

# BP神经网络优化在萃取精馏体系上的应用

王洪海<sup>1\*</sup>, 梁建成<sup>1</sup>, 崔小英<sup>2</sup>, 李春利<sup>1</sup>

(1. 河北工业大学化工学院, 天津 300130; 2. 唐山三友氯碱有限责任公司, 河北 唐山 063305)

**摘要:** 为了找到较优的参数组合, 尽量减少精馏系统中的能耗, 以萃取分离甲醇-丙酮-水工艺为例, 以产品质量分数和塔釜能耗为目标函数, 选取进料位置、理论板数、溶剂比和回流比等变量进行中心组合实验, 考察各因素之间相互作用对目标函数的影响。以中心组合设计处理的数据为基础, 从节能的角度运用神经网络优化法对其进行优化, 将得到的较优的参数组合代入到建好的模型中。优化后比优化前节能 22.27%。

**关键词:** 萃取精馏; BP神经网络; 优化; 节能

中图分类号: TQ028

文献标志码: A

文章编号: 0253-4320(2015)07-0154-05

## Application of BP neural network in extractive distillation system

WANG Hong-hai<sup>1\*</sup>, LIANG Jian-cheng<sup>1</sup>, CUI Xiao-ying<sup>2</sup>, LI Chun-li<sup>1</sup>

(1. School of Chemical Engineering, Hebei University of Technology, Tianjin 300130, China;

2. Sanyou Chlor-Alkali Co., Ltd., Tangshan 063305, China)

**Abstract:** In order to get the optimum combination of parameters and minimize the energy consumption in the distillation system, the effects of feed location, number of theoretical plates, solvent ratio, reflux ratio and their interactions on the purity of products and the reboiler duty are studied, taking the extraction separation of methanol-acetone-water system as an example. Based on the data from the central composite design, the system is optimized using the neural network optimization method. The better combinations of parameters are used to build the model. The energy efficiency is improved by 22.27% compared with the former process.

**Key words:** extractive distillation; BP neural network; optimization; energy-saving

精馏是利用混合液中各组挥发度不同, 分离均相混合液的单元操作, 是化学工业中能耗高、余热大的单元操作<sup>[1]</sup>。在一般的精馏塔中, 再沸器 95% 的能量被塔顶冷凝器中的冷却水或冷却空气带走, 而仅 5% 的能量被有效利用。同时又由于换热设备结垢、水蒸汽泄漏, 以及设备维修不良而引起的其他问题等, 使得蒸馏过程本来很低的能量利用率进一步降低<sup>[2]</sup>。在美国, 精馏的能量消耗占全美总能量消耗的 3%, 其中产品回收和分离纯化所消耗的能耗份额超过 90%<sup>[3]</sup>。因此, 精馏过程中节能具有非常重要的意义。

中心组合设计 (central composite design, CCD), 也称为星点设计, 是属于响应面优化的一种分析方法, 经常用来实现实验因素以及各因素之间相互作用对目标函数的影响。

## 1 BP神经网络简介

在化学工程中, 应用最多的人工神经网络是三层前馈网络模型<sup>[4]</sup>, 80% ~ 90% 的人工神经网络模型采用 BP 神经网络或它的变化形式。BP 神经网络

是一种采用误差逆向传播学习算法进行训练的多层前馈神经网络。由于 BP 神经网络具有学习、联想和容错功能, 并能进行大规模并行信息处理, 对非线性系统具有很强的映射能力, 成为人工神经网络的重要模型之一<sup>[5-8]</sup>。

BP 神经网络模型的分层网络分为若干层, 包括输入层、中间层和输出层<sup>[9-11]</sup>, 如图 1 所示。中间层一般有 1 层或多层。由于中间层不直接与外界输入和输出信号相连, 故将之称为隐含层。每层的各个单元叫做节点。

