ПОДХОД К ПОСТРОЕНИЮ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ УСТАНОВОК

A. B. Макшанов¹, A. A. Mycaeв²

¹Специализированная инжиниринговая компания «Севзапмонтажавтоматика» 199155, Санкт-Петербург, пер. Каховского, д. 10 < Andrey Makshanov@szma.com

²Санкт-Петербургский институт информатики и автоматизации РАН 199178, Санкт-Петербург, 14-я линия ВО, д.39

<amusaev@szma.com>

УДК 665.63

А. В. Макшанов, А. А. Мусаев. Подход к построению математических моделей технологических установок // Труды СПИИРАН, Вып. 2, т. 2. — СПб.: Наука, 2005.

Аннотация. Рассмотрен новый подход к формированию математических моделей технологических установок. На его основе построена математическая модель управления технологическим процессом на установке каталитического риформинга нефтеперерабатывающего предприятия. Полученные математические и алгоритмические решения реализованы в виде системы поