

异辛醇氧化工艺优化：混合建模策略实现节能降碳双提升

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/42331.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

异辛醇氧化工艺优化：混合建模策略实现节能降碳双提升。 研究背景

化工过程优化常面临机理模型计算耗时与实验数据稀缺的双重挑战。近日，中国海洋大学周鑫与中国石油大学（华东）闫昊的研究团队在ENGINEERING Chemical Engineering发表了一项新成果。该研究提出了一种机理模型+深度学习代理模型的混合建模策略，成功应用于异辛醇氧化制异辛醛工艺的多目标优化。该方法在保持高精度的同时，将计算效率提升400倍以上，并显著降低了过程能耗与碳排放。

问题定义

醇类选择性氧化是精细化工生产中的重要反应过程，但工业应用中长期存在以下技术难点：

1. 反应体系复杂：涉及复杂的反应网络，受温度、压力等多变量耦合影响。
2. 数据获取受限：氧化反应通常伴随强放热及氢气生成，实验周期长且存在安全风险，难以获取大规模实验数据用于机器学习训练。
3. 计算成本高：传统的基于严格机理模型（如Aspen Plus）的优化方法，在进行多目标迭代时计算负荷极大，难以满足实时优化需求。

针对上述问题，本研究旨在建立一种数据与机理融合的混合建模策略，以异辛醇氧化制异辛醛工艺为例，探索在保证模型精度的前提下，实现过程经济效益与环境效益的协同优化。

混合建模技术路线

研究团队构建了一套包含机理数据生成-代理模型构建-多目标优化的完整技术框架。

基于机理模型的数据增强

利用Aspen Plus软件建立异辛醇氧化全流程机理模型（涵盖固定床反应器、闪蒸分离、真空精馏等单元）。采用PENG-ROB状态方程和平推流反应器，通过均匀采样策略模拟生成了1845组涵盖不同操作工况的数据集，有效解决了机器学习训练样本不足的问题。

代理模型 (Surrogate Model) 开发

在Python环境下，对比研究了四种机器学习算法作为机理模型的代理：

- 集成学习算法：XGBoost、随机森林 (RF)
- 深度学习算法：深度神经网络 (DNN)、深度置信网络 (DBN)

以反应温度、停留时间、反应压力、精馏塔板数、进料位置为输入特征，以单位生产成本 (PUC) 和单位温室气体排放 (GHG) 为预测输出，训练回归模型。

多目标优化求解

将训练好的代理模型与四种主流进化算法 (NSGA-II, NSGA-III, MOEA/D, RVEA) 耦合，以最小化PUC和最小化GHG为双重目标函数进行寻优。

核心研究结果

模型预测性能：DBN与XGBoost表现突出

验证结果显示，DBN模型的R2达到0.999，为精度最优，XGBoost模型泛化能力更强，在生产成本和碳排放预测中均表现稳定。所有模型测试集表现均优于训练集，验证了模型的可靠性。

特征重要性分析：反应温度为最关键影响因素

通过相关性分析和SHAP模型解析特征影响规律，结果表明，PUC与GHG呈强正相关；反应温度与二者均呈强负相关（接近-1）。反应温度升高虽看似增加能源消耗，但能提升精馏进料汽化率、降低再沸器热负荷，最终显著降低分离成本，实现成本与排放同步下降。SHAP分析进一步证实，反应温度对工艺目标的影响远高于其他变量。

计算效率：XGBoost-RVEA组合超传统方法400倍

不同代理模型与优化算法的组合中，集成基ESM的XGBoost-RVEA组合表现最优—仅用14.3s完成求解，而传统直接解算耗时超5672.5s，计算效率提升超400倍。最优解为生产成本1.347 \$/kg、CO₂排放0.265 kg/kg。