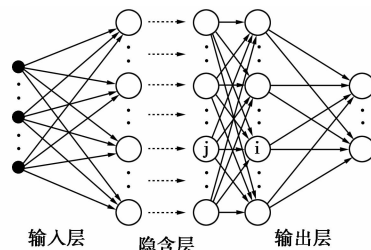


图 1 BP神经网络模型

本文中以萃取精馏分离甲醇-丙酮-水体系为例, 尝试在中心组合实验处理的数据基础上, 采用神

神经网络建立能够很好地反映参数组合与目标函数之间关系的模型。

## 2 萃取精馏分离甲醇-丙酮-水工艺

### 2.1 基础数据

本文中的基础数据来源于某制药厂对废液中的甲醇、丙酮进行回收。通过实际运行数据,建立起萃取精馏分离甲醇-丙酮的工艺模型。目前,在工业操作中,将此精馏工艺过程由三塔模型来实现,分别为萃取塔、丙酮塔和甲醇塔。其中增加第3个塔即甲醇塔的目的是得到质量分数超过99%的甲醇,以期得到进一步的应用。该体系中,存在甲醇、丙酮和水3个组分,初始料液首先进入萃取塔,用水作为萃取剂进行萃取精馏,在塔顶得到富含丙酮的物料,然后进入丙酮塔进行精馏分离,最终在塔顶得到高浓度的丙酮;萃取塔塔釜的料液富含甲醇,将其引入甲醇塔进行精馏,最终在塔顶得到高纯度的甲醇。在已有的研究中,以水作为萃取剂分离该物系,取得了比较好的效果<sup>[12]</sup>。

### 2.2 工艺流程

原料液组成是水质量分数为15.02%,丙酮质量分数为76.25%,甲醇质量分数为8.73%。

从图2可以看出,萃取塔塔顶料液进入丙酮塔,丙酮塔的塔釜料液返回萃取塔,它们之间在料液上形成了耦合,所以在本文中将萃取塔与丙酮塔作为整体优化,甲醇塔另行优化。未优化工艺中萃取塔与丙酮塔塔釜能耗为850 kW,甲醇塔塔釜能耗为487.4 kW。目标函数为丙酮塔塔顶丙酮质量分数、

萃取塔与丙酮塔的塔釜总能耗、甲醇塔塔顶甲醇质量分数和甲醇塔塔釜能耗。要求丙酮塔塔顶产品物流中丙酮质量分数不小于99.5%,甲醇塔塔顶产品物流中其质量分数不小于99.4%。

原工艺中萃取塔操作参数:理论板数为25,回流比为0.01,溶剂进料位置为第2块理论板,原料进料位置为第15块理论板,溶剂比为1。丙酮塔理论板数为25,回流比为3,进料位置为第24块理论板。

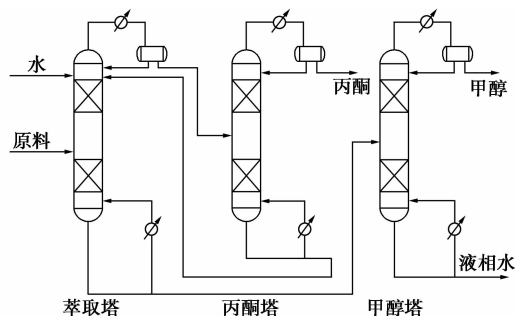


图2 工艺流程图

本工艺选取NRTL方程作为热力学方程进行建模。

### 2.3 各参数的单因素分析

由于丙酮的相对挥发度较大,即使萃取塔不回流,产品中丙酮质量分数已经很高。在原工艺模型中,当萃取塔回流比为0.01时,丙酮塔塔顶采出丙酮质量分数为99.64%,达到了回收标准,所以保持回流比为0.01不变。

对各参数进行单因素分析,得到各塔操作参数如表1。

(上接第153页)

进行了模拟与优化,对比分析了双反应段反应隔壁精馏塔的节能减排效果。研究表明,双反应段反应隔壁精馏塔虽然不具有节能优势,但完全具有常规反应精馏过程所能达到的分离效果,并可显著降低设备投资和占用空间。

### 参考文献

- [1] 孙兰义,杨德连,李军,等. 反应精馏隔壁塔内合成乙酸甲酯的模拟[J]. 化工进展,2009,28(1):19-22.
- [2] 孙兰义,王汝军,李军,等. 反应精馏隔壁塔的模拟研究[J]. 化学工程,2011,39(7):1-4.
- [3] Steyer F, Qi Z W, Sundmacher K. Synthesis of cyclohexanol by three-phase reactive distillation; Influence of kinetics on phase equilibria [J]. Chemical Engineering Science, 2002, 57: 1511-1520.

