

研究论文

带路径约束的聚烯烃牌号切换操作优化方法

费正顺, 胡 斌, 叶鲁彬, 郑平友, 梁 军

(浙江大学工业控制研究所, 工业控制技术国家重点实验室, 浙江 杭州 310027)

摘要: 产品多样化需求使得聚烯烃生产过程中经常需要进行牌号切换操作。以往关于牌号切换优化的研究大多只关心切换过程结束后聚合物质量指标是否达到目标牌号值, 对过渡过程中质量指标及状态变量的波动情况缺少关注, 而过程的波动会影响到最终产物的质量性质和操作平稳性。为此, 本文以聚乙烯气相流化床反应器为对象, 通过在牌号切换优化命题中加入关于熔融指数等的路径约束, 防止过渡过程中的状态变量剧烈波动影响聚合物树脂质量。为求解此类带路径约束的动态优化问题, 对常规的控制变量参数化方法进行了改进, 通过求解微分代数方程 (DAE 方程) 将路径约束转化为控制变量约束。仿真结果表明, 加入路径约束可以有效避免牌号切换中变量的剧烈波动, 增强过程平稳性。

关键词: 聚合反应; 牌号切换; 控制变量参数化; 路径约束

中图分类号: TP 277

文献标识码: A

文章编号: 0438-1157 (2010) 04-0893-08

Optimal grade transition of polymerization process with path constraints

FEI Zhengshun, HU Bin, YE Lubin, ZHENG Pingyou, LIANG Jun

(State Key Laboratory of Industrial Control Technology, Institute of Industrial Control,
Zhejiang University, Hangzhou 310027, Zhejiang, China)

Abstract: To meet a demand for various polymer products, grade transitions are frequently required in the polymerization process. The recent studies for grade transition optimization mostly focused on adjusting the quality specifications to target values. However, the variations on quality specifications and state variables during the grade transition will greatly affect the operation stability of the system and the product qualities. In this study, the authors proposed a simple and effective approach to alleviate the fluctuations during grade transition by adding path constraints to the optimization structure of grade transition in a gas-phase fluidized bed reactor for polyethylene. The path constraints were transformed to control variable constraints by solving the differential algebraic equation, which significantly improves the traditional control vector parameterization method to solve dynamic optimization problems with path constraints. The simulation results confirm the effectiveness of the proposed approach to enhance the operation stability.

Key words: polymerization; grade transition; control vector parameterization; path constraints

2009-10-21 收到初稿, 2009-12-03 收到修改稿。

联系人: 梁军。第一作者: 费正顺 (1984—), 男, 博士研究生。

基金项目: 国家自然科学基金项目 (60574047); 国家高技术研究发展计划项目 (2007AA04Z168, 2009AA04Z154); 教育部博士点基金项目 (20050335018)。

Received date: 2009-10-21.

Corresponding author: Prof. LIANG Jun, jliang @ iipc. zju. edu. cn

Foundation item: supported by the National Natural Science Foundation of China (60574047), the High-tech Research and Development Program of China (2007AA04Z168, 2009AA04Z154) and the Doctorate Foundation of the State Education Ministry of China (20050335018).

引 言

聚烯烃树脂通常在聚合反应器中进行生产,不同性状和用途的树脂产品以不同的牌号进行区分。在连续生产过程中,不同牌号的聚烯烃树脂的生产一般通过改变反应器的操作条件实现,以达到在同一装置中生产不同牌号的聚烯烃树脂的目的。然而,从一种牌号的生到另一种牌号的生中间往往经历一个产生大量不合格产品过渡料的过程(称为牌号切换过渡过程),因此在聚合反应的牌号切换过程中尽可能减少过渡时间和过渡料数量显得相当重要。

聚烯烃树脂的牌号性能通常用熔融指数(MI)和密度来区分。实际生产过程中,为了尽量减少牌号切换的过渡时间和过渡料数量通常采用“过调”的操作方式,通过控制变量的过调使熔融指数等质量指标很快达到目标牌号值^[1]。这样的操作常常会造成状态变量波动过于剧烈,操作平稳性差,进而影响到最终的产品质量,甚至于产生安全问题。为了找到牌号切换最合适的操作方式,很多学者做了一系列卓有成效的工作。McAuley等^[2]最先对牌号切换问题进行了系统性的研究,把牌号切换过程归结为与时间相关的动态优化问题,得到了气相聚乙烯反应器中3种牌号产品序列的最优轨迹并建立了MI和密度的质量推断模型。Debling等^[3]运用动态仿真软件“POLYRED”对不同的牌号切换策略进行了仿真研究。Takeda等^[4]采用带状态约束和不带状态约束的两种目标函数形式对多阶段聚合反应器的牌号切换进行了优化。Wang等^[5]综合了离线动态优化和非线性模型预测控制,通过求解常微分方程和灵敏度方程对浆液反应器进行了优化。Yi等^[6]以聚合反应器为核心给出了全流程角度高密度聚乙烯(HDPE)的牌号切换优化策略。Chatzidoukas等^[7]考虑到流化床反应器中控制器结构对过程的可操作性及产品质量的影响,运用混合整数动态优化方法对闭环控制器优化配置和牌号切换操作方式进行了综合优化。Bonvin等^[8-9]针对模型失配和过程扰动的影响,在流化床聚合反应器中采用最优性条件校正的方式对常规的动态优化结果按过程时段和切换时间分解后同优化必要条件进行关联提高了动态优化结果的可靠性。Biegler等^[10]研究了大规模高抗冲聚苯乙烯生产过程的动态最优牌号切换问题,离线计算得到了在不同开环不稳定

