

石油炼制中的参数辨识与在线 仿真耦合建模及其应用

陈福厚

(黑龙江大学应用数学研究所, 哈尔滨)

杜长太 赵建华

(黑龙江省计算机应用开发研究中心, 哈尔滨)

摘 要

本文方法先从石油化工机理出发, 确定动态模型的结构, 再采用参数辨识与在线仿真耦合方法建模。本文介绍这种建模方法和它的应用效果。

关键词: 耦合建模; 在线仿真; 参数辨识

一、引 言

在平稳操作的基础上实现催化裂化装置最优闭环控制是令人向往的目标。但是, 由于在线检测手段、数学模型及其实现算法等原因, 要实现却是很困难的。为此, 我们开展了在线指导系统的研究, 并运用参数辨识与在线仿真耦合方法, 建立了生产工艺动态模型, 在一定意义下解决了集总反应动力学模型不能在线运行的一些障碍, 成功地开发了催化裂化装置“人-机实时优化”系统。

随着仿真技术的发展以及各工业部门提高生产率的要求, 仿真技术得到了广泛应用。我们在剖析催化裂化工艺复杂性之后, 提出了将数字仿真技术在线地应用在模型验证和最优化设计上, 并运用参数辨识重新复现系统模型的方法代替蒙特-卡洛等传统的仿真控制^[1], 获得比较满意的建模效果。

二、耦合建模方法

为了在数字机上仿真一个动力学系统, 首先要建立复现这个系统的模型。但是, 由于原料组份十分复杂, 非线性操作条件较多且彼此相互关联, 同时操作条件又受到设备和工艺的约束, 再加上反应机理和伴随的传质、传热过程又不十分清楚, 因而操作条件

和产品质量、数量的依赖关系就难以定量地描述,这样,要用传统的动力学模型来复现这个系统并求解这个模型,就存在不少难以克服的困难。我们在综合模型法、黑箱法、经验法的长处之后,提出了建立拟集总动力学等模型来复现该系统,从而确定了动态模型的结构,再采用参数辨识和数字仿真耦合建模方法,实现了优化策略的寻求和仿真模型的形成同步在线进行,不仅建立了能够满足生产要求的催化裂化工艺过程指导模型,而且也寻找出了在线应用数字仿真技术的途径。

该方法的出发点是:

(1) 不存在“真实的”终极模型,只存在模型结构相对合理,参数相对稳定的“目标模型”,即当原料性质和装置因素变化不大时,处于平衡状态的生产工艺过程应对应模型集合中的一个相对准确和真实的工艺模型,此时模型的参数相对过渡过程,模型参数是静态的。而平衡状态改变时,这种相对真实准确的模型就可能随之改变。

(2) 由于人们对于建立精确模型的知识是不完全的,却又要对实际问题求出切实可行的解,所以建立模型的过程不是单纯的具有“数学算法”的演绎过程,而是一个包括使用算法、运用经验在内的“智能”过程。

本文介绍的耦合方法系指参数辨识控制在线仿真,在线仿真验证模型的反复交错过程。该方法可以通过如下两个方面体现。

1. 寻求优化运行参数

由于再生器烟气成份数据在线采集困难和建立其他模型的需要,所以要求出一批如:焦碳产率、氧含量等运行参数。为此,我们建立如下动态烟气计算模型:

$$\begin{aligned}
 y_1 &= \frac{0.21 - x_2}{\ln\left(\frac{0.21}{x_2}\right)} \\
 x_1 &= f_1(U) \cdot x_7 \cdot y_1 \quad y_2 = f_2(U) \cdot y_1 \cdot \frac{x_1}{1 + x_5} \\
 y_3 &= f_3(U) \cdot y_1 \cdot \frac{x_1}{1 + x_5} \quad y_4 = f_4(U) \cdot x_5 \cdot \frac{x_1}{1 + x_5} \\
 y_5 &= \frac{f_5(U) \cdot y_2}{f_6(U) + y_2 + y_4} \quad y_6 = f_7(U) + \frac{y_2}{2} - \frac{y_4}{2} - \frac{y_5}{2} \\
 x_2 &= \frac{f_8(U) - \frac{y_2}{2} - y_3 - \frac{y_4}{2} - \frac{y_5}{2}}{y_6} \\
 x_3 &= \frac{y_2 - y_4}{y_6} \\
 x_4 &= \frac{f_9(U) - y_5}{y_6}
 \end{aligned} \tag{1}$$

$$x_5 = \frac{0.893 - 0.425(x_4 + x_2) - 0.257x_3}{x_3 + x_4}$$

$$x_6 = \frac{f_{10}(U) \cdot (3.78 + 0.242x_4 + 0.313x_3 - 0.18x_2)}{100 - x_2 - x_3 - x_4}$$

$$x_7 = \frac{f_{11}(U) \cdot x_6}{y_1}$$

约束方程:

$$\begin{aligned} 3\% < x_1 < 5.5\% \quad 0.2 < x_2 < 1.5 \quad 0 < x_3 < 0.5 \quad 15 < x_4 < 17.5 \\ 0.085 < x_5 < 0.11 \quad 0.18 < x_7 < 0.5 \quad x_2 + x_3 + x_4 < 18.5 \end{aligned} \quad (2)$$

