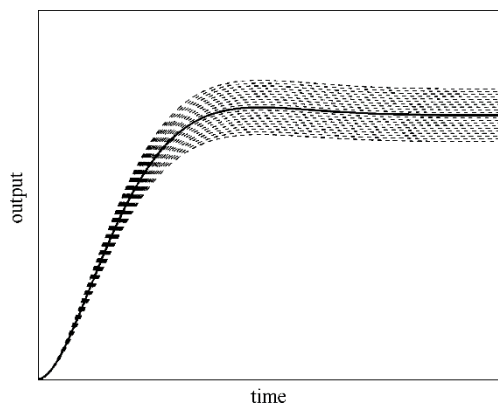


图 2 不确定模型的阶跃响应

Fig.2 Step response with uncertainty term

对于聚乙烯反应过程, 最优控制率 Δu 使系统维持在特定工作状态, 同时控制性能目标最小化

$$\min J = \|y_{OP}(k) - \hat{y}_{PM}(k)\|_Q^2 + \|\Delta u_M(k)\|_R^2 \quad (13)$$

$$Q = \text{diag}(q_1, \dots, q_P), R = \text{diag}(r_1, \dots, r_P)$$

其中, q_i 、 r_j 描述跟踪误差和控制作用的权重系数; P 和 M 分别为预测时域和控制时域; $y_{OP}(k)$ 为控制轨迹, 对于聚乙烯过程来说为设定值; $\hat{y}_{PM}(k+i|k)$ 是 k 时刻对 $k+1$ 时刻的预测输出, 可以由式(14)得到; $\Delta u(k)$ 是 k 时刻的控制增量。

$$\hat{y}_{PM}(k) = \hat{y}_{P0}(k) + A \Delta u_M(k) \quad (14)$$

以及

$$\hat{y}_{PM}(k) = \begin{bmatrix} \hat{y}_M(k+1|k) \\ \vdots \\ \hat{y}_M(k+P|k) \end{bmatrix}, \hat{y}_{P0}(k) = \begin{bmatrix} \hat{y}_0(k+1|k) \\ \vdots \\ \hat{y}_0(k+P|k) \end{bmatrix}$$

由于动态矩阵是包含不确定项的多面体空间, 因此得到的预测输出和控制增量也是一组曲线, 将标称动态矩阵得到的控制率 $\Delta \bar{u}_M$ 作用于实际过程, 即最优的控制率为

$$\Delta \bar{u}_M(k) = (\bar{A}^T Q \bar{A} + R)^{-1} \bar{A}^T Q [y_{OP}(k) - \hat{y}_{P0}] \quad (15)$$

而由包含不确定项的动态矩阵计算得到的预测输出和控制增量, 则用于计算在最优控制率下系统闭环的控制性能 J^*

$$J^* = \max \left\{ \|y_{OP}(k) - \hat{y}_{PM}(k)\|_Q^2 + \|\Delta u_M(k)\|_R^2 \right\} \quad (16)$$

此控制性能表征了在过程设计阶段, 在相同控制算法作用下, 过程参数的选取对闭环动态性能的影响。因此 J^* 作为连接稳态设计与动态控制性能的参数, 将在集成优化问题中作为目标函数的重要组

成部分。

3 设计与控制集成优化问题

气相聚乙烯反应装置的设计,以最优的稳态工况为优化对象,同时使得装置安装成本最低。安装成本由反应装置结构决定,考虑反应器的直径和高度。控制系统的设计是为了使过程在标称工作点附近具有良好的动态性能,同时使得因外界扰动带来的损失成本最低。因此,在过程设计与控制集成优化问题中,需要综合优化安装成本和控制不佳带来的损失成本,即在考虑过程扰动和参数不确定的情况下,设计反应装置、操作工况和控制器,保证操作过程在可行的范围内进行,且经济成本 $\text{CostFcn}(\eta)$ 最优。

$$\text{CostFcn}(\eta, \text{dis}) = \text{CC}(\eta) + \text{DynC}(\eta, \text{dis}) \quad (17)$$

