

文章编号: 1001-0920(2004)01-0111-03

铝酸钠溶液成分浓度在线测定系统数学模型的建立与求解

黄迎春, 李新光, 路铁桩, 张石, 张平

(东北大学 信息科学与工程学院, 辽宁 沈阳 110004)

摘要: 以铝酸钠溶液成分在线浓度测量系统的设计为背景, 讨论了铝酸钠溶液成分的三温三电导数学模型的建立与求解问题。以此为核心技术的铝酸钠溶液成分在线实时测量系统, 在工业现场的实际应用中取得了较好的运行效果。

关键词: 铝酸钠溶液; 在线浓度测量系统; 三温三电导

中图分类号: TM 93 **文献标识码:** A

Model and resolution of the on-line system for measuring the densities of the composition of sodium aluminum solution

HUANG Ying-chun, LI Xin-guang, LU Tie-zhuang, ZHANG Shi, ZHANG Ping

(School of Information Science and Engineering, Northeastern University, Shenyang 110004, China)

Correspondent: HUANG Ying-chun, E-mail: welcomspring@163.com

Abstract: Based on the design of the on-line system for measuring the densities of the composition of sodium aluminum solution, a three-temperature three-conductivity mathematical model of the system is established and its a resolution is given. The practical application of the on-line system in industry shows the effectiveness.

Key words: sodium aluminum solution; on-line system for measuring the densities; three-temperature three-conductivity

1 引言

铝酸钠溶液成分浓度在线测定在拜耳法生产氧化铝的过程中起着非常重要的作用。铝酸钠溶液的主要化学成分是 NaOH , Al_2O_3 和 Na_2CO_3 。目前, 铝酸钠溶液的成分分析主要采用人工定时取样、化验室试剂滴定分析的方法。这种方法取样的时间间隔长、滞后大, 人为因素较多, 对及时指导生产十分不利。因此, 采用自动化的过程分析仪器在线实时测量铝酸钠溶液的化学成分浓度, 具有重要的实际意义。

本系统主要由四大部分构成, 即: 取样分析子系统、仪表子系统、可编程控制器 (PLC) 控制子系统、工控机及其外部设备子系统。取样分析子系统主要由取样分析柜构成, 它从现场铝酸钠溶液槽顶取得

铝酸钠溶液的样品, 采用水冷及混合的方法获得温度和电导信号; 仪表子系统将测取的温度和电导率信号进行显示并变送输出; PLC 控制子系统将模拟信号转换成数字信号并送至上位机; 工控机及其外部设备子系统根据数字信号计算出铝酸钠溶液浓度的浓度, 并完成浓度的实时显示, 实时曲线绘制, 历史数据查询, 历史数据保存以及报表打印。

系统采用三温三电导法, 即根据 NaOH 浓度, Al_2O_3 和 Na_2CO_3 的浓度和温度以及溶液的电导率诸因素, 通过统计回归的方法建立数学模型。建模的依据是铝酸钠溶液的电导率取决于溶液主要成分的浓度和温度。通过对相同的溶液在 3 个不同温度下测量出 3 个不同的电导率, 采用数值分析的方法便

收稿日期: 2002-09-29; 修回日期: 2002-11-19

作者简介: 黄迎春(1976—), 男, 辽宁瓦房店人, 硕士, 从事溶液成分浓度检测、粉尘防爆检测的研究; 李新光(1957—), 男, 山西定襄人, 副教授, 博士, 从事粉体检测与控制、智能化仪器仪表开发的研究。

可在线求出 3 个浓度

2 模型的建立

2.1 三温三电导法

三温三电导法是在双温双电导法的基础上提出的一种测量铝酸钠溶液浓度的新方法 所谓双温双电导法,是指利用 NaOH 浓度 c_k , Al_2O_3 浓度 c_a 和温度 t , 采用正交回归法建立三因子电导率数学模型

$$\begin{cases} c_1 = f(t_1, c_k, c_a), \\ c_2 = f(t_2, c_k, c_a). \end{cases} \quad (1)$$

双温双电导法忽略了变化范围较小的 Na_2CO_3 浓度对溶液电导率的影响, 计算出的化学成分浓度值准确性受到一定的限制^[1]. 三温三电导法区别于双温双电导法的关键是利用 c_k, c_a, c_c 和 t 四因子建立数学模型, 充分考虑了 Na_2CO_3 浓度对溶液电导率的影响, 因而更加准确 其数学模型为

$$\begin{cases} c_1 = f(t_1, c_k, c_a, c_c), \\ c_2 = f(t_2, c_k, c_a, c_c), \\ c_3 = f(t_3, c_k, c_a, c_c). \end{cases} \quad (2)$$

2.2 实验建模

数学模型的建立需要进行实验, 其步骤如下:

1) 根据三温三电导法的测量原理, 确定试验的因子为 c_k, c_a, c_c, t 根据工业现场铝酸钠溶液的实际情况, 确定 4 个因子的变化范围

2) 在诸因子的变化范围内, 选取具有代表性的若干点; 然后利用工业现场的铝酸钠溶液作为种子, 调配成所需的溶液; 进而进行温度和电导率的测量, 得出不同成分浓度溶液的温度和电导率 这样便获得了 n 组独立观测值(即样本).

