

[文章编号] 1004-0609(2002)06-1290-04

铝酸钠溶液种分首槽温度控制预报准理论模型的应用^①

肖忠良, 陈启元, 张平民, 尹周澜, 陈金清

(中南大学 化学化工学院, 长沙 410083)

[摘 要] 应用铝酸钠溶液种分首槽温度控制预报准理论模型, 结合实际生产情况, 在原模型参数的基础上将晶种表面积改设为变量, 并考虑到反馈比这一重要工艺参数的作用, 引入小于 45 μm 粒子质量分数和二次成核生成的临界粒径的晶核粒径分布值之间的关系, 应用线性回归原理, 求出修正后的模型参数, 根据现场生产数据, 对首槽控制温度进行预测, 其结果与稳定生产的首槽控制温度及经验模型(X 模型)的预测结果基本一致。以 C++ Builder 为开发平台, 成功开发了基于该原理的、运行于 Windows 系统的应用软件, 使用效果良好。

[关键词] 砂状氧化铝; 温度控制; 准理论模型

[中图分类号] TF 821

[文献标识码] A

采用拜耳法用高浓度铝酸钠溶液生产砂状氧化铝, 是氧化铝生产的一个重要发展方向。国内外研究^[1~5]及砂状氧化铝生产^[6]的实践表明, 过饱和铝酸钠溶液种子分解工艺包括附聚、晶粒长大、二次成核和晶粒破损等过程。生产上影响种子分解过程的因素, 除分解原液铝酸钠浓度、氢氧化钠浓度、晶种系数、晶种质量和分解时间外, 分解温度是一项极为重要的因素。一般而言, 分解温度能影响溶液粘度、扩散速度、晶体长大速度、二次晶核的生成, 同时影响氢氧化铝晶体的完整性、强度、杂质含量等^[7~9]。因而, 如何合理地确定分解温度, 尤其是首槽分解温度, 对于砂状氧化铝的稳定生产具有十分重要的意义。Crama^[3]等建立了铝酸钠溶液分解的动态模型并作了计算机模拟; Kumar^[10]等基于成核、粒子长大的动力学规律建立了粒子总数平衡模型; 张平民等^[1]以热力学、动力学理论为基础, 在忽略氧化铝生产中次要的工艺因素基础上, 建立了铝酸钠溶液种分首槽温度控制预报准理论模型, 结合生产实际对其进行修正后, 根据现场生产数据, 对首槽控制温度进行预测和控制。

1 准理论模型应用于生产预报时的变量情况分析^[1, 11, 12]

文献[1]以热力学、动力学理论为基础, 建立了如下准理论模型:

$$\ln \varphi(r_c) = \ln K'_0 + \ln k_p + K_1/T +$$

$$\begin{aligned} & K_2 \sqrt{c(\text{NaOH}) + c(\text{NaAl}(\text{OH})_4)} \\ & = K_0 + K_1/T + \ln k_p + \\ & K_2 \sqrt{c(\text{NaOH}) + c(\text{NaAl}(\text{OH})_4)} \end{aligned}$$

式中 $\varphi(r_c)$ 为二次成核所生成的临界粒径 r_c 的晶核的粒径分布值; T 为首槽控制温度; k_p 为首槽 NaAlO_2 溶液 Al_2O_3 与 Na_2O 的质量比, K_0 , K_1 , K_2 为常数。

上述模型从本质上反映了生产过程中主要工艺参数间的数量关系, 但由于该模型在建立时, 为了保持推导过程严密又不至于复杂, 把一些工艺参数设置为常量。因此, 在实际应用过程中, 结合实际情况作了如下改进:

1) 上述公式推导应用了二次成核的速率方程式^[2]:

$$-\left[\frac{dk_p}{dt}\right]_{\text{nucleation}} \Rightarrow \frac{dN_{\text{nucleation}}}{dt} = A e^{-E_a/(RT)} \left[\frac{k_p}{k_{p,\text{eq}}^*}\right]^n S^m$$