其中 x_1 为焦炭产率1; x_2 为氧含量; x_3 为一氧化碳含量; x_4 为二氧化碳含量; x_5 为碳氢比; x_6 为焦炭产率2; x_7 为催化剂残碳; $y_i (i=1, \dots, 6)$ 为中间变量; $U = (u_1, u_2, \dots, u_{43})$ 为输入向量, 其中 $u_i (i=1, 2, \dots, 43)$ 为现场温度、压力、流量的采样数据或人工输入的化验数据; $f_i(U) (i=1, 2, \dots, 11)$ 为输入 U 的函数。

由于 U 是现场实时采集的数据, 噪声较大, 另一方面方程(1)为平衡模型, 灵敏度很高, 按常规解析方法或迭代解法, 解经常是发散的, 即不满足约束方程(2)。为了克服这一困难, 采用优化方法进行参数的辨识。

首先构造目标函数 $G(z)$:

$$G(z') = g_1 |x_2 - x'_2| + g_2 |x_5 - x'_5| + g_3 |x_3 - x'_3| + g_4 |x_6 - x_1| + c + g_5 O(z')$$

其中 $g_i (i=1, 2, \dots, 5)$ 为适当常数; $z' = [x'_2, x'_5, x'_7]^T$ 为初值; x_1, x_2, x_5, x_6, x_7 为计

算值; T 为向量转置号; $O(z')$ 为将 $X = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_7 \end{bmatrix}$ 代入模型(3)所产生的误差函数, c 的

取法在下面将给出。

建模方法:

设区域 $M = \{z : z = [x_2, x_5, x_7]^T \text{ 且 } x_2, x_5, x_7 \text{ 满足约束方程(2)}\}$

按在一个周期内分给烟气模型计算时间长度, 将 M 适当地划分为 N 个小区域, 每个小区域选一点 $[x'_2, x'_5, x'_7]^T$ 做为初始值代入方程(1), 求得 X 代入约束方程(2), 若满足则置 $c=0$, 否则置 c 为适当大常数, 并将 X 限幅, 使其满足约束方程; 同时还得到了 N 个目标函数的计算值 $G(z'_1), G(z'_2), \dots, G(z'_N)$ 。事实上, 求方程(1)的解相当于寻找(1)的不动点, 即求 $G(z')=0$ 的解。但由于现场数据是带有噪声的, 方程(1)实际上是随机方程, 所以求 $G(z')=0$ 的解实际意义不大, 且实现起来相当困难, 故取 $G(z'_i) = \min\{G(z'_1), \dots, G(z'_N)\}$ 作为最优, 与此对应的 z'_i 就作为近似解, 同时也作为下一周期的优选初值。以 z'_i 求得的 X (前已计算出)即为方程(1)的解。如果把上述运

行参数的化验数据在线的输入给计算机,立刻就绘出烟气仿真图,并以此验证模型的精度。如果满足仿真精度要求,模型即可交给系统使用;若不满足,继续在线仿真。

2. 建立生产过程的数学模型

本系统的基础模型是由我们建立的拟集总动力学模型^[2-4]:

$$\frac{da}{dX} = \frac{1}{1 + K_h C_{Ah}} \cdot \frac{P \cdot \overline{MW} \phi(t_c)}{S_{WH} \cdot R \cdot T} \cdot K \cdot a^{(N)}$$

其中 $a = (a_1, a_2, \dots, a_m)$ 为组份向量; $a^{(N)} = (a_1^{n_1}, a_2^{n_2}, \dots, a_m^{n_m})$ 为反应级数向量,

$$0 < n_i \leq 2,$$

$$K = \begin{pmatrix} k_{11} & & & & \\ k_{21} & k_{22} & & & \\ k_{31} & k_{32} & k_{33} & & \\ \dots & & & & \\ k_{m1} & k_{m2} & k_{m3} & \dots & k_{mm} \end{pmatrix} \quad 0$$

为反应速度常数矩阵; S_{WH} 为重时空速; $\overline{MW}$ 为混合汽体的平均分子量; $\phi(t_c)$ 为减活函数; t_c 为催化剂停留时间; K_h 为吸附系数; C_{Ah} 为原料和回炼油中重芳烃份数; R 为汽体常数; T 为反应温度; P 为反应压力。