操作点之间的最优时变操作轨迹。

上述关于牌号切换问题的研究大多仅限于关心过渡过程结束后质量指标能否达到目标值,而对整个切换过程中质量指标的波动情况以及由此引起的操作难度缺少关注。一般地,聚合反应器中反应生成的聚烯烃树脂性能主要由累积熔融指数等累积性质决定,但瞬时熔融指数等瞬时性质的过大波动会产生大量不符合目标要求的树脂^[1]。为了避免过渡过程中瞬时熔融指数的剧烈波动,本文在聚合反应牌号切换优化命题中加入对瞬时熔融指数等状态变量的路径约束,以保证聚合物质量指标在整个过渡过程中只在规定的范围内变化,从而不仅使切换结束后聚烯烃树脂的性质符合目标要求,而且过渡过程的操作更加平稳。本文以气相流化床聚乙烯生产过程为对象,在过渡过程动态模型的基础上给出了聚乙烯牌号切换过程中带路径约束和不带路径约束的两种优化命题。针对常规的控制变量参数化方法较难处理带状态变量路径约束的动态优化问题,对控制变量参数化方法进行了改进,通过对DAE方程的求解把状态变量的路径约束转化为控制变量的约束。运用改进的控制变量参数化方法对优化命题进行了求解,给出了仿真结果。最后对最优牌号切换策略在线应用问题作了简单介绍。

1 牌号切换动态优化模型

1.1 气相流化床聚乙烯生产过程动态模型

采用Ziegler-Natta催化剂的气相流化床聚乙烯反应流程如图1所示^[11],乙烯、氢气、丁烯、催化剂等持续进入反应器中,在流态化条件下进行聚合反应。通常,在气相连续聚合过程中,当催化剂体系确定之后,瞬时熔融指数(MI_i)和密度(D_i)由聚合温度、氢气/乙烯比、丁烯/乙烯比、停留时间等反应条件和气相组分决定,而累积熔融指数(MI_c)和密度(D_c)则主要取决于瞬时熔融指数和密度的变化^[12]。对于该气相流化床聚乙烯生产过程,本文采用如下推断关系模型和动态关系^[11,13]

$$MI_i = \exp \left\{ k_4 \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) \right\} \left\{ k_1 + k_2 \frac{[H_2]}{[M_1]} + k_3 \frac{[M_2]}{[M_1]} \right\}^{k_5} \quad (1)$$

$$D_i = p_1 + p_2 \ln(MI_i) - \left\{ p_3 \frac{[M_2]}{[M_1]} \right\}^{p_4} \quad (2)$$

$$\frac{dMI_c^{-1/k_5}}{dt} = \frac{1}{\tau} MI_i^{-1/k_5} - \frac{1}{\tau} MI_c^{-1/k_5} \quad (3)$$

$$d \frac{1}{D_c} = \frac{1}{\tau} \frac{1}{D_i} - \frac{1}{\tau} \frac{1}{D_c} \quad (4)$$

式中 T 为反应器温度。 $[H_2]$ 、 $[M_1]$ 、 $[M_2]$ 分别为反应器中的氢气浓度、乙烯浓度和丁烯浓度。 $k_i (i=1, 2, \dots, 5)$, $p_j (j=1, 2, \dots, 4)$ 均为待定系数, 与聚合反应动力学特性和牌号有关, 需依据具体生产工艺和操作数据计算得到。 τ 为聚合物在反应器中的停留时间。

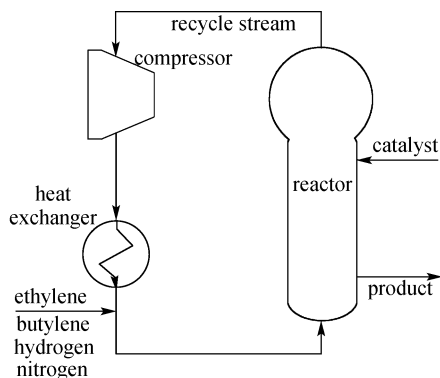


图1 气相聚乙烯反应流程示意图

Fig. 1 Diagram of gas-phase polyethylene reactor

1.2 优化命题构造

在聚乙烯牌号切换过程中, 状态变量为 MI_c 、 D_c 、 MI_i 、 D_i 等, 控制变量为温度、氢气/乙烯比、丁烯/乙烯比等。聚乙烯牌号切换过程优化的目的是在保证过渡过程结束时聚合物质量指标如熔融指数及密度等能够稳定到目标牌号值的同时, 使切换过程损失最少, 而损失最少主要体现为过渡时间尽可能短以及过渡料量尽可能少。为此, 采用熔融指数和密度与目标值的相对偏差平方加权和对时间积分的目标函数形式, 通过构造优化命题得到各操作变量在过渡过程中的动态最优变化轨迹, 实现牌号切换过程的最优操作。

$$J = \int_{t_0}^{t_f} \left\{ \omega_1 \left(\frac{MI_c(t) - MI_i}{MI_i} \right)^2 + \omega_2 \left(\frac{D_c(t) - D_i}{D_i} \right)^2 + \omega_3 \left(\frac{MI_i(t) - MI_i}{MI_i} \right)^2 + \omega_4 \left(\frac{D_i(t) - D_i}{D_i} \right)^2 \right\} dt \quad (5)$$