其中, η 是需要被设计的过程参数,包括反应装置的直径(D),高度(H),操作工况的稳态操作点(x_{sp})。对于安装成本的计算采用文献[16]中的经验公式

$$\text{CC}(\eta) = 236.913((\pi D^2/4)^{0.553} H^{0.802}) \quad (18)$$

由于外界扰动带来的波动成本定义为

$$\text{DynC} = \gamma J^* \quad (19)$$

其中, γ 是比例系数。

综合过程稳定性约束、控制性能约束以及产品性能约束等条件,设计与控制集成优化问题定义如式(20)所示。

$$\begin{aligned} & \min \text{CF}(\eta, \text{dis}) \\ & \text{s.t.} \\ & \left\{ \begin{array}{l} \text{Process Model Equation} \\ \text{Model Predictive Controller} \\ \text{Stability constraints} \\ \eta_{\min} \leq \eta \leq \eta_{\max} \end{array} \right. \quad (20) \end{aligned}$$

在每次迭代过程中,过程参数 η 唯一确定一组系统动态模型,在此模型基础上建立高斯替代模型并预测含有不确定项的阶跃响应模型,继而求解控制优化问题(13)。之后,得到设计与控制的经济成本作为优化问题的目标函数。

4 实例分析

下面针对一个气相聚乙烯的反应装置,应用本文的优化方案进行设计与控制集成优化,并假设聚乙烯反应过程气相和固相均充分混合,并且仅使用一种催化剂且失活速率为零,反应器内的温度是均匀分布的,如图3虚线框中所示。反应物进料和催化剂从底部连续加入,聚合物产物以恒定速率从反

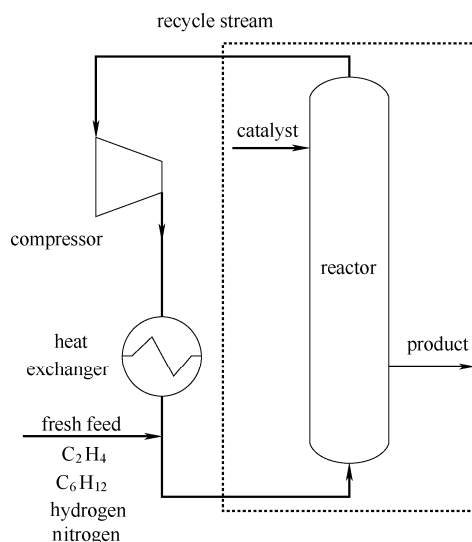


图3 气相聚乙烯反应装置

Fig.3 Gas-phase LLDPE production process

应器中排出。再循环物流含有未反应的气体,然后通过压缩机和热交换器与进料流结合,循环至反应器。

根据能量和质量守恒,反应过程可以用式(21)表示。 M_e 、 Y 和 T 分别代表乙烯浓度、催化剂的物质的量以及反应温度。 V_g 是反应器中气相反应物的体积,并假定是反应器体积的85%。在本文的设计与控制集成优化问题中,反应器的体积是需要被设计的过程参数。

$$\begin{aligned} \frac{dM_e}{dt} &= \frac{F_v(M_{e0} - M_e) - R_{Me}}{V_g} \\ \frac{dY}{dt} &= F_c - Y \frac{F_p}{B_w} \\ \frac{dT}{dt} &= \frac{H_0 - H_{top} + H_r - H_p}{C_{onp}} \end{aligned} \quad (21)$$

式中, F_v 、 F_c 和 F_p 分别表示单体进料速率、催化剂进料速率和产品的流出流量; H_0 、 H_{top} 、 H_r 、 H_p 分别为进料的焓、离开反应器的气体的焓、反应产生的热量以及离开反应器的聚合物的焓; R_{Me} 是乙烯在反应过程中的消耗速率。表1中给出了其他与反应相关的参数。

表1 反应装置过程参数

Table 1 Reactor parameters of CSTR model

Parameter	Value
C_{onp}	14059.5 cal·K ⁻¹
F_v	28000 L·s ⁻¹
B_w	70 t
M_{e0}	0.3 mol·L ⁻¹

Note: 1cal=4.1868J.