3) 根据试验结果, 并利用正交回归原理, 得到如下回归方程:

$$\begin{aligned} c = & p_0 + p_1c_k + p_2c_a + p_3c_c + \\ & p_4t + p_5c_kc_a + p_6c_kc_c + p_7c_kt + \\ & p_8c_ac_c + p_9c_at + p_{10}c_ct + \\ & p_{11}c_k^2 + p_{12}c_a^2 + p_{13}c_c^2 + p_{14}t^2. \end{aligned} \quad (3)$$

根据氧化铝工业标准, 苛性比定义为铝酸钠溶液中 NaOH 与 Al_2O_3 的摩尔比 换算成浓度后, 可表示为 $a_k = 1.645c_k/c_a$ 则式(3)可改写成

$$\begin{aligned} c = & p_0 + p_1c_k + p_2a_k + p_3c_c + \\ & p_4t + p_5c_k a_k + p_6c_kc_c + p_7c_kt + \\ & p_8a_kc_c + p_9a_kt + p_{10}c_ct + \\ & p_{11}c_k^2 + p_{12}a_k^2 + p_{13}c_c^2 + p_{14}t^2. \end{aligned} \quad (4)$$

2.3 模型检验

在求解回归方程前, 回归模型只是一种假设; 在

求出回归方程后, 还要对其进行统计检验, 以确定回归方程是否具有实际意义^[2].

在回归方程(3)中, 如果方程不成立, 则给出检验假设

$$H_0: p_1 = p_2 = \dots = p_{14} = 0 \quad (5)$$

数据总的偏差平方和为

$$\begin{aligned} S_T = & \sum (y_i - \bar{y})^2 = \\ & \sum (y_i - \hat{y})^2 + \sum (\hat{y} - \bar{y})^2 = S_e + S_R, \end{aligned} \quad (6)$$

其中

$$S_e = \sum (y_i - \hat{y})^2.$$

当假设(5)为真时, 则选择统计量

$$F = \frac{S_R/p}{S_e/(n-p-1)} \sim F(p, n-p-1). \quad (7)$$

按照一般显著性的程序, 在给定的显著性水平 α 下, 当 $F > F_{1-\alpha}(p, n-p-1)$ 时, 则拒绝假设(5), 即认为回归方程(3)成立

3 模型的数值求解

根据式(2)和(3), 可确定如下非线性方程组:

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2, x_3) = 0, \\ f_2(x_1, x_2, x_3) = 0, \\ f_3(x_1, x_2, x_3) = 0 \end{cases} \quad (8)$$

方程组(8)可简写为

$$F(x) = [f_1(x), f_2(x), f_3(x)]^T = 0, \quad (9)$$

其中 $x = (x_1, x_2, x_3)^T$.

类似于一元方程的牛顿迭代法^[3], 可构造出方程组(8)的牛顿迭代法 现推导如下:

设 x^* 是方程(8)的解, $x^{(k)}$ 是某个迭代值 用点 $x^{(k)}$ 处的一阶台劳展开近似每个分量函数值 $f_i(x^*) = 0$, 则有

$$\begin{aligned} 0 = & f_i(x^*) \\ f_i(x^{(k)}) + & \sum_{j=1}^3 \frac{\partial f_i(x^{(k)})}{\partial x_j} (x_j^* - x_j^{(k)}), \\ & i = 1, 2, 3; \end{aligned} \quad (10)$$

或按式(9)用矩阵和向量表示为

$$\begin{aligned} 0 = & F(x^*) \\ F(x^{(k)}) + & F'(x^{(k)})(x^* - x^{(k)}). \end{aligned} \quad (11)$$

其中函数 $F(x)$ 的导数为

$$F'(x) = \begin{bmatrix} \nabla f_1(x)^T \\ \nabla f_2(x)^T \\ \nabla f_3(x)^T \end{bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial f_1(x)}{\partial \alpha_1} & \frac{\partial f_1(x)}{\partial \alpha_2} & \frac{\partial f_1(x)}{\partial \alpha_3} \\ \frac{\partial f_2(x)}{\partial \alpha_1} & \frac{\partial f_2(x)}{\partial \alpha_2} & \frac{\partial f_2(x)}{\partial \alpha_3} \\ \frac{\partial f_3(x)}{\partial \alpha_1} & \frac{\partial f_3(x)}{\partial \alpha_2} & \frac{\partial f_3(x)}{\partial \alpha_3} \end{bmatrix} \cdot \quad (12)$$

若矩阵 $F(x^{(k)})$ 非奇异, 则可从式(11)中解出 x^* 的近似值, 并把它作为下一次迭代值 于是得到

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - F(x^{(k)})^{-1}F(x^{(k)}), \quad k = 0, 1, \dots \quad (13)$$

该方法同牛顿迭代法一样, 具有二次局部收敛性^[3,4].