- [4] Douglas J M. Conceptual design of chemical processes [M]. New York: McGraw-Hill, 1988.
- [5] Chen B C, Yu B Y, Lin Y L, et al. Reactive-distillation process for direct hydration of cyclohexene to produce cyclohexanol [J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2014, 53: 7079-7086.
- [6] Steyer F, Sundmacher K. VLE and LLE data for the system cyclohexane plus cyclohexene plus water plus cyclohexanol [J]. Journal of Chemical & Engineering Data, 2004, 49: 1675-1681.
- [7] Katariya A, Freund H, Sundmacher K. Two-step reactive distillation process for cyclohexanol production from cyclohexene [J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2009, 48: 9534-9545.
- [8] Shan Xianglei, Cheng Zhenmin, Yuan Peiqing. Reaction kinetics and mechanism for hydration of cyclohexene over ion-exchange resin and H-ZSM-5 [J]. Chemical Engineering Journal, 2011, 175: 423-432. ■

表 1 单因素分析后各塔参数

参数	萃取塔	丙酮塔	甲醇塔
理论板数	25	19	25
原料进料位置	13	18	10
溶剂进料位置	3	—	—
溶剂比	0.7	—	—
回流比	0.01	3	5

### 3 基于 BP 神经网络的萃取塔与丙酮塔优化

#### 3.1 中心组合实验设计及结果

CCD 对数据处理的准确性已通过相关工作<sup>[13-16]</sup>加以验证,可以用于精馏过程中参数的处理。在确定各因素的水平之后就可以进行实验设计,以 8 因素 5 水平设计实验,删除未达到工艺标准的实验,最后得到了 48 组实验,中心组合实验设计和结果如表 2 所示。8 个因素分别为萃取塔的原始进料位置(A)、第二进料位置(B)、溶剂进料位置(C)、理论板数(D)、溶剂比(E)以及丙酮塔的理论板数(F)、进料位置(G)和回流比(H)。目标函数分别是丙酮塔塔顶产品丙酮质量分数(R1)和萃取塔与丙酮塔塔釜总能耗(R2)。

表 2 CCD 及实验与结果

组数	变量								响应	
	A	B	C	D	E	F	G	H	R1/%	R2/kW
1	15	4	4	22	0.5	22	21	3.2	99.1039	797.1
2	11	4	4	22	0.9	22	21	2.8	99.4159	757.0
3	15	4	2	22	0.9	22	15	2.8	99.4611	761.8
4	15	2	2	28	0.9	16	21	2.8	99.4736	761.8
5	11	2	4	28	0.9	22	15	2.8	98.6878	765.5
6	11	4	4	28	0.5	22	15	2.8	98.6135	676.4
7	11	4	4	28	0.9	22	15	2.8	99.2976	763.3
8	15	4	4	28	0.9	16	21	2.8	99.4545	762.0
9	15	4	2	28	0.5	22	15	3.2	99.3613	800.6
10	15	2	4	28	0.5	16	21	2.8	97.5330	684.4
11	15	4	4	22	0.9	16	15	3.2	99.4792	890.3
12	11	4	4	22	0.5	16	21	3.2	98.6531	806.2
13	15	2	2	22	0.5	22	15	2.8	99.0905	670.5
14	15	2	4	22	0.5	16	15	3.2	97.5171	816.7
15	11	4	2	22	0.9	22	21	2.8	99.5342	757.1
16	15	2	2	28	0.9	22	15	3.2	99.5275	891.1
17	11	2	2	22	0.5	22	21	2.8	98.9825	668.0