其中, MI_i 、 D_i 为目标牌号的熔融指数和密度, $\omega_1 \sim \omega_4$ 为权重系数, t_0 为牌号切换操作开始时刻, t_f 为过渡过程结束时刻。这样, 目标函数中除了考虑累积熔融指数和密度与目标牌号熔融指数和密度的偏差外, 还把瞬时熔融指数和密度同目标之间的偏差也考虑进去, 以避免在切换过程中瞬时值过分偏离目标值。另外, 权重系数的选取一般基于如下考虑: 根据过程机理, 累积性质直接反应了最终聚

合物的质量, 比瞬时性质更为重要, 因而通常 ω_1 、 ω_2 的取值要比 ω_3 、 ω_4 大。

在实际生产过程中, 由于装置的调节范围限制以及出于过程安全的考虑, 操作变量通常只允许在一定约束范围内变化, 因此得到聚乙烯牌号切换优化命题 (命题一):

$$\begin{aligned} \min J &= \int_{t_0}^{t_f} \left\{ \omega_1 \left(\frac{MI_c(t) - MI_i}{MI_i} \right)^2 + \omega_2 \left(\frac{D_c(t) - D_i}{D_i} \right)^2 + \omega_3 \left(\frac{MI_i(t) - MI_i}{MI_i} \right)^2 + \omega_4 \left(\frac{D_i(t) - D_i}{D_i} \right)^2 \right\} dt \\ \text{s. t. } &\begin{cases} MI_i = \exp \left\{ k_4 \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) \right\} \left\{ k_1 + k_2 \frac{[H_2]}{[M_1]} + k_3 \frac{[M_2]}{[M_1]} \right\}^{k_5} \\ D_i = p_1 + p_2 \ln(MI_i) - \left\{ p_3 \frac{[M_2]}{[M_1]} \right\}^{p_4} \\ \frac{dMI_c^{-1/k_5}}{dt} = \frac{1}{\tau} MI_i^{-1/k_5} - \frac{1}{\tau} MI_c^{-1/k_5} \\ \frac{d}{dt} \frac{1}{D_c} = \frac{1}{\tau} \frac{1}{D_i} - \frac{1}{\tau} \frac{1}{D_c} \\ T_{\min} \leq T \leq T_{\max} \\ \left(\frac{[H_2]}{[M_1]} \right)_{\min} \leq \frac{[H_2]}{[M_1]} \leq \left(\frac{[H_2]}{[M_1]} \right)_{\max} \\ \left(\frac{[M_2]}{[M_1]} \right)_{\min} \leq \frac{[M_2]}{[M_1]} \leq \left(\frac{[M_2]}{[M_1]} \right)_{\max} \end{cases} \end{aligned}$$

命题一是牌号切换优化研究中经常采用的优化命题形式^[2,7-8]。由于牌号切换优化的目标是在追求过渡时间最少及过渡料最少, 优化得到的各变量的动态变化轨迹和工厂中实际的操作方式类似表现出“过调”特性, 很多状态变量甚至会出现剧烈波动。虽然采用在式 (5) 表示的目标函数中添加有关瞬时熔融指数和瞬时密度的偏差罚项的方式可以在一定程度上减小瞬时性质等状态变量的波动, 但这种方法抑制波动的效果受 ω_1 、 ω_2 、 ω_3 、 ω_4 等权重选取的影响, 通常为了到达所需要的优化效果需要尝试多组权重值。当对切换过程中的某些状态变量的变化范围有严格的要求时, 会出现权值调整难以满足要求的情况。为解决此类问题, 本文在优化命题的约束中增加关于状态变量的路径约束, 以保证相应的状态变量在牌号切换过程中只在允许的范围变化。

瞬时熔融指数对累积性质影响甚大, 为降低聚合物质量波动幅度应对瞬时熔融指数波动进行一定的限制。假定在切换过程中瞬时熔融指数不能超出上限 $MI^*(t)$, 为此增加路径约束 $MI_i(t) \leq MI^*(t)$, 得到如下形式的优化命题 (命题二):

$$\min J = \int_{t_0}^{t_f} \left\{ \omega_1 \left(\frac{MI_c(t) - MI_i}{MI_i} \right)^2 + \omega_2 \left(\frac{D_c(t) - D_i}{D_i} \right)^2 + \right.$$