生命周期分析：能耗降10%，碳排放降12%

基于最优操作条件进行生命周期评估，优化后的工艺表现出显著的节能减排效果。能源消耗：初级能源需求由5.63 GJ/h 降至5.09 GJ/h。碳排放：温室气体排放总量由0.33 tCO₂ eq/h 降至0.29 tCO₂ eq/h。进一步分析表明，能耗主要来自脱氢反应器（54%）和精馏分离单元（46%），碳排放以C₂H₅OH为主，反应系统占64%，是后续碳减排的核心潜力环节。

结论与展望

本研究证实，机理+深度学习的混合代理模型策略能有效解决异辛醇氧化工艺的数据稀缺和优化

效率低问题，其中 XGBoost-RVEA 组合在精度和效率上实现双重最优。优化后的工艺不仅大幅降低生产能耗与碳排放，还实现了反应与分离环节的协同优化，为醇类氧化生产的实时优化提供了技术支撑。未来，可围绕反应系统进一步优化决策变量，挖掘更大的碳减排潜力，同时将该混合建模策略拓展至更多复杂工艺，助力化工行业的低碳转型。

论文重要图示

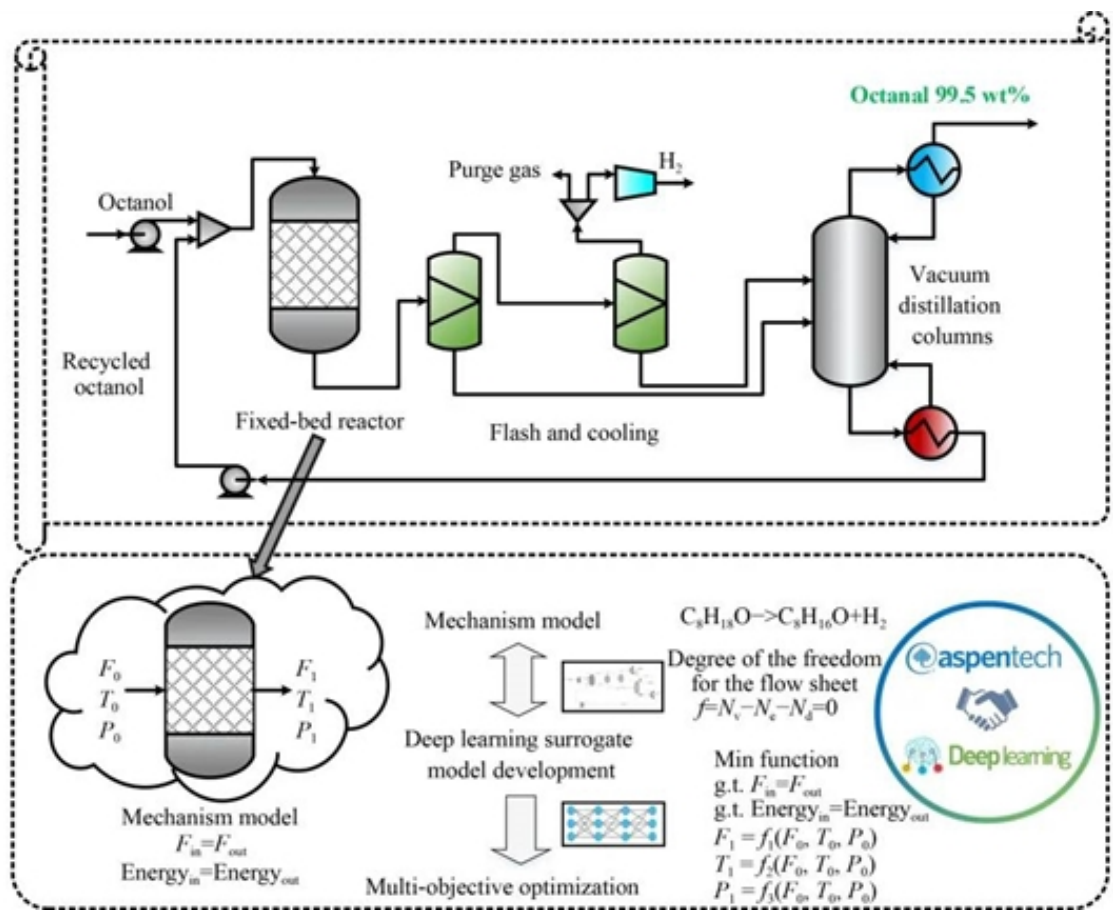


图1.异辛醇氧化工艺流程图与混合模型优化策略示意图。展示了从原料进入固定床反应器到产物分离的工艺流程，以及结合机理模型、深度学习代理模型和多目标优化的技术路线。

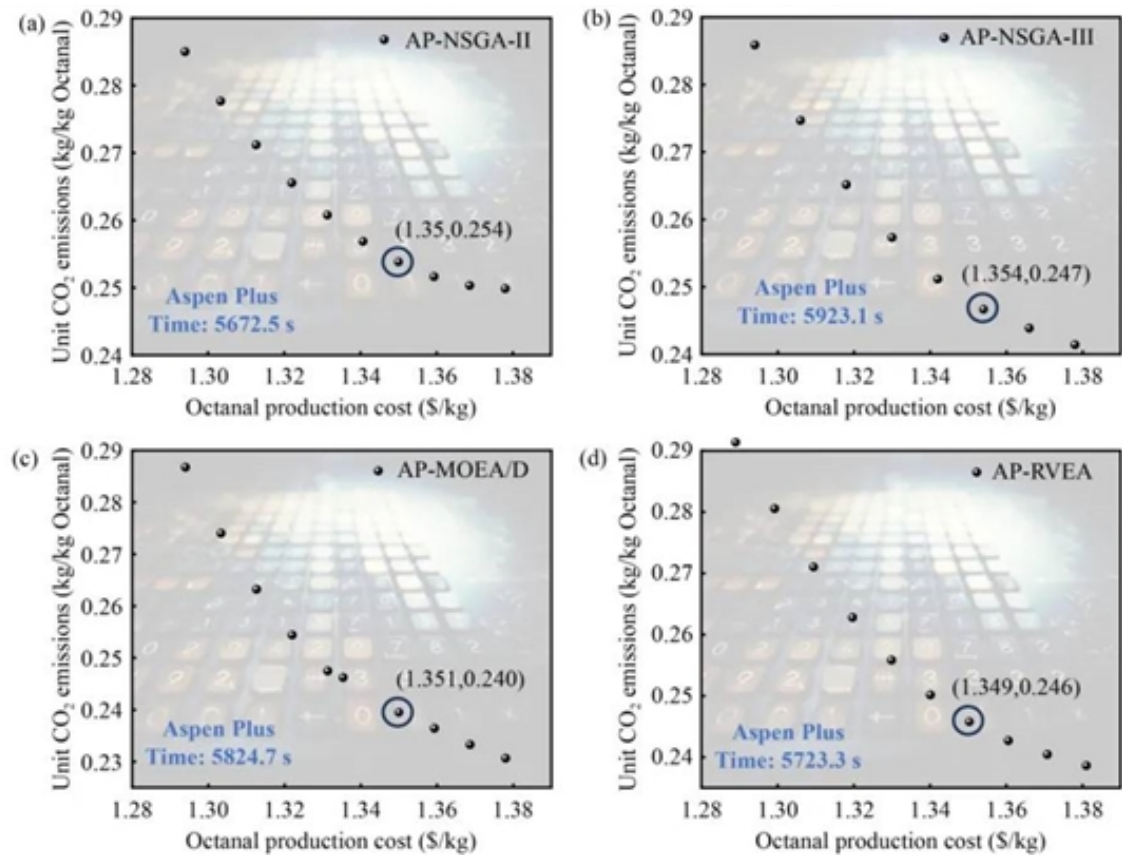


图2.DSM（直接机理模拟）方法的Pareto最优解集（POS）前沿结果：(a) AP-NSGA-II; (b) AP-NSGA-III; (c) AP-MOEA/D; (d) AP-RVEA。展示了直接基于Aspen Plus进行多目标优化得到的生产成本与碳排放的权衡解集。