当 $n_i = 1 (i = 1, 2, \dots, m)$ 时, 可以将上述模型改写成如下形式:

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= f_{10}(\cdot) + f_{11}(\cdot)x_1 \\ \dot{x}_2 &= f_{20}(\cdot) + f_{21}(\cdot)x_1 + f_{22}(\cdot)x_2 \\ &\dots \\ \dot{x}_m &= f_{m0}(\cdot) + f_{m1}(\cdot)x_1 + \dots + f_{mm}(\cdot)x_m \end{aligned} \quad (3)$$

其中 $f_{ij}(\cdot)$ $i = 1, 2, \dots, m, j = 0, 1, \dots, i$, 为输入向量 U 、 n 维未知参数 θ 和反应器原料入口高度 l 的函数, 而 $\theta = (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_n)$, θ_i , $1 \leq i \leq n$, 为原料或某种产品的反应速度常数或催化剂活性常数。

建模方法:

为了辨识参数 θ , 首先构造了如下目标函数 $G(\theta)$:

$$G(\theta) = \sum_{K=1}^P \alpha^K G^T X$$

其中 α 为遗忘因子; G 为权向量; 置 $X = [(x_1 - \hat{x}_1)^2, (x_2 - \hat{x}_2)^2, \dots, (x_m - \hat{x}_m)^2]^T$, x_i , $i = 1, 2, \dots, m$, 为已知实际状态, $\hat{x}_i$ 为 x_i 的估计值; P 为辨识所用数据组个数。

初值开始由经验选定, 设 $\theta^{(0)} = [\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_n]^T$. 取定积分区间 $[0, L]$ (反应器有效高度) 等分序列 l_i , $l_i - l_{i-1} = h$, 于是由欧拉方法^[5]有解:

$$\hat{x}_j(l_i) = \hat{x}_j(l_{i-1}) + h[f_{j0}(\cdot) + f_{j1}(\cdot) \hat{x}_1(l_{i-1}) + \dots + f_{jj}(\cdot) \hat{x}_j(l_{i-1})] \quad j=1,2,\dots,m; i=1,2,\dots,\frac{L}{h}$$

关于对参数 θ 的辨识^[8]，这里采用了目标函数 $G(\theta)$ 优选的方法：

取 $\theta_1^{(1)} = [\theta_1 + \delta_1, \theta_2, \dots, \theta_n]^T$ ， δ_1 为限定步长。

若 $G(\theta_1^{(1)}) < G(\theta^{(0)})$ ，则记 $\theta^{(0)} = \theta_1^{(1)}$ ，然后进行下步对 θ_2 的优选；若 $G(\theta_1^{(1)}) \geq G(\theta^{(0)})$ ，则令 $\theta_1^{(1)} = [\theta_1 - \delta_1, \theta_2, \dots, \theta_n]^T$ ，若新的 $G(\theta_1^{(1)}) < G(\theta^{(0)})$ ，则记 $\theta^{(0)} = \theta_1^{(1)}$ ，反之 $\theta^{(0)}$ 不变，由此就优选了 θ_1 。以此类推，优选 $\theta_2, \dots, \theta_n$ 。最后再取：

$$\theta^{(1)} = [\theta_1 + (RND(1) - 0.5) \cdot a_1, \dots, \theta_n + (RND(n) - 0.5) \cdot a_n]^T$$

其中 $a_1, a_2, \dots, a_n$ 是参数调整比例系数，是根据 θ_i 的大小选定的。

再用 $G(\theta^{(1)})$ 与 $G(\theta^{(0)})$ 比较，优者定为 $\theta^{(0)}$ ，以此作为新初值，再重复上述全过程，直至进行到本周期的规定时间。经过参数辨识和求解的反复过程，到本周期末与 $\theta^{(0)}$ 相对应的 $\hat{x}_j(j=1,2,\dots,m)$ 即作为模型的优化数值解。而 $x_j(j=1,2,\dots,m)$ 中的小部份可以通过在线采样计算出来，这样就能自动绘出它们的仿真图。

下面给出处理模型(3)耦合方法的流程图(ε 为参数 θ 搜索调整量)：

综上所述，该方法不仅克服了模型参数辨识和计算中发散的可能性，而且能够做到模型参数和系统仿真的准确性在每一个周期都有改善，比较有效地克服了动态模型不能适应系统变化的困难。

三、在线仿真效果

烟气仿真图是对四个主要参数：二氧化碳、一氧化碳、氧含量、残碳各在烟气所占的百分比进行在线仿真，其中实线为化验值，虚线为计算值，其仿真精度是误差小于15%，见现场应用拷贝图2，已经能够从整体上反映出趋势，达到实用要求，用户满意。