$$\begin{aligned}
 & \omega_3 \left(\frac{MI_i(t) - MI_i}{MI_i} \right)^2 + \omega_4 \left(\frac{D_i(t) - D_i}{D_i} \right)^2 \Big\} dt \\
 \text{s. t. } & \begin{cases} MI_i = \exp \left\{ k_1 \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) \right\} \left\{ k_1 + k_2 \frac{[H_2]}{[M_1]} + k_3 \frac{[M_2]}{[M_1]} \right\}^{k_5} \\ D_i = p_1 + p_2 \ln(MI_i) - \left\{ p_3 \frac{[M_2]}{[M_1]} \right\}^{p_4} \\ \frac{dMI_i^{-1/k_5}}{dt} = \frac{1}{\tau} MI_i^{-1/k_5} - \frac{1}{\tau} MI_c^{-1/k_5} \\ \frac{d}{dt} \frac{1}{D_c} = \frac{1}{\tau} \frac{1}{D_i} - \frac{1}{\tau} \frac{1}{D_c} \\ T_{\min} \leq T \leq T_{\max} \\ \left(\frac{[H_2]}{[M_1]} \right)_{\min} \leq \frac{[H_2]}{[M_1]} \leq \left(\frac{[H_2]}{[M_1]} \right)_{\max} \\ \left(\frac{[M_2]}{[M_1]} \right)_{\min} \leq \frac{[M_2]}{[M_1]} \leq \left(\frac{[M_2]}{[M_1]} \right)_{\max} \\ MI_i(t) \leq MI^*(t) \end{cases}
 \end{aligned}$$

2 控制变量参数化方法及改进

控制变量参数化是一种常用的求解动态优化的方法,它通过一定的离散化策略对控制变量进行参数化处理后把动态优化问题转化为非线性规划(NLP)问题,然后采用常规的NLP求解算法(如SQP、内点算法)求解^[14-15]。

考虑如下一般形式的动态优化问题

$$\min \phi(z(t_f), y(t_f), u(t_f)) \quad (6)$$

$$\text{s. t. } \frac{dz(t)}{dt} = f(z(t), y(t), u(t)) \quad (7)$$

$$z(t_0) = z_0 \quad (8)$$

$$g(z(t), y(t), u(t)) = 0 \quad (9)$$

$$h(z(t), y(t), u(t)) \leq 0 \quad (10)$$

$$u_{\min} \leq u(t) \leq u_{\max} \quad (11)$$

其中, $u(t)$ 、 $z(t)$ 、 $y(t)$ 分别表示控制变量、微分状态变量及代数状态变量, t_0 为过程开始时刻, t_f 为过程结束时刻, z_0 为过程开始时刻 t_0 时的初始条件。式(7)及式(9)为描述过程系统特性的微分代数方程(DAE方程),而式(10)和式(11)分别表示不等式路径约束和控制变量的调节范围约束。

控制变量参数化的实质就是采用参数化的方法把原来在时域上连续并且难以描述的控制变量轨迹用容易描述的分段函数(如 $[t_0, t_f]$ 上基函数的线性组合)近似,从而把原来的函数优化问题转化为参数优化问题^[16]

$$u(t) = \sum_{j=1}^K u_j \phi_j(t) \quad (12)$$

其中, $\phi_j(t)$ 为离散化所采用的第 j 个基函数, K

表示基函数个数。一旦得到了相应的NLP,在NLP求解的每次迭代中都需要运用龙格-库塔法求解DAE方程。在不含状态变量路径约束的情况下,其算法流程可用图2表示。

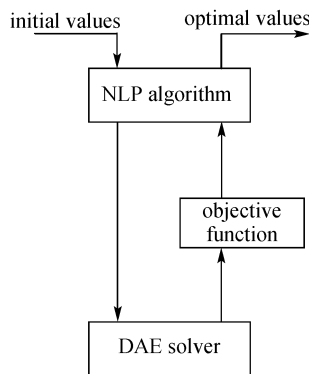


图2 控制变量参数化方法流程图

Fig. 2 Diagram of control vector parameterization

由于状态变量没有直接包含在非线性规划中,控制变量参数化方法一般不能直接处理状态变量带约束的问题。对于带状态变量路径的问题,较常用的处理方法是在目标函数中增加一项状态变量在整个时域内约束违反的惩罚项^[15,17]。例如,对式(10)所表示的路径约束形式,采用如下的惩罚项

$$\int_{t_0}^{t_f} [\max(0, h(z(t), y(t), u(t)))]^2 dt \quad (13)$$

可见,当约束不起作用,即优化变量在路径约束域内取值时,惩罚项函数值及其关于优化变量的梯度均为零,不能够提供有关当前点和可行域边界间接程度的有用信息。这样在优化迭代或线性搜索中就可能会出现优化变量在可行和不可行取值之间来回振荡的情况。这样的方法改变了目标函数的特性,会对非线性规划的求解结果带来不良影响。为此,本文对常规的控制变量参数化方法作了改进,使之能够较为方便地处理带不等式路径约束的动态优化问题,主要思路是,当命题中含有状态变量的路径约束时,利用状态变量与控制变量间的关联关系,通过求解DAE方程把状态变量的约束转化为控制变量的约束。改进的算法流程如图3所示,虚线框内部分为路径约束处理环节。

另外,为将式(5)的时域积分形式目标函数转换为式(6)的状态终值函数形式,引入辅助变量 $\Phi(t)$ 使得

$$\frac{d\Phi(t)}{dt} = \omega_1 \left(\frac{MI_c(t) - MI_i}{MI_i} \right)^2 + \omega_2 \left(\frac{D_c(t) - D_i}{D_i} \right)^2 +$$

$$\omega_3 \left(\frac{MI_i(t) - MI_i}{MI_i} \right)^2 + \omega_1 \left(\frac{D_i(t) - D_i}{D_i} \right)^2 \quad (14)$$