4 实际验证

在数学模型的求解过程中, 对于双温双电导模型, 一般只需 2~ 3 次迭代即可求得精度 $\epsilon = 0.01$ 的解, 可见数学模型的解法具有相当高的精度和相当快的收敛速度 但三温三电导模型的求解收敛速度

有时稍慢, 这时可采用如下方法解决:

1) 首先建立如式(1)所示的双温双电导数学模型, 对其进行求解, 可以很快解出 c_k 和 c_a ;

2) 选取三温三电导中某个温度 t 及其对应的电导率 c , 将 c_k 和 c_a 代入三温三电导回归方程(3), 即可解出 c_c , 其公式为

$$c_c = \frac{-e_1 \pm \sqrt{e_1^2 - 4e_2e_0}}{2e_2} \quad (14)$$

其中

$$\begin{aligned} e_0 &= p_0 + p_1c_k + p_2c_a + p_4t + p_5c_kc_a + p_7c_kt + p_9c_at + p_{11}c_k^2 + p_{12}c_a^2 + p_{14}t^2 - c, \\ e_1 &= p_3 + p_6c_k + p_8c_a + p_{10}t, \\ e_2 &= p_{13} \end{aligned}$$

在现场应用中, 将一个月来模型部分求解结果与化验室分析结果进行比较, 详见表 1.

表 1 在线测得的数据与化验室分析结果比较

组号	化验室分析结果			模型求解结果			相对误差 /%		
	c_k	c_a	c_c	c_k	c_a	c_c	c_k	c_a	c_c
1	245.2	130.6	28.8	248.1	131.4	30.2	1.18	0.61	4.90
2	254.1	136.5	32.2	253.9	134.6	32.0	-0.07	-1.40	-0.62
3	251.5	133.9	26.8	249.8	132.0	29.3	-0.70	-1.41	9.32
4	252.3	136.8	36.0	257.6	139.7	34.2	2.10	2.12	-5.00
5	254.0	132.6	34.6	259.1	135.2	33.1	2.11	1.96	-4.33
6	264.0	137.8	30.2	264.6	138.1	31.9	0.23	0.22	5.63
7	248.0	131.9	27.2	245.9	133.9	26.3	-0.85	2.09	-3.31
8	244.0	135.0	31.3	242.9	137.2	32.5	-0.45	1.63	3.83
9	234.2	133.4	33.5	237.5	133.8	32.9	1.41	0.30	-1.79
10	236.1	132.5	27.8	234.1	134.2	29.1	-0.85	1.28	4.68

从表 1 可以看出, 本系统在线测得的数据中, c_k 的相对误差为 $\pm 2.2\%$, c_a 的相对误差为 $\pm 2.2\%$, c_c 的相对误差为 $\pm 9.4\%$, 满足现场工艺的要求 (c_k 为 $\pm 3.0\%$, c_a 为 $\pm 2.5\%$, c_c 为 $\pm 10\%$).

5 结 语

本文在双温双电导法的基础上提出了三温三电导法, 给出了三温三电导法的数学模型, 介绍了模型的数值求解方法. 本系统可实现铝酸钠溶液成分浓度的准确检测, 具有一定的推广价值

参考文献(References):

[1] 毕诗文, 李春荣, 马绍光. 铝酸钠溶液电导率数学模型的研究[J]. 轻金属, 1984, 56(6): 9-12

(Bi Shiwen, Li Chun-rong, Ma Shao-guang. The research for mathematical model of the sodium aluminum liquor[J]. *Light Metal*, 1984, 56(6): 9-12.)

[2] 魏宗舒. 概率论与数理统计教程[M]. 北京: 高等教育出版社, 1998

[3] 李亚琼. 非线性方程组的解法[J]. 经济数学, 1997, 14(1): 102-105
(Li Ya-qiong. The numerical solutions of nonlinear equations[J]. *Economy Mathematics*, 1997, 14(1): 102-105.)

[4] More J J, Cosnard M Y. Numerical solutions of nonlinear equations[J]. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 1979, 5(6): 64-85