18	11	2	4	28	0.9	16	15	3.2	98.7439	896.2
19	11	4	2	22	0.9	16	21	3.2	99.4544	903.4
20	11	2	4	28	0.5	22	21	3.2	97.5147	814.7
21	15	4	2	28	0.5	16	21	2.8	99.3120	671.1
22	11	2	4	22	0.9	16	15	2.8	98.6993	764.0
23	15	4	4	22	0.5	22	15	2.8	98.9761	671.7
24	15	2	2	22	0.9	22	21	3.2	99.5732	885.0
25	15	2	4	22	0.5	22	21	3.2	97.5752	803.6
26	11	4	2	28	0.9	22	21	3.2	99.5834	887.7
27	11	2	2	22	0.9	16	21	3.2	99.4561	890.4
28	15	2	4	28	0.9	16	21	2.8	98.9081	763.5
29	11	4	2	28	0.5	16	15	3.2	99.0790	803.7
30	11	2	2	22	0.5	16	15	2.8	98.8758	672.8
31	10	3	3	25	0.7	19	18	3	99.1897	779.7
32	16	3	3	25	0.7	19	18	3	99.5243	776.2
33	13	5	3	25	0.7	19	18	3	99.4663	778.2
34	13	3	5	25	0.7	19	18	3	98.2656	786.7
35	13	3	3	20	0.7	19	18	3	99.3682	776.4
36	13	3	3	30	0.7	19	18	3	99.4381	777.8
37	13	3	3	25	0.4	19	18	3	98.6138	716.5
38	13	3	3	25	0.7	14	18	3	99.2973	783.0
39	13	3	3	25	0.7	24	18	3	99.4348	777.1
40	13	3	3	25	0.7	19	13	3	99.2990	782.9
41	13	3	3	25	0.7	19	23	3	99.4339	777.1
42	13	3	3	25	0.7	19	18	2.7	99.3948	680.1
43	13	3	3	25	0.7	19	18	3.3	99.4653	874.2
44	13	3	3	25	0.7	19	18	3	99.4211	777.1
45	13	3	3	25	0.7	19	18	3	99.4331	777.1
46	13	3	3	25	0.7	19	18	3	99.4336	777.1
47	13	3	3	25	0.7	19	18	3	99.4338	777.1
48	13	3	3	25	0.7	19	18	3	99.4338	777.1

#### 3.2 BP 神经网络结构的确定及训练结果

对于丙酮质量分数,因为有 8 个变量,输入参数为 8 个;目标函数为 1 个,则输出参数为 1,Hecht-Nielsen 证明了对于任意一个在闭区间内连续的函数都可以用一个隐含层的 BP 神经网络来逼近<sup>[17]</sup>,因此本文中均选定隐含层数为 1。输入层到隐含层的传递函数为 transig,隐含层节点数为 9,训练函数为 trainbr。对于塔釜总能耗,输入参数为 8 个,输出参数为 1 个,输入层到隐含层的传递函数为 logsig,

隐含层节点数为7,训练函数为 trainbr。2个神经网络的隐含层到输出层的传递函数均为 purelin,归一化函数为 premmx(),反归一函数为 postmnmx()。

经过训练,得到了8个参数与2个目标函数的关系式,即:

$$R1 = g_2[W_2g_1(W_1X + B_2)] \quad (1)$$

$$R2 = g_2[W_4g_3(W_3X + B_4)] \quad (2)$$

式中, $g_1()$ 为丙酮质量分数的神经网络输入层到隐含层的传递函数 transig; $g_2()$ 为2个神经网络的隐含层到输出层的传递函数 purelin; $g_3()$ 为塔釜总能耗的神经网络输入层到隐含层的传递函数 logsig; $X = (x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6, x_7, x_8)^T$ , $x_1 \sim x_8$ 为神经网络的输入参数。

$$W_1 = \begin{bmatrix} 0.0399 & 0.4570 & \cdots & -0.0030 \\ 0.0674 & -0.6499 & \cdots & -0.0539 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0.0346 & 0.3682 & \cdots & -0.2254 \end{bmatrix}_{6 \times 3}$$

$$W_2 = (-9.9842 \quad -9.9544 \quad \cdots \quad 9.9862)_{1 \times 9}$$

$$W_3 = \begin{bmatrix} -0.0139 & -0.0293 & \cdots & 0.2871 \\ 0.0173 & -0.0124 & \cdots & 0.2213 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ -0.0184 & -0.0283 & \cdots & -0.2753 \end{bmatrix}_{7 \times 8}$$

$$W_4 = (0.6505 \quad 0.4854 \quad \cdots \quad 0.5727)_{1 \times 7}$$

$$B_1 = [(-0.0052 \quad -0.6332 \quad \cdots \quad -0.0115)_{9 \times 1}]^T$$

$$B_2 = 9.9844$$

$$B_3 = [(-0.3533 \quad -0.2024 \quad \cdots \quad -0.2721)_{7 \times 1}]^T$$

$$B_4 = -0.3627$$

将以上各值代入式(1)、式(2)中,使得式(1)的结果大于99.5%,并求式(2)的最小值。利用MATLAB中的 fmincon 函数编程可得到优化结果为:萃取塔原料进料位置为第16块理论板,第二进料位置为第3块理论板,理论板数为27,溶剂比为0.6;丙酮塔理论板数为24,进料位置为第23块理论板,回流比为2.7。将优化后的参数代入到模型中,目标函数萃取塔与丙酮塔总能耗为655.4 kW,节省能耗194.5 kW,与优化前相比节能22.88%。