$\Phi(t_0)=0$ 。这样,在原来的 DAE 方程中增加一个初始值为 0 的微分方程将命题二的目标函数转化成终值形式 $J=\Phi(t_f)$ 。

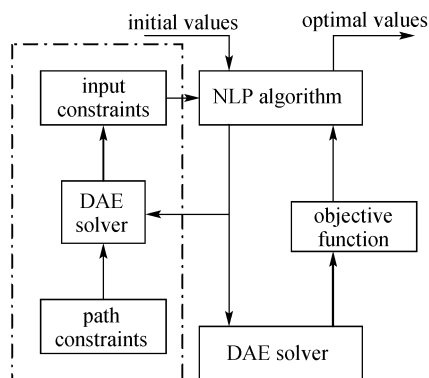


图3 改进的控制变量参数化方法流程图

Fig. 3 Diagram of improved control vector parameterization

3 求解及结果分析

本文考虑了聚乙烯连续生产过程中多种虚拟牌号之间切换的操作,表1为聚乙烯树脂4种不同牌号的质量特性。首先分析牌号A到牌号B的最优切换问题。把聚乙烯产品从一种牌号切换到另一种牌号的操作优化问题描述成一动态优化问题,并且运用前面所提的控制变量参数化方法对不带路径约束(命题一)和带路径约束(命题二)两种优化命题都进行了求解,并对两组结果进行了比较。

表1 聚乙烯牌号质量指标

Table 1 Quality properties of four grades

Grade	$MI/g \cdot (10 \text{ min})^{-1}$	Density/ $g \cdot \text{cm}^{-3}$
A	2	0.9197
B	4	0.9310
C	3	0.9220
D	5	0.9340

不含路径约束时,聚乙烯由牌号A切换到牌号B的操作过程中各个变量的动态优化轨迹如图4中虚线所示。假定在 $t=60 \text{ min}$ 时,开始牌号切换操作。聚乙烯牌号A切换到牌号B过程中,熔融指数 MI 从2上升到4,而密度 D 从0.9197上升到0.9310。为了使 MI 上升需要增大氢气/乙烯比,而减小丁烯/乙烯比可以增大聚乙烯密度。从图中可以看出,氢气/乙烯比从初始稳态值0.1615

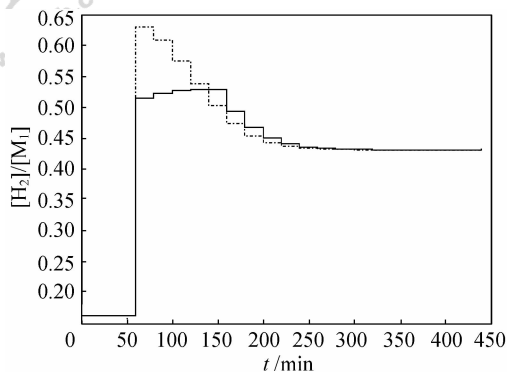
增大到过渡过程结束时的0.44;丁烯/乙烯比由原来的0.3635下降到切换终止后的稳态0.3551。反应器温度在切换过程中基本保持不变,维持在初始稳态值360 K附近。

由于在聚乙烯的牌号切换过程中要求过渡时间尽可能短,操作变量氢气/乙烯比和丁烯/乙烯比在过渡过程中均存在“过调”现象。图中显示,氢气/乙烯比并不是直接就过渡到牌号B的稳态值0.44上,而是从牌号A的稳态值0.1615先上升到0.63,然后再慢慢减小直至达到目标牌号的稳态值。同样丁烯/乙烯比先从初始值下降到0.3310,然后再逐渐上升到目标牌号的稳态值0.3551。正是因为存在这种过调操作,瞬时熔融指数在过渡过程未达到稳定之前都超出目标牌号的质量指标值很多。但当过渡过程结束时,瞬时熔融指数和瞬时密度同各自相应的累积值大小相等,都稳定在目标牌号B的质量指标值上。

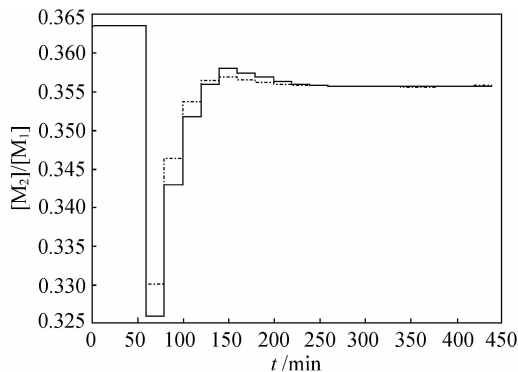
为保证最终聚烯烃产物的性能,瞬时熔融指数的变化一般不能太过剧烈。无路径约束的情况下不能够有效避免瞬时熔融指数等指标过分偏离目标值,为此在优化命题中加入路径约束 $MI_i(t) \leq 5$ 构造命题二,并对牌号A切换到牌号B的过程重新进行优化,得到优化变化轨迹如图4实线所示。

