

基于己内酰胺工艺流程优化的半实物工厂运行仿真系统设计

万欢

杭州百子尖科技股份有限公司西安分公司

摘要: 构建面向己内酰胺工艺中段（肟化至精制段）的半实物仿真系统，集成虚拟建模、PLC 控制与 OPCUA 通信机制，开展多维变量闭环控制与异常工况响应测试。通过 Simulink 建立包含反应动力学、热力学与分离模型的仿真模块，结合 S7-1500 控制器配置与 HMI 人机交互界面，形成虚实融合闭环控制体系。试验结果显示，系统在温度、pH 值与纯度控制方面响应时间分别控制在 198.7 ~ 367.8s，超调幅度不超过 1.6℃，通信延迟在 76.9ms 以内时性能最优，验证了系统在稳定性、实时性与可拓展性方面的综合适配能力。

关键词: 己内酰胺工艺；半实物仿真；闭环控制；OPCUA 通信；动态建模

针对传统仿真验证手段存在虚实脱节、控制反馈滞后与评估手段有限等问题，构建具备实际控制器参与的半实物仿真系统已成为工艺流程优化与控制策略验证的重要方向。本文设计一套覆盖己内酰胺第 2 ~ 第 5 工艺段的半实物仿真系统，从控制器配置、工艺建模、数据通信与交互机制 4 个维度进行系统性构建。

1 己内酰胺工艺流程与控制需求分析

1.1 工艺路径概述

己内酰胺工业生产主要采用环己酮肟法，以环己酮为原料，经肟化、重排、中和及精制等步骤转化为目标产物。其中，原料氧化段工艺条件苛刻，控制系统参与度低，本文半实物仿真系统聚焦第 2 ~ 第 5 工艺段的建模与控制策略优化^[1]。

肟化段实现环己酮与羟胺的反应，生成环己酮肟，需稳定控制 pH 值与温度。重排段在酸性条件下完成贝克曼重

排反应，温控精度直接影响转化率。中和萃取段调节反应液 pH 值，分离副产物，提升后段处理效率。精制段采用蒸馏或结晶工艺，控制塔温与冷却速率以提高产品纯度。

1.2 控制关键点与易错因素分析

肟化段中，反应速率受 pH 值和温度双重影响，羟胺过量易导致副反应生成不饱和副产物，进料比例失衡将引起反应效率波动。混合速度不足或传热滞后会造成局部浓度差异，影响肟化物生成速率与质量稳定性，需实施闭环 pH 值与温度控制以保证反应连续性。

贝克曼重排段为强放热过程，温度升高过快易引发副反应或设备超温停机。催化剂浓度控制精度直接影响重排转化率，酸用量偏差亦会造成后续中和负担加重。中和萃取段中，pH 值调节需快速响应，搅拌强度与液相比比例变化会影响分相效果。精制段控制中，塔温塔压联动调节复杂，温差波动将引起纯度下降或回流紊乱，控制系统须具备动态响应与稳定补偿能力。

2 半实物仿真系统设计

2.1 虚实融合的分层结构构建

半实物仿真系统采用四层结构，包括虚拟模型层、实物控制层、通信接口层与人机交互层。虚拟模型层基于 Simulink 或 Modelica 构建各工艺段动态模型，涵盖传质、传热与反应动力学。实物控制层由 PLC 控制器与 I/O 模块构成，执行逻辑判断与模拟量处理。通信接口层通过 OPCUA 协议实现模型与控制器之间的数据双向传输，分层结构框架如图 1 所示。