## 4 基于BP神经网络的甲醇塔优化

### 4.1 中心组合实验设计及结果

在确定各因素的水平之后进行实验设计,以3因素5水平设计了20组实验,中心组合实验设计和结果如表3所示。3个因素分别是甲醇塔的进料位置( $x_1$ )、回流比( $x_2$ )和理论板数( $x_3$ )。目标函数分

别是甲醇塔塔顶产品甲醇的质量分数( $Y1$ )和甲醇塔塔釜能耗( $Y2$ )。

表3 CCD及实验结果

组数	变量			响应	
	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$Y1/\%$	$Y2/\text{kW}$
1	14	4	21	98.4591	407.1
2	18	4	21	92.7139	431.1
3	14	5	21	99.6713	484.2
4	18	5	21	95.3801	502.3
5	14	4	25	99.6908	404.8
6	18	4	25	98.4580	407.1
7	14	5	25	99.7020	484.1
8	18	5	25	99.6871	484.1
9	13	4.5	23	99.6836	444.4
10	19	4.5	23	96.4026	456.4
11	16	3.7	23	97.7279	386.1
12	16	5.3	23	99.7047	507.9
13	16	4.5	20	96.4062	456.4
14	16	4.5	26	99.8174	446.8
15	16	4.5	23	99.4279	448.0
16	16	4.5	23	99.4279	448.0
17	16	4.5	23	99.4279	448.0
18	16	4.5	23	99.4279	448.0
19	16	4.5	23	99.4279	448.0
20	16	4.5	23	99.4279	448.0

### 4.2 BP神经网络结构的确定及训练结果

对于甲醇质量分数,输入层为3个函数,输出层为1个参数,训练函数为 trainbr,输入层(隐含层)到隐含层(输出层)的传递函数为 logsig(purelin),隐含层的节点数为7。对于塔釜能耗,输入层为3个参数,输出层为1个参数,训练函数为 trainbr,输入层(隐含层)到隐含层(输出层)的传递函数为 logsig(purelin),隐含层的节点数为6。

经过训练之后,得到3个参数与目标函数的关系:

$$Y1 = g_2[W_2g_1(W_1x + B_1) + B_2] \quad (3)$$

$$Y2 = g_4[W_4g_3(W_3x + B_3) + B_4] \quad (4)$$

式中, $g_1()$ 为甲醇质量分数的神经网络输入层到隐含层的传递函数 logsig; $g_2()$ 为甲醇质量分数的神经网络隐含层到输出层的传递函数 purelin; $g_3()$ 为塔釜能耗的神经网络输入层到隐含层的传递函数

$\log\text{sig}; g_4()$  为塔釜能耗的神经网络隐含层到输出层的传递函数 purelin。

$$W_1 = \begin{bmatrix} -1.4395 & 0.9289 & \cdots & 1.8555 \\ -1.0660 & 1.3725 & \cdots & 0.8918 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0.0666 & 3.7445 & \cdots & 0.2355 \end{bmatrix}_{7 \times 3}$$

$$W_2 = (14.5157 \quad -3.4689 \quad \cdots \quad 20.7506)_{1 \times 7}$$

$$W_3 = \begin{bmatrix} 0.0399 & 0.4570 & \cdots & -0.0030 \\ 0.0674 & -0.6499 & \cdots & -0.0539 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0.0346 & 0.3682 & \cdots & -0.2254 \end{bmatrix}_{6 \times 3}$$

$$W_4 = (0.4218 \quad -0.3712 \quad \cdots \quad -0.1830)_{1 \times 6}$$

$$B_1 = [(-16.6768 \quad -5.7490 \quad \cdots \quad -6.1550)_{7 \times 1}]^T$$

$$B_2 = 30.2855$$

$$B_3 = [(0.5585 \quad 3.4777 \quad \cdots \quad 0.1165)_{6 \times 1}]^T$$

$$B_4 = 0.0525$$

将以上各值代入式(3)、式(4)中,使得式(3)的结果大于 99.4%,并求式(4)的最小值。利用 MATLAB 中的 fmincon 函数编程可得到优化结果为:进料位置为第 16 块理论板,理论板数为 26 块,回流比为 3.7。将优化后的操作参数代入到建立好的工艺模型中模拟,得到的能耗为 384.1 kW。未优化之前的甲醇塔能耗为 487.4 kW,节省能耗 103.3 kW,与优化前相比节能 21.19%。