同不含路径约束时类似,累积熔融指数及密度、瞬时熔融指数及密度在过渡过程结束后都能稳定在目标牌号要求值上。由于增加了对瞬时熔融指数的路径约束,在整个过渡过程中瞬时熔融指数都没有超出上限值5,在切换过程中变化更为柔和。与之相对应,氢气/乙烯比和丁烯/乙烯比也做出了相应调整,表现为更加平稳。而受瞬时熔融指数路径约束影响,切换开始时的“过调”操作受到了一定的限制,累积熔融指数和瞬时熔融指数到达目标牌号值的时间有所延长,即过渡时间变大了。命题中只对熔融指数进行了路径约束,过渡过程中密度的变化情况跟不含路径约束时几乎完全一样。

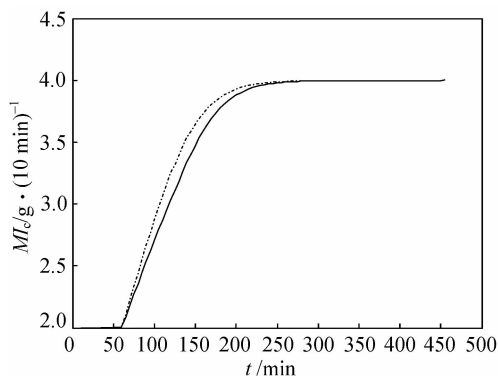
然后,考虑牌号A→牌号B→牌号C→牌号D的多种牌号切换问题。限于篇幅,这里只给出了4种牌号依次切换时累积熔融指数和瞬时熔融指数的优化轨迹,如图5所示。其中牌号A→牌号B过程中加入路径约束 $MI_i(t) \leq 5$,牌号B→牌号C过程中加入约束 $MI_i(t) \geq 2$,而牌号C→牌号D中路径约束为 $MI_i(t) \leq 6.5$ 。从图中可看出,在各种牌号切换过程中,通过引入路径约束均能有效抑制



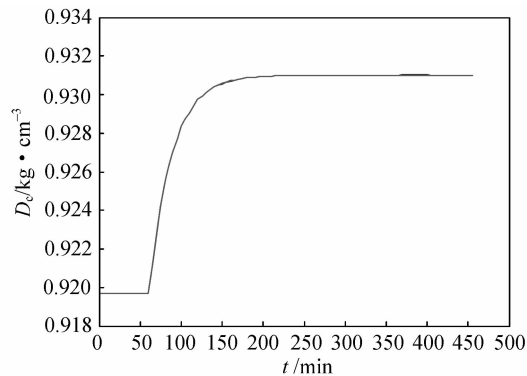
(a) concentration ratio of hydrogen to ethylene



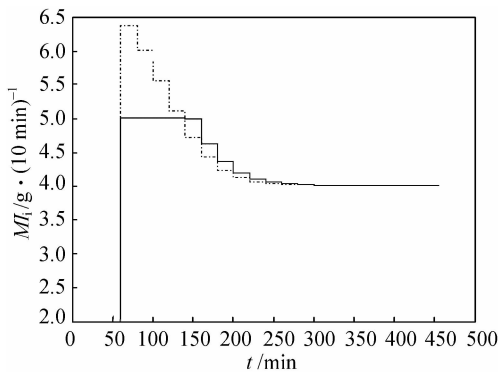
(b) concentration ratio of butylenes to ethylene



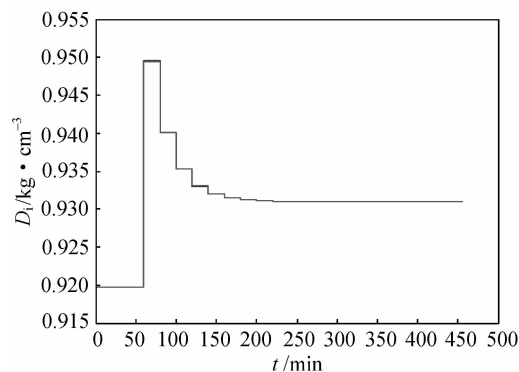
(c) cumulative melt index



(d) cumulative density



(e) instantaneous melt index



(f) instantaneous density

图 4 牌号 A 到牌号 B 过渡过程中各变量优化轨迹

Fig. 4 Optimal profiles during grade transition from A to B

····· without path constraints; — with path constraints

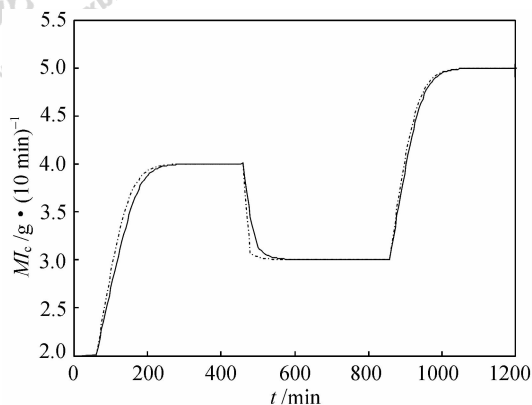
瞬时熔融指数的过大波动,说明本文的方法和结果对不同牌号之间的切换均具有很强的适用性。