聚乙烯过程的设计与控制集成优化方法, 首先需要分析过程的稳态解。标准的计算稳态点算法, 每次只能得到一组解, 对于可能存在多个稳态解的情况, 需要尝试不同的初始值。这种试差的办法不能保证找到全部稳态解, 因此可能会错过具有更高转换率或者稳态性能的潜在稳态工作点。在集成优化过程中采用连续同伦延拓算法, 被证明可以保证得到每个装置参数下的所有稳态工作点^[30]。

如图4所示, 在确定催化剂进料流量之后, 可以发现与之对应的反应温度有4个, 考虑实际反应温度的约束, 即75~110℃(图中虚线部分), 仍然存在2个温度稳态操作点(2#和3#)。同样道理, 在催化剂进料流量处于5~6 kg·h⁻¹之间时, 会有无穷多个这样的多重稳态操作点存在。接下来就需要设计控制器, 对不同操作点的闭环动态性能进行测试, 继而综合比较过程设计与控制的成本目标。

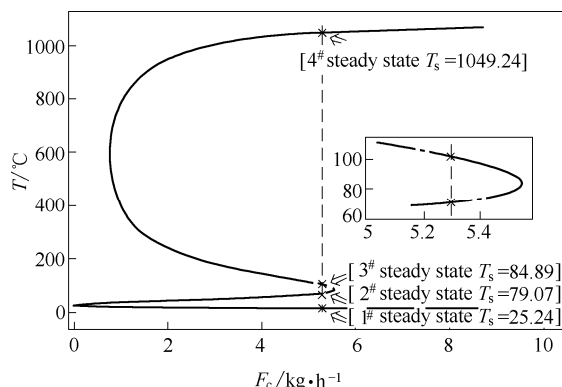


图4 聚乙烯反应多重稳态

Fig.4 Multiple steady states for polyethylene reactor

针对聚乙烯流化反应装置的设计与控制集成优化问题的数学描述如下

$$\min CF(V, Q, R, T_{set})$$

s.t.

$$\begin{cases} \hat{y}_T = \hat{\mu}_T + \xi^T \Psi_T^{-1} (T - I \hat{\mu}_T) \\ \hat{\mu}_T = \frac{\mathbf{1}^T \Psi_T^{-1} T}{\mathbf{1}^T \Psi_T \mathbf{1}} \\ \min J(k) = \|y_{OP}(k) - \hat{y}_{PM}(k)\|_Q^2 + \|\Delta u_M(k)\|_R^2 \\ \hat{y}_{PM}(k) = \hat{y}_{p0}(k) + A^T \Delta u_M(k) \\ \Delta u_M(k) = (A^T Q A + R)^{-1} A^T Q [y_{OP}(k) - y_{p0}] \\ 400\text{m}^3 \leq V \leq 600\text{m}^3 \\ 75^\circ\text{C} \leq T_{set} \leq 110^\circ\text{C} \end{cases} \quad (22)$$

该优化问题在 MATLAB 中采用序贯二次规划算法(SQP)求解。优化得到温度操作点在 $T_{sp}=88.99^\circ\text{C}$

以及反应塔体积为 645.89 m³ 时, 系统的稳态设计成本与动态性能综合的经济成本最优。McAuley 等^[9]基于对稳态性能的分析, 没有考虑控制性能的情况下给出了一组稳态操作条件。将 McAuley 给出的操作条件应用相同的控制方案, 在同样的扰动情况下, 对过程进行动态测试, 得到的结果如图5所示。