式中 $k_{p,\text{eq}}^*$ 为分解达到平衡时 Al_2O_3 与 Na_2O 的质量比, E_a 为分解反应活化能, T 为分解时的温度, n 和 m 为常数, S 为晶种表面积。

n 和 m 取为 1, S 取为常数, 才得到准理论模型。实际生产中, 由于二次成核及晶体长大情况比较复杂, m , n 往往不为 1, 而且 S 存在一定波动, 所以有必要把 S 改设为变量, 得到

$$\ln \varphi(r_c) = K_0 + \frac{K_1}{T} + K_2 \ln k_p + K_3 \ln S +$$

① [基金项目] 国家“十五”科技攻关项目(2001BA609-A-18); 国家重点基础研究发展规划项目(G1999064902); 国家自然科学基金资助项目(58974031) [收稿日期] 2001-12-12; [修订日期] 2002-04-04 [作者简介] 肖忠良(1964-), 男, 博士研究生。

$$K_4 \sqrt{c(\text{NaOH}) + c(\text{NaAl}(\text{OH})_4)}$$

(1)

2) 对首槽温度进行控制的目的是在完成一定产量的基础上保持粒度分布的稳定, 生产上通过选择分流比 ξ 实现控制, 要求小于 $45\text{ }\mu\text{m}$ 粒子的含量维持在 $7\% \sim 12\%$, 这就要求小于 $45\text{ }\mu\text{m}$ 粒子的质量分数 x 与临界晶核分布频率 $\varphi(r_c)$ 保持某种定量关系, 所以, 必须引入一个小于 $45\text{ }\mu\text{m}$ 粒子的质量分数 x 与 $\varphi(r_c)$ 的定量关系, 至于用小于 $45\text{ }\mu\text{m}$ 还是小于 $55\text{ }\mu\text{m}$ 或小于 $35\text{ }\mu\text{m}$ 这无关紧要, 视产品要求而定。根据 $\text{Al}(\text{OH})_3$ 粒度分布规律取关系式为

$$\varphi(r_c) = a_1 \times x + b_1$$

(2)

2 应用软件制作

2.1 数学原理

根据上述模型, 假设模型参数已知, 要控制 $45\text{ }\mu\text{m}$ 粒子的质量分数, 把设定的小于 $45\text{ }\mu\text{m}$ 粒子的质量分数数据代入式 (2) 得到 $\varphi(r_c)$, 再根据式 (1), 可求得首槽控制温度。而要进行上述预测首先必须根据稳定生产的现场数据, 统计回归出 $a_1, b_1, K_0, K_1, K_2, K_3, K_4$ 等参数, 对于

$$\ln \varphi(r_c) = K_0 + \frac{K_1}{T} + K_2 \ln k_p + K_3 \ln S +$$
$$K_4 \sqrt{c(\text{NaOH}) + c(\text{NaAl}(\text{OH})_4)}$$

令 $y = \ln \varphi(r_c); 1/T, \ln k_p, \ln S, \sqrt{c(\text{NaOH}) + c(\text{NaAl}(\text{OH})_4)}$ 分别为 a_2, a_3, a_4, a_5 , 据此则可得超定线性方程组为

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & a_{1,2} & \cdots & a_{1,5} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & a_{m,2} & \cdots & a_{m,5} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_0 \\ \vdots \\ K_4 \end{bmatrix}$$

解超定线性方程组得模型参数 $K_0, K_1, K_2, K_3,$

K_4 , 根据上述模型即可对首槽控制温度进行预测。

2.2 软件实现

根据实际生产中对该软件功能的要求设计其功能模块, 见图 1。以 C++ Builder 为开发平台, 采用 Microsoft 公司的 Access 数据库存储数据, 数据库名称为“数据库.mdb”, 该数据库由“回归参数”, “生产统计台帐”, “预测温度”3 个表组成, 程序通过 ODBC 数据库引擎, 对 Access 数据库进行管理与维护, 进行数据记录的增加、删除、修改、查询等操作。

根据前述的数学方法, 首先从数据库中取出用于回归的数据, 2 次解超定方程分别求出 $a_1, b_1, K_0, K_1, K_2, K_3, K_4$ 。

由于砂状氧化铝生产种分工艺设施为多槽、连续、循环的反应系统, 该反应系统的容量大, 完成一个循环的时间长, 几天乃至十几天前的生产条件都会对种分过程产生影响, 所以根据前几天的工艺条件对敏感的模型参数要进行不断调整, 再根据拟设小于 $45\text{ }\mu\text{m}$ 粒子质量分数及当天的工艺条件, 对首槽控制温度进行可靠预报。

3 应用软件使用效果比较分析

利用某氧化铝厂 2001 年 2 月 1 日~ 4 月 28 日的稳定生产数据进行回归(停车时的数据未取), 以求得参数, 表 1 是所求得的模型参数。

表 1 模型参数

Table 1 Parameters of model

a_1	b_1	K_0	K_1
0.203 63	5.489 77	6.214 29	- 255.080
K_2	K_3	K_4	
- 0.084 69	2.233 23	0.509 31	