拟反应动力学模型仿真图是对几种主要石油产品：轻柴油、汽油、焦碳的收率以及转化率进行在线仿真，仿真精度可达到它们的总误差在2%~3%，见图3，满足仿真优化要求。

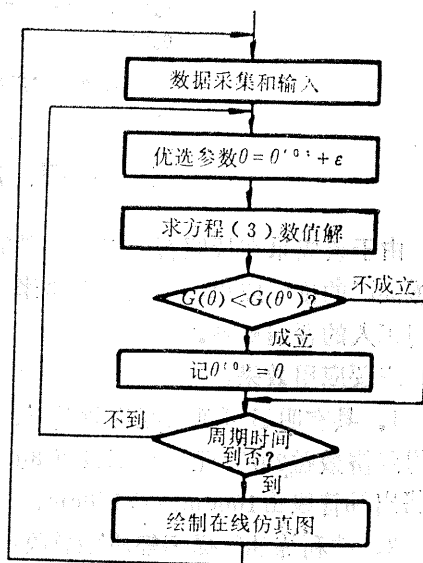


图1 处理模型(3)耦合方法流程图

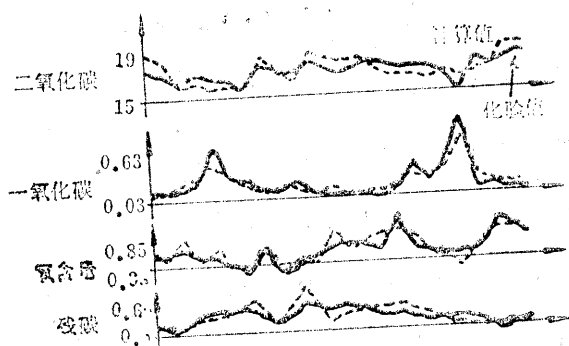


图 2 烟气在线仿真图

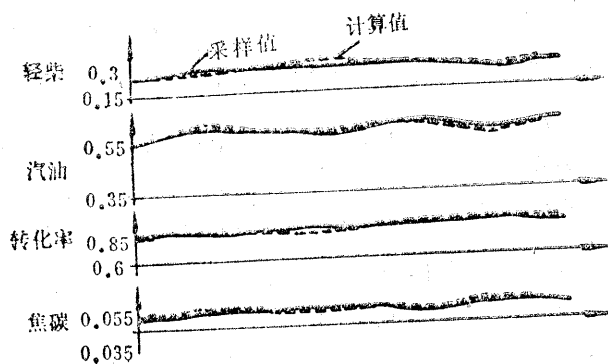


图 3 拟反应动力学模型在线仿真图

四、应用效果

由于该成果在抚顺石油二厂、胜利炼油厂、龙凤炼油厂的稳定运行以及在其它十七个炼油厂的推广应用，给老企业带来了生机，因此该系统受到技术人员、管理干部以及车间工人的普遍欢迎。

主要应用效果：

1. 具有明显可见的经济效益，抚顺石油二厂提高汽油收率1.34%，一个装置每年可取得经济效益207万元，全部投资 80 天收回；由于经常出现罐满“走副线”情况，车间已将出油管线由100cm改成150cm。

2. 胜利炼油厂提高轻质油总收率0.55%—0.80%，年经济效益400万元，全部投资一个月回收。

3. 龙凤炼油厂提高轻质油收率1.02%，年经济效益314万元。

参考文献

- (1) Korn, G. A., Wait, J. V., Digital Continuous System, Simulation, (1978).

- 〔2〕 Aikins, J. Prototypical Knowledge for Expert Systems Artificial Intelligence 20 (2): 163—210 Learuall, (1983).
- 〔3〕 石油炼制译丛, 4、5、11, (1985)
- 〔4〕 Weekman, V. W. Jr, and D. M. Nace Am. Inst. Chem. Eng. J. 16, 397, (1970).
- 〔5〕 华中工学院数学教研室、软件教研室编, 工程数学·算法语言和计算方法, 人民教育出版社, 北京 (1978).
- 〔6〕 DJ 华尔德, CS 皮特勒, 尤云程译, 优选法基础, 科学出版社, 北京, (1978).

The Modelling by Coupling Method of Parameter Identification and On-line Simulation in the Oil Refining and Its Applications

Chen Fuhou

(Heilongjiang University Institute of Applied Mathematics, Harbin)

Du Changtai, Zhao Jianhua

(Heilongjiang Applied Research Centre of Computer, Harbin)

Abstract

The basic point of this method is as follows. Firstly, the structure of a dynamic model is determined by analysing the mechanism of oil-chemical engineering; Secondly, the model is established by using coupling method of parameter estimation and on-line simulation. In this paper, the modelling method and its application effect are presented.

Key words—Modelling by coupled method; On-line simulation; Parameter identification