人机交互层通过上位机界面完成参数设定、状态显示与工况切换。各层

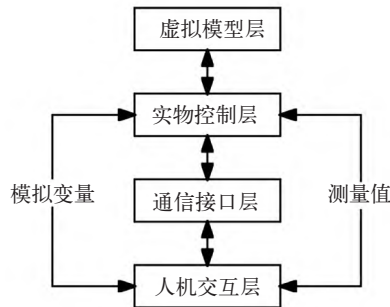


图 1 分层结构框架

之间经由变量接口构建数据通路,虚拟模型输出经通信层传入控制器,控制结果返回模型与交互界面,构成闭环。系统支持模块化扩展,适用于多工艺段协同仿真与策略验证。

2.2 控制器配置与控制程序逻辑

为满足己内酰胺工艺各关键反应段的过程控制与数据交互需求,半实物仿真系统需配置具备高稳定性、精确调节能力与工业通信兼容性的控制硬件。根据工艺流程中对温度、pH 值、流量、液位与搅拌等变量的动态响应特性,系统选用模块化 PLC 控制器为核心,辅以高精度 I/O 单元和工业通信设备,构建可扩展的控制层硬件平台。表 1 列出了主要控制设备的型号及其功能配置^[2]。

系统硬件设计围绕己内酰胺 2 ~ 5 段关键工艺段的温度、pH 值、加料流量、搅拌速度与分相状态等控制变量展开配置。PLC 主站选用 S7-1500,内部配置多个 PID 调节模块,实现对连续变量的精细控制。

控制模块分为 4 个功能单元,与各工艺段物理变量绑定:1) 脞化段温度与 pH 值联合控制;2) 贝克曼重排段反应温度与酸浓度联控;3) 中和萃取段搅拌速率与 pH 值闭环控制;4) 精制段的塔温、塔压联动调节。

模拟输入信号通过 SM1231AI 模块接入,采集各段温度传感器、在线 pH 值计、电导仪及液位计数据,所有采集信号经滤波与线性转换后送入控制逻辑处理。输出信号由 SM1232AQ 模块生成,

用于调节调速泵、电加热器、变频搅拌器等执行单元。数字量输入输出模块用于工艺限位判断、电磁阀开关与安全联锁逻辑。

PLC 与 HMI 面板连接形成完整人机交互界面,支持手动 / 自动模式切换、设定参数录入与报警记录功能。系统通过工业以太网与 OPCUA 模块建立与上层仿真平台的通信通道,实现实时变量写入与反馈响应^[3]。

2.3 工艺流程虚拟建模设计

整个建模过程围绕“反应速率—控制变量—产品质量”的关系链进行系统设计,分别对脞化、贝克曼重排以及中和精制三个关键工艺段进行分段建模,并在 Simulink 中集成仿真运行。首先针对脞化反应段,反应物为环己酮与羟胺盐酸,主要生成物为环己酮脞。该反应为典型的液相同相放热反应,其反应动力学可表示为:

$$r_1 = k_1 C_{C=O} C_{NH_2OH}, \quad k_1 = A_1 e^{-E_1/RT} \quad (1)$$

其中, r_1 为单位体积内反应速率 (mol/L · s); $C_{C=O}$ 与 C_{NH_2OH} 分别表示环己酮与羟胺的摩尔浓度 (mol/L); k_1 为速率常数,符合阿伦尼乌斯关系; A_1 为频率因子; E_1 为反应活化能 (J/mol); R 为通用气体常数; T 为反应温度 (K)。模型参数通过拟合试验数据获得。通过仿真平台设定初始物料浓度与温控区间,模型可实时输出转化率与反应速率曲线。模型在贝克曼重排反应段进一步引入能量守恒方程,建立热调节反馈机

制。该段反应发生于酸性条件下,环己酮脞经重排生成己内酰胺,反应过程强烈放热,若温控失效易发生副反应导致产率下降或设备损伤。根据反应热平衡关系,可得系统热量变化表达式:

$$\rho C_p V \frac{dT}{dt} = -\Delta H_2 \cdot r_2 - Q_{loss} \quad (2)$$

其中, ρ 表示反应混合物密度 (kg/m³), C_p 为比热容 (J/kg · K); V 为反应体积 (m³); ΔH_2 为单位摩尔反应焓变 (J/mol); r 为反应速率; Q_{loss} 为单位时间热量损失。该模型不仅考虑主反应放热,还叠加了换热系统的热交换能力,对温度波动响应更加敏感。仿真中设定不同酸浓度、冷却水流速与起始温度,分析反应热释放与温控调节的动态协同效果^[4]。