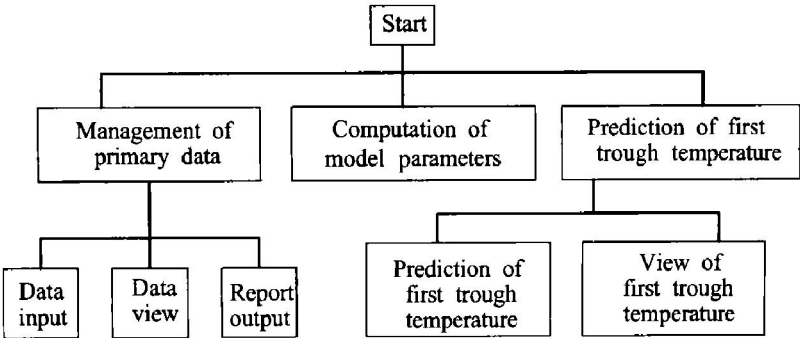


图 1 应用软件功能模块

Fig. 1 Functional module of application software

该厂于 2001 年 5 月 2 日~ 5 月 28 日期间, 系统中 $\text{Al}(\text{OH})_3$ 粒度分布基本稳定, 说明实际控制温度与系统的要求一致, 处于稳定生产状态, 所以根据表 1 的模型参数, 取这一期间的生产数据, 并确定预期的晶种小于 $45\text{ }\mu\text{m}$ 的含量为 12%, 分别预测下一天的首槽温度。该厂从国外引进的先进技术中应用经验模型——称为 X 模型对首槽控制温度也进行了预报, 把 2 个模型预测结果与下一天的实际首槽温度进行对比, 见表 2。

结果表明, 该准理论模型预测的首槽控制温度与现场稳定生产时控制的首槽温度基本吻合, 由于准理论模型源于热力学、动力学的基本原理, 经修正后, 故较经验模型——X 模型更能反映铝酸钠溶

液种分过程的本质规律, 能够取代 X 模型。

4 结论

在继承了原准理论模型理论性强的优点基础上, 结合实际生产情况, 改设晶种表面积为变量, 引入了小于 $45\text{ }\mu\text{m}$ 粒子质量分数和 $\Phi(r_c)$ 之间的关系, 将准理论模型应用于铝酸钠溶液种分首槽控制温度预报, 应用 C+ + Builder 开发平台, 成功开发基于 Windows 系统的应用软件, 所预测的首槽控制温度, 与实际控制温度能较好吻合, 对实际生产中的种分首槽控制温度起到了预测作用。

表 2 预测温度与实际温度对照表

Table 2 Comparison of predicted and actual temperature

Date	Actual temperature / $^{\circ}\text{C}$	Predicted temperature with our model/ $^{\circ}\text{C}$	Predicted temperature with X model/ $^{\circ}\text{C}$	Deviation of X model/ $^{\circ}\text{C}$	Deviation of our model/ $^{\circ}\text{C}$
2	59.56	60.66	59.08	- 0.48	1.10
3	59.49	60.05	60.26	0.77	0.56
4	59.44	60.06	58.81	- 0.63	0.62
5	59.48	60.33	58.87	- 0.61	0.85
5	59.48	60.33	58.87	- 0.61	0.85
6	59.54	59.99	59.02	- 0.52	0.45
7	60.10	59.41	59.17	- 0.93	- 0.69
8	60.58	59.75	59.52	- 1.06	- 0.83
9	59.43	60.17	60.13	0.70	0.74
10	59.47	60.07	59.54	0.07	0.6
11	59.50	60.62	60.93	1.43	1.12
12	59.58	60.23	60.10	0.52	0.65
13	59.50	60.36	59.45	- 0.05	0.86
14	59.53	60.59	60.41	0.88	1.06
15	59.31	60.64	59.07	- 0.24	1.33
16	59.18	59.99	59.28	0.10	0.81
17	59.25	60.70	59.75	0.50	1.45
18	59.25	60.41	60.44	1.19	1.16
19	59.42	60.46	60.44	1.19	1.16
20	59.50	60.32	59.78	0.28	0.82
21	59.52	60.03	59.54	0.02	0.51
22	59.58	59.63	59.01	- 0.57	0.05
23	59.55	59.90	58.86	- 0.69	0.35
24	59.54	60.21	58.74	- 0.80	0.67
25	59.51	60.44	60.55	1.04	0.93
26	59.49	60.26	59.80	0.31	0.77
27	59.53	60.56	59.78	0.25	1.03
28	59.56	60.55	59.23	- 0.33	0.99