4 牌号切换操作优化的现场应用

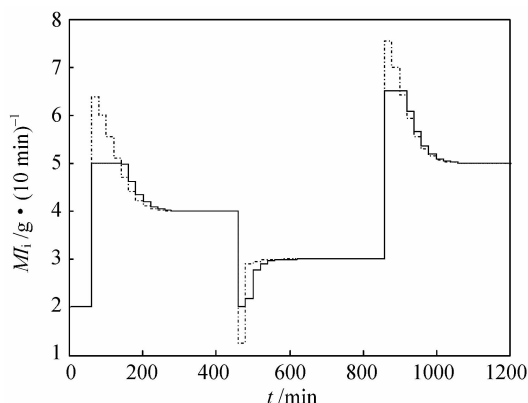
实现聚乙烯牌号切换操作优化的在线实施至少要解决 3 方面的问题: (1) 长时间持续应用时推断模型的在线自校正能力; (2) 现场实施的硬件平台搭建和与 DCS 的数据交换链路; (3) 牌号最优切换策略的软件实现。其中,第一个问题已经在作者

的前期研究中得到了很好的解决^[18],所提出的基于块式递推限定记忆思想的模型自适应算法可以应用于推断模型的更新。下面简单讨论后面两个问题。

聚乙烯牌号切换操作优化的工业现场实施可以通过如下设计的计算机监控系统平台实现,该系统采用 4 层体系结构,最底层为常规控制层(通常为 DCS),第二层是数据层(主要包括实时数据库),第三层是最优牌号切换计算与控制层,建模、模型



(a) cumulative melt index



(b) instantaneous melt index

图5 四种牌号依次切换质量变量优化轨迹

Fig. 5 Optimal profiles during transitions between four grades

..... without path constraints; — with path constraints

自校正、优化计算、最优控制等应用软件在这一层运行,第四层是用户界面层,总体系统结构如图6所示。软件实现中,除了上述建模、模型自校正、优化计算、最优控制等应用软件外,尚需要进行实时数据库的生成和管理、人机界面的设计与交互、实时数据库与DCS接口、实时数据库与建模/优化应用软件的接口等支撑软件的集成。以数据交换与接口功能为例,如图7所示。

另外,式(1)、式(2)推断模型中的模型参数 $k_i(i=1, 2, \dots, 5)$ 和 $p_j(j=1, 2, \dots, 4)$ 需要用实际的生产数据拟合确定。拟合所用数据从监控系统实时数据库中获取,以数据窗口形式截取一定长度数据,并且采用最小二乘法进行参数拟合。在牌号切换的过程中一般都会涉及到多个稳态,这就需要对模型参数进行更新。在实际应用中为减少计算负担,通过设定一个阈值,当模型预测误差超

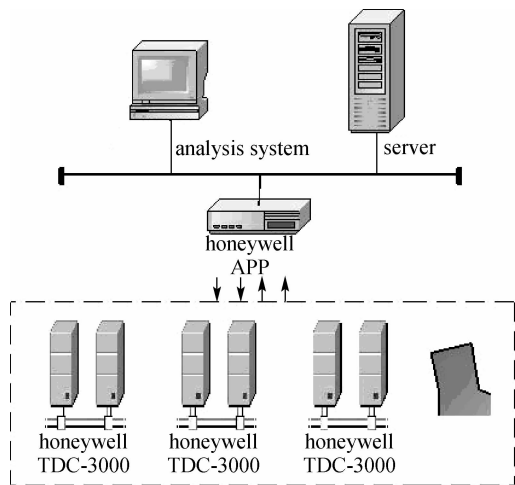


图6 聚乙烯装置计算机集成监控系统结构图

Fig. 6 Structure of computer integrated monitoring system for polyethylene reactor

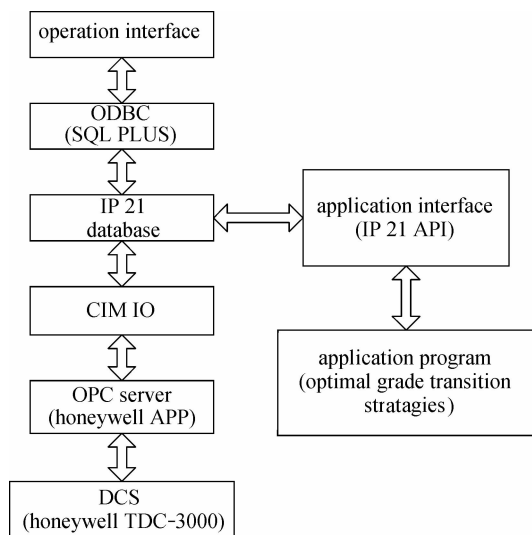


图7 数据交换与接口设计图

Fig. 7 Configuration of process data exchange and database interface

出了这个阈值时才启动参数更新环节,对模型参数重新进行拟合。

5 结论

本文以气相流化床反应器为对象,研究了聚乙烯连续生产过程中的牌号切换的优化问题。为有效避免熔融指数等质量指标在过渡过程中的剧烈波动,构造了带状态变量路径约束的动态优化命题,并且针对常规控制变量参数化方法难以处理含路径约束的动态优化问题,对控制变量参数化方法进行了改进,通过DAE方程的求解把对状态变量路径约束转化为对控制变量约束。然后采用改进的控制