在中和与精制段,主要涉及副产物中和反应、液液分相萃取及后续结晶与蒸馏提纯环节。其中, pH 值控制直接影响分相界面稳定性与目标物转移效率,其控制模型可表示为:

$$\frac{dpH}{dt} = -K_p (pH - pH_{set}) - K_d \frac{d(pH)}{dt} \quad (3)$$

其中, pH 值为当前体系的酸碱值, pH_{set} 为设定目标值, K_p 与 K_d 分别为比例与微分调节系数。中和段以弱碱液滴定强酸体系,模型输出用于控制碱液加入速率,实现稳定中和反应。在精制段,采用简化的多板塔蒸馏模型,液气两相摩尔分率满足平衡关系:

$$y_i = K_i x_i \quad (4)$$

其中, x_i 、 y_i 分别为第 i 塔板液相与气相摩尔分率; K_i 为平衡常数。蒸馏塔模型输入包括进料浓度、塔顶回流比与加热功率,输出为塔顶与塔底物料纯度,用于评估回收率与产品品质。3 个模型模块分别覆盖了反应动力学控制、热力学行为反馈与物料分离过程,各模型均在 Simulink 平台中建立并通过接口参数定义与实物控制器进行对接。通过模块组合,构建了自下而上、可扩展的虚拟仿真体系,支持单段独立调试与

表 1 控制器与核心硬件选型表

设备名称	型号 / 系列	功能描述
PLC	SiemensS7-1500	执行逻辑运算、PID 控制、I/O 管理
模拟量输入	SiemensSM1231AI	采集温度、pH 值、电导率、浓度等信号
模拟量输出	SiemensSM1232AQ	控制信号至加热器、搅拌器、泵阀
数字量输入	SiemensSM1221DI	限位开关、液位传感器、报警信号
数字量输出	SiemensSM1222DO	控制电磁阀、报警灯、起动 / 停止按钮
HMI	SiemensKTP700Basic	参数设定、状态监控、报警提示
交换机通信模块	工业以太网交换机 +OPCUA 网关	实现控制层与建模平台数据互通

全流程动态联调^[5]。

2.4 通信与交互机制设计

通信与交互机制基于 OPCUA 协议构建，采用工业以太网实现 PLC 与仿真平台之间的双向数据传输，数据格式为结构化 JSON，刷新周期为 100 ms，支持变量命名空间分隔与实时订阅。人机交互界面通过 HMI 实现参数设定、状态监控、报警提示与模式切换，支持手动与自动控制，具备操作权限管理与运行记录功能，确保系统通信高效稳定、交互灵活安全。

3 系统应用验证与性能分析

3.1 工况构建与试验场景设计

为验证半实物仿真系统在己内酰胺关键工艺段中的控制性能与运行稳定性，选取脬化、重排与精制三段典型反应过程，设定温度扰动、进料浓度变化及 pH 值异常三个干扰场景。试验中设定进料浓度在 $\pm 10\%$ 范围内波动，温控系统施加 3℃ 随机扰动，模拟真实生产中原料波动与热负荷扰动的复合作用。各段控制变量均启用闭环 PID 调节，仿真时间设定为 3 600 s，以观测系统在起动、扰动响应与稳态维持阶段的动态表现。

分别设定 OPCUA 通信刷新周期为 50 ms、100 ms 与 250 ms，记录系统变量同步滞后时间、数据丢包率与误差累积程度。在此基础上，观察仿真模型的实际响应变化及其对控制指令反馈的影响，并分析交互界面在不同负载下的响应流畅度与报警触发延迟。