[REFERENCES]

- [1] 张平民, 陈金清, 尹周澜, 等. 到砂状氧化铝生产过程首槽温度控制预测的准理论模型[J]. 中国有色金属学报, 2001, 11(5): 886 - 889.
- ZHANG Ping-min, CHEN Jin-qing, YIN Zhou-lan, et al. Sub-theory model about prediction of first trough temperature in sandy alumina production[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2001, 11(5): 886 - 889.
- [2] Broen N. Secondary nucleation of aluminium tri-hydroxide kinetics and mechanism[A]. Light Metals[C]. Penisywania: Metallurgical Soc of AIME, 1977. 1 - 4.
- [3] Crama W J, Visser J. Modelling and computer simulation of alumina trihydrate precipitation[A]. Light Metals[C]. Penisywania: Miners, Metals and Materials Soc(TMS), 1994. 73 - 82.
- [4] 毕诗文, 薛红, 杨毅红, 等. 拜尔法铝酸钠溶液分解动力学[J]. 中国有色金属学报, 1998, 8(1): 131 - 134.
- BI Shi-wen, XUE Hong, YANG Yi-hong, et al. Kinetics of decomposition of Bayer sodium aluminate solution[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 1998, 8(1): 131 - 134.
- [5] 杨重愚. 氧化铝生产工艺学[M]. 北京: 冶金工业出版社, 1993. 20 - 31.
- YANG Zhong-yu. Process Technology of Alumina[M]. Beijing: Metallurgical Industry Press, 1993. 20 - 31.
- [6] 胡玉波, 甘国耀. 砂状氧化铝的粒度控制及其分析法[J]. 有色金属(冶炼部分), 1999(6): 19 - 22.
- HU Yu-bo, GAN Guo-yao. Control and analytical method of the particle size of sandy alumina[J]. Nonferrous Metals(Matallurgy fascicule), 1999(6): 19 - 22.
- [7] Kumar S, Bautista, Renato G. Study of growth kinetics and mechanism of precipitation by Bayers process[A]. Light Metals[C]. Penisywania: Miners, Metals and Materials Soc(TMS), 1994. 47 - 51.
- [8] Gristol B, Garner B, Soirat A. Precipitation particle size control[A]. Light Metals[C]. Penisywania: Miners, Metals and Materials Soc(TMS), 1999. 71 - 76.
- [9] LI Wang-xing. Influence of decomposition temperature on resolution ratio of crystal seed[A]. Light Metals[C]. Penisywania: Miners, Metals and Materials Soc(TMS), 1998(5): 14 - 18.
- [10] Kumar S, Gautista R G. A study of growth kinetics and mechanism of alumina precipitation by Bayers process[A]. Light Metals[C]. Penisywania: Miners, Metals and Materials Soc(TMS), 1994. 47 - 51.
- [11] Steemso M L, White E T. Modelling of the Bayer alumina precipitation[A]. The Eleventh Australian Chemical Engineering Conference[C]. Australian, Barton, 1983. 473 - 483.
- [12] Audet D R, Larocque J E. Development of model for prediction of productivity of hydrate precipitation[A]. Light Metals[C]. Penisywania: Metallurgical Soc of AIME, 1989. 21.

Prediction of first trough temperature with sub-theory model in sandy alumina production

XIAO Zhong-liang, CHEN Qi-yuan, ZHANG Ping-min, YIN Zhou-lan, CHEN Jin-qing
(College of Chemistry and Chemical Engineering, Central South University, Changsha 410083, China)

[Abstract] According to the practice of sandy alumina production, the surface area of seed is a variable, which is considered to be a constant in the original sub-theory model for the prediction of the first trough temperature. Due to the importance of the $\text{Al}(\text{OH})_3$ seed and feedback ratio, a quantitative relation between mass fraction of $\text{Al}(\text{OH})_3$ seed whose diameter is less than $45\text{ }\mu\text{m}$, and the distribution frequency is introduced. The model parameters can be obtained by using statistics regression. A software developed with C++ Builder about on-time calculation of the model parameters and the prediction of the first-trough temperature is proved to be reliably available in practice.

[Key words] sandy alumina; temperature control; sub-theory model

(编辑 陈爱华)