变量参数化方法对优化命题进行求解,得到了聚乙烯多种牌号切换过程中的各变量的最优操作轨迹。结果表明,通过增加路径约束可以较为有效地防止熔融指数等质量指标在牌号切换过程中的波动,虽会使过渡时间稍微加长,但可以让质量指标波动更小、切换过程更加平稳。

符 号 说 明

D_c ——累积密度, $g \cdot cm^{-3}$

D_i ——瞬时密度, $g \cdot cm^{-3}$

$[H_2]$ ——反应器中氢气浓度, $mol \cdot m^{-3}$

$[M_1]$ ——反应器中乙烯浓度, $mol \cdot m^{-3}$

$[M_2]$ ——反应器中丁烯浓度, $mol \cdot m^{-3}$

MI_c ——累积熔融指数, $g \cdot (10 \text{ min})^{-1}$

MI_i ——瞬时熔融指数, $g \cdot (10 \text{ min})^{-1}$

T ——反应器温度, $^{\circ}C$

T_0 ——参考温度, $^{\circ}C$

t_0, t_i ——分别为过程开始时刻及结束时刻

$u(t)$ ——控制变量

$y(t)$ ——代数状态变量

$z(t), z_0$ ——分别为微分状态变量及初始值

$\Phi(t)$ ——附加变量

$\phi_j(t)$ ——离散化控制变量的第 j 个基函数

τ ——聚合物在反应器中的停留时间

$\omega_1, \omega_2, \omega_3, \omega_4$ ——分别为目标函数中各罚项的权重值

下角标

max——最大值

min——最小值

References

- [1] Wang Jingdai (王靖岱), Chen Jizhong (陈纪忠), Yang Yongrong (阳永荣). Optimal grade transition in continuous polymerization process. *Journal of Chemical Industry and Engineering (China)* (化工学报), 2001, **52**: 295-300
- [2] McAuley K B, MacGregor J F. Optimal grade transitions in a gas-phase polyethylene reactor. *AIChE Journal*, 1992, **38**: 1564-1576
- [3] Debling J A, Han G C, Kuipers F, Verburg J, Zacca J, Ray W H. Dynamic modeling of product grade transitions for olefin polymerization processes. *AIChE Journal*, 1994, **40**: 506-520
- [4] Takeda M, Ray W H. Optimal-grade transition strategies for multistage polyolefin reactors. *AIChE Journal*, 1999, **45**: 1776-1793
- [5] Wang Y, Seki H, Ohyama S, Akamatsu K, Ogawa M, Ohshima M. Optimal grade transition control for

- polymerization reactors. *Computers & Chemical Engineering*, 2000, **24**: 1555-1561
- [6] Yi H S, Kim J H, Han C H, Lee J, Na S S. Plantwide optimal grade transition for an industrial high-density polyethylene plant. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2003, **42**: 91-98
- [7] Chatzidoukas C, Perkins J D, Pistikopoulos E N, Kiparissides C. Optimal grade transition and selection of closed-loop controllers in a gas-phase olefin polymerization fluidized bed reactor. *Chemical Engineering Science*, 2003, **58**: 3643-3658
- [8] Bonvin D, Bodizs L, Srinivasan B. Optimal grade transition for polyethylene reactors via NCO tracking. *Chemical Engineering Research & Design*, 2005, **83**: 692-697
- [9] Kadam J V, Marquardt W, Srinivasan B, Bonvin D. Optimal grade transition in industrial polymerization processes via NCO tracking. *AIChE Journal*, 2007, **53**: 627-639
- [10] Flores-Tlacuahuac A, Biegler L T, Saldivar-Guerra E. Optimal grade transitions in the high-impact polystyrene polymerization process. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2006, **45**: 6175-6189
- [11] McAuley K B, MacGregor J F. Online inference of polymer properties in an industrial polyethylene reactor. *AIChE Journal*, 1991, **37**: 825-835
- [12] Liang Jun (梁军). On-line measurements and model analysis of gas-phase ethylene polymerization process in fluidized bed reactor (I). *Journal of Transduction Technology* (传感技术学报), 2003, **16**: 242-255
- [13] Sato C, Ohtani T, Nishitani H. Modeling, simulation and nonlinear control of a gas-phase polymerization process. *Computers & Chemical Engineering*, 2000, **24**: 945-951
- [14] Vassiliadis V S, Sargent R W H, Pantelides C C. Solution of a class of multistage dynamic optimization problems (I): Problems without path constraints. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 1994, **33**: 2111-2122
- [15] Biegler L T, Grossmann I E. Retrospective on optimization. *Computers & Chemical Engineering*, 2004, **28**: 1169-1192
- [16] Schlegel M, Marquardt W. Detection and exploitation of the control switching structure in the solution of dynamic optimization problems. *Journal of Process Control*, 2006, **16**: 275-290
- [17] Vassiliadis V S, Sargent R W H, Pantelides C C. Solution of a class of multistage dynamic optimization problems (II): Problems with path constraints. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 1994, **33**: 2123-2133
- [18] Wang Xiaoyong (汪小勇), Liang Jun (梁军), Liu Yuming (刘育明), Wang Wenqing (王文庆). Recursive PLS based adaptive soft-sensor model and its application. *Journal of Zhejiang University: Engineering Science* (浙江大学学报: 工学版), 2005, **39**: 676-680