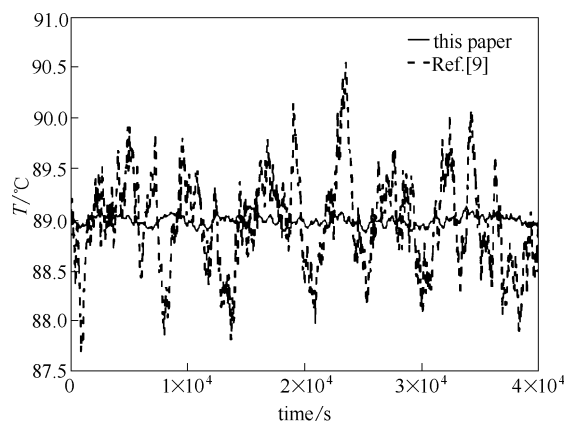


图5 两种设计方案动态特性的比较

Fig.5 Comparison of dynamic behavior of two closed-loop systems

通过图5系统的闭环动态特性可以看出, 即便采用相同的控制策略, 经过过程设计与控制集成优化得到的方案, 在扰动和不确定性存在的情况下, 具有更好的鲁棒性和动态特性。

5 结 论

给出了一种过程设计与运行控制集成优化的设计方法。引入的代理模型, 将 Kriging 高斯模型的预测方差与过程的阶跃响应模型结合, 由预测方差得到模型的不确定项。预测过程输出, 并构建含有不确定项的模型预测控制器。此外, 通过 MPC 控制性能目标, 量化稳态设计对操作性能的影响。由仿真实验表明, 该方法对聚乙烯反应过程设计和控制器设计非常有效。

符 号 说 明

- A —— 系统动态矩阵
- C_{omp} —— 转换因子
- dis —— 外界扰动
- θ_p —— 模型超参数向量

References

- [1] 周业丰. 持液气固流化床中多温区的构建, 调控及其稳定性研究 [D]. 杭州: 浙江大学, 2014.
- ZHOU Y F. Realization, control and stability analysis of multiple