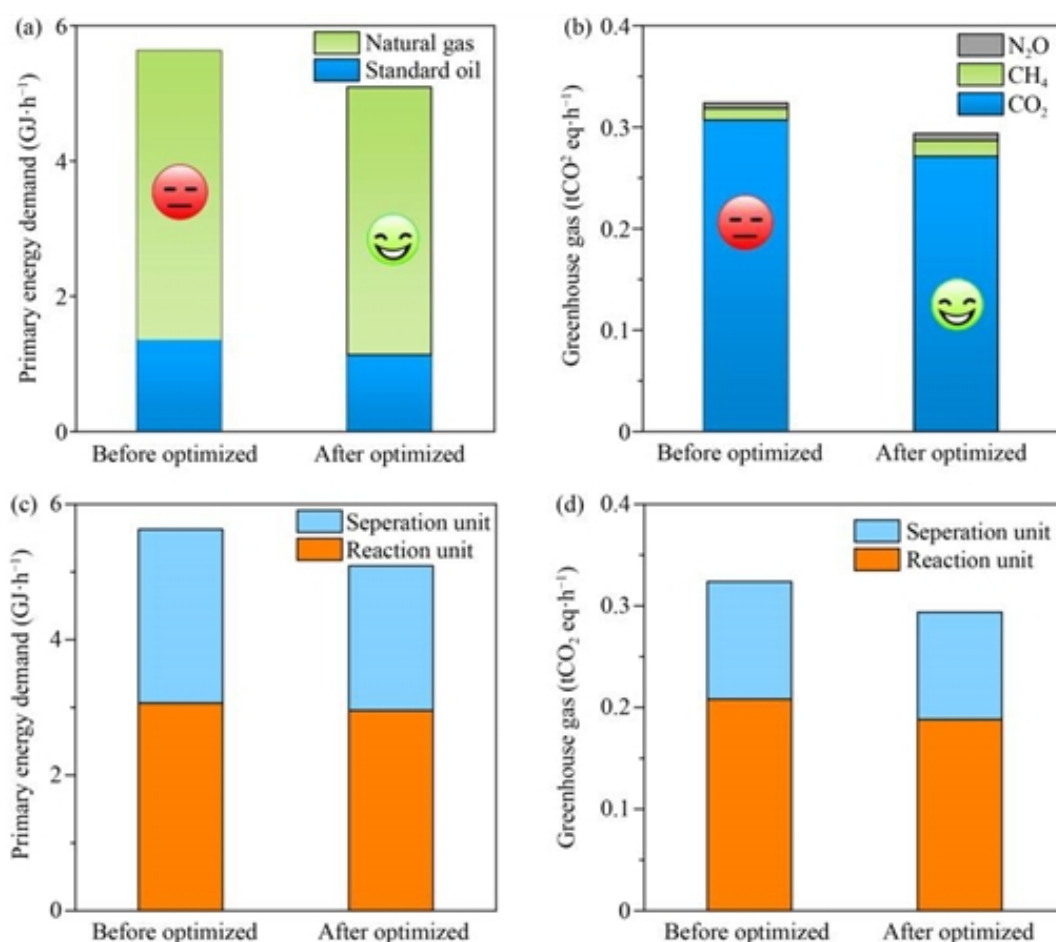


图3.实施优化策略前后的对比分析。分别对比了优化前后的一次能源消耗总量、温室气体排放总量，以及反应单元与分离单元的能耗与排放结构分解。（来源：EngineeringJournals微信公众号）

相关论文信息：

<https://journal.hep.com.cn/fcse/EN/10.1007/s11705-026-2630-1>

特别声明：本文转载仅仅是出于传播信息的需要，并不意味着代表本网站观点或证实其内容的真实性；如其他媒体、网站或个人从本网站转载使用，须保留本网站注明的“来源”，并自负版权等法律责任；作者如果不希望被转载或者联系转载稿费事宜，请与我们联系。

作者：周鑫等 来源：《工程·化学工程》

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发