3.2 控制策略仿真响应与数据分析

通过上述扰动场景测试，系统在保持产品质量稳定性方面表现良好，各控制段闭环响应时间控制在合理范围内，但部分变量在大幅扰动下仍表现出微弱滞后，特别是在温度突升场景下出现 0.6 ~ 1.4℃ 的超调现象，结果见表 2。

系统控制响应基本满足工艺需求，但温度与纯度控制在扰动场景下存在短

表 2 不同控制变量在干扰下的仿真响应特征与调节效果统计

控制对象	目标 设定值	最大 偏差值	超调 幅度	达稳 时间 /s	稳态 误差
脬化段温度	68.0℃	69.2℃	+1.2℃	215.3	$\pm 0.3℃$
pH 值控制 (脬化)	6.8	7.05	0.25	198.7	± 0.15
重排段温度	78.5℃	80.1℃	+1.6℃	243.9	$\pm 0.6℃$
中和段 pH 值	7.2	7.6	0.4	190.4	± 0.2

表 3 测试结果

指标 类别	OPCUA 刷 新周期 /ms	通信 延迟 /ms	数据丢包 率 (%)	控制信号 同步误差 /ms	报警响应 时间 /s	HMI 帧率	系统稳定 性判定
设置 1	50	42.6	0.08	31.3	1.24	27.6	稳定
设置 2	100	76.9	0.15	63.7	1.87	25.3	稳定
设置 3	250	142.4	0.33	118.9	2.75	21.5	较不稳定

时超调或波动，揭示出模型热耦合响应与控制器协同匹配存在滞后性，且高频控制变量在通信刷新间隔较大时表现出误差放大趋势。

3.3 系统运行稳定性与通信可靠性验证

针对系统运行状态与通信机制进行长时间仿真运行测试（持续运行 6 h），记录关键指标，如数据传输成功率、平均通信延迟、误差累积量及交互响应时间，结果见表 3。

测试结果表明，当刷新周期设定在 100 ms 以内，系统通信滞后可控，数据误差与响应延迟均处于可接受范围内；而当周期延长至 250 ms 以上，控制信号同步误差与报警响应延迟明显上升，影响闭环实时性。OPCUA 在高频刷新模式下对 HMI 负载增加明显，部分数据窗口在长时间运行后存在轻微卡顿现象，提示需优化人机界面的多线程数据刷新策略。

4 结语

系统在应对多变量耦合与动态扰动方面表现出良好的控制稳定性与调节精度，关键工艺段控制偏差可控，超调幅度与稳态误差符合工业控制容限，HMI 界面具备良好的交互灵敏度与运行适配性。通信测试结果揭示了刷新周期对控制信号同步与报警响应的显著影响，指出需进一步优化 OPCUA 高频通信下的

界面渲染效率与控制同步调度策略。

参考文献：

[1] 李娜. 面向化工企业智能操控方向的人才培养解决方案探索与实践[J]. 河南化工, 2022, 39(4): 60-62.

[2] 张旭阳, 刘可, 戴钧明, 等. 聚酰胺 6 活性阴离子合成技术的研究进展[J/OL]. 现代纺织技术, 1-11[2025-06-05]. <https://doi.org/xx.xxxx/xxxxxx>.

[3] 段付岗. 中和结晶法替代蒸发结晶法副产己内级硫酸铵的可行性分析[J]. 中氮肥, 2025(3): 1-4.

[4] 李卓, 张武龙, 侯风云. 炉内脱硫用于己内酰胺脬化废水焚烧处置的工艺研究[J]. 化学工程与装备, 2025(4): 58-60+27.

[5] 王帅, 李了艳, 段广宇, 等. 轻质油改性起泡剂环己二醇单戊醚的起泡与浮选性能[J]. 有色金属 (选矿部分), 2025(2): 168-174.