- temperature zones in the liquid-containing gas-solid fluidized bed reactor[D]: Hangzhou: Zhejiang University, 2014.
- [2] MCAULEY K, MACDONALD D, MCLELLAN P. Effects of operating conditions on stability of gas-phase polyethylene reactors[J]. *AIChE Journal*, 1995, **41**(4): 868-879.
- [3] YATES J G, LETTIERI P. Fluidized-Bed Reactors: Processes and Operating Conditions[M]. Berlin: Springer, 2016.
- [4] SHAMIRI A, HUSSAIN M, MJALLI F S, *et al.* Experimental and modeling analysis of propylene polymerization in a pilot-scale fluidized bed reactor[J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2014, **53**(21): 8694-8705.
- [5] AZMI A, AZIZ N. Low density polyethylene tubular reactor modeling: overview of the model developments and future directions[J]. *International Journal of Applied Engineering Research*, 2015, **11**: 9906-9913.
- [6] SALAU N P, NEUMANN G A, TRIERWEILER J O, *et al.* Dynamic behavior and control in an industrial fluidized-bed polymerization reactor[J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2008, **47**(16): 6058-6069.
- [7] PLADIS P, ALEXOPOULOS A H, KIPARISIDES C. Mathematical modeling and simulation of vinylidene fluoride emulsion polymerization[J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2014, **53**(18): 7352-7364.
- [8] GHASEM N M. Chaotic behavior of industrial fluidized-bed reactors for polyethylene production[J]. *Chemical Engineering & Technology*, 2001, **24**(3): 297-303.
- [9] XIE T, MCAULEY K B, HSU J C C, *et al.* Gas phase ethylene polymerization: production processes, polymer properties, and reactor modeling[J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 1994, **33**(3): 449-479.
- [10] MCAULEY K B, TALBO J P, HARRIS T J. A comparison of two-phase and well-mixed models for fluidized-bed polyethylene reactors[J]. *Chemical Engineering Science*, 1994, **49**(13): 2035-2045.
- [11] ALIZADEH M, MOSTOUFI N, POURMAHDIAN S, *et al.* Modeling of fluidized bed reactor of ethylene polymerization[J]. *Chemical Engineering Journal*, 2004, **97**(1): 27-35.
- [12] HOSEN M A, HUSSAIN M A, MJALLI F S. Control of polystyrene batch reactors using neural network based model predictive control (NNMPC): an experimental investigation[J]. *Control Engineering Practice*, 2011, **19**(5): 454-467.
- [13] RAY W H, VILLLA C M. Nonlinear dynamics found in polymerization processes — a review[J]. *Chemical Engineering Science*, 2000, **55**(2): 275-290.
- [14] GHASEM N M. Dynamic behavior of industrial gas phase fluidized bed polyethylene reactors under PI control[J]. *Chemical Engineering & Technology*, 2000, **23**(2): 133-140.
- [15] SHAMIRI A, AZLAN HUSSAIN M, SABRU MJALLI F, *et al.* Dynamics and predictive control of gas phase propylene polymerization in fluidized bed reactors[J]. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 2013, **21**(9): 1015-1029.
- [16] CORRIOU J-P. Stability Analysis[M]//Process Control. Berlin: Springer, 2018: 117-42.
- [17] RICARDEZ SANDOVAL L A, BUDMAN H M, DOUGLAS P L. Integration of design and control for chemical processes: a review of the literature and some recent results[J]. *Annual Reviews in Control*, 2009, **33**(2): 158-171.
- [18] YUAN Z, CHEN B, ZHAO J. An overview on controllability analysis of chemical processes[J]. *AIChE Journal*, 2011, **57**(5): 1185-1201.
- [19] SAKIZLIS V, PERKINS J D, PISTIKOPOULOS E N. Recent advances in optimization-based simultaneous process and control design[J]. *Computers & Chemical Engineering*, 2004, **28**(10): 2069-2086.
- [20] SHARIFZADEH M. Integration of process design and control: a review[J]. *Chemical Engineering Research and Design*, 2013, **91**(12): 2515-2549.
- [21] LUYBEN M L, FLOUDAS C A. Analyzing the interaction of design and control (I): A multiobjective framework and application to binary distillation synthesis[J]. *Computers & Chemical Engineering*, 1994, **18**(10): 933-969.
- [22] LUYBEN M L, FLOUDAS C A. Analyzing the interaction of design and control (II): Reactor-separator-recycle system[J]. *Computers & Chemical Engineering*, 1994, **18**(10): 971-993.
- [23] KOOKOS I K, PERKINS J D. An algorithm for simultaneous process design and control[J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2001, **40**(19): 4079-4088.
- [24] KOOKOS I K, PERKINS J D. An algorithmic method for the selection of multivariable process control structures[J]. *Journal of Process Control*, 2002, **12**(1): 85-99.
- [25] SAKIZLIS V, PERKINS J D, PISTIKOPOULOS E N. Parametric controllers in simultaneous process and control design optimization[J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2003, **42**(20): 4545-4563.
- [26] SHOKRY A, ESPUNA A. Sequential dynamic optimization of complex nonlinear processes based on kriging surrogate models[J]. *Procedia Technology*, 2014, **15**: 376-387.
- [27] YU M, MILLER D C, BIEGLER L T. Dynamic reduced order models for simulating bubbling fluidized bed adsorbers[J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2015, **54**(27): 6959-6974.
- [28] AUDET C, DENNI J, MOORE D, *et al.* A surrogate-model-based method for constrained optimization[C]//8th Symposium on Multidisciplinary Analysis and Optimization, 2000: 4891.
- [29] SIMPSON T W, MAUERY T M, KORTE J J, *et al.* Kriging models for global approximation in simulation-based multidisciplinary design optimization[J]. *AIAA Journal*, 2001, **39**(12): 2233-2241.
- [30] GRITTON K S, SEADER J D, LIN W J. Global homotopy continuation procedures for seeking all roots of a nonlinear equation[J]. *Computers & Chemical Engineering*, 2001, **25**(7): 1003-1019.