## 5 结论

(1) 综合萃取塔与丙酮塔塔釜能耗以及甲醇塔塔釜能耗,可以看出优化前总能耗为 1 337.3 kW,优化后总能耗为 1 039.5 kW。二者相比,经过 BP 神经网络优化后节约能量为 22.27%,节能效果明显。

(2) 萃取精馏过程具有变量多、机理复杂以及非线性程度强的特点,优化起来难度较大。BP 神经网络具有初步的自适应与自组织能力,在学习或训练过程中可以改变权重值,以适应周围环境的要求。对 BP 神经网络规定好学习方式或某些规则,具体的学习内容随系统所处环境(即输入信号情况)而异,系统可以自动发现环境特征和规律性,具有更近似人脑的功能。经过优化结果分析,用 BP 神经网络对萃取精馏进行建模,能较大程度地达到节能的效果,可以实现多因素多变量非线性模拟的较好模拟,是一种行之有效的方法。

## 参考文献

- [1] 李鑫钢. 蒸馏过程节能与强化技术[M]. 北京:化学工业出版社,2011:6.
- [2] 李鑫钢. 现代蒸馏技术[M]. 北京:化学工业出版社,2009:111.
- [3] Bravo-Bravo C, Segovia-Hernandez J G. Extractive dividing wall column: Design and optimization[J]. Ind Eng Chem Res, 2010, 49(8):3672-3688.
- [4] 宋海华,张学岗,宋高鹏. 萃取精馏溶剂的选择(I)溶剂分子 QSPR 的人工神经网络模型[J]. 化工学报,2007, 58(8):2010-2015.
- [5] Chen Wen-Chin, Tai Pei-Hao, Wang Min-Wen, et al. A neural network-based approach for dynamic quality prediction in a plastic injection molding process[J]. Expert Systems with Applications, 2008, 35(3):843-849.
- [6] Chow T T, Zhang G Q, Lin Z, et al. Global optimization of absorption chiller system by genetic algorithm and neural network[J]. Energy and Buildings, 2002, 34(1):103-109.
- [7] Medsker Larry R, Medsker Larry R. Hybrid neural network and expert systems[M]. New York:Springer,1994.
- [8] Ozcelik Babur, Erzurumlu Tuncay B. Comparison of the warpage optimization in the plastic injection molding using ANOVA, neural network model and genetic algorithm[J]. Journal of Materials Processing Technology, 2006, 171(3):437-445.
- [9] Govindaraju Rao S. Artificial neural networks in hydrology. I: Preliminary concepts[J]. Journal of Hydrologic Engineering, 2000, 5(2):115-123.
- [10] Govindaraju Rao S. Artificial neural networks in hydrology. II: Hydrologic applications[J]. Journal of Hydrologic Engineering, 2000, 5(2):124-137.
- [11] 时慧焯,王希诚. 基于改进的 BP 神经网络的注塑成型翘曲优化设计[J]. 化工学报,2011, 62(9):2562-2568.
- [12] 钟禄平. 萃取精馏分离甲醇和丙酮共沸物的研究[D]. 天津:天津大学,2004.
- [13] Wang H H, Li C L, Li C H. RSM optimization of the operating parameters for a butanol distillation column[J]. Asia-Pacific Journal of Chemical Engineering, 2012, 7(1):117-123.
- [14] Wang H H, Cui X Y, Li C L, et al. Separation of ethyl acetate-dichloromethane-ethanol by extractive distillation: Simulation and optimization[J]. Chemical Engineering & Technology, 2013, 36(4):627-634.
- [15] Wang H H, Cui X Y, Wang R L. Response surface optimization of the operating parameters for a complex distillation column based on process simulation 2012[C]. Energy Procedia: 2012, 16:571-578.
- [16] 王洪海,崔小英,钟宏伟,等. RSM 与流程模拟结合用于复杂塔操作参数优化[J]. 河北工业大学学报,2011, 40(1):36-40.
- [17] Hecht-Nielsen Robert. Theory of the backpropagation neural network[C]. Neural Networks, 1989. IJCNN. , International Joint Conference on, IEEE, 1989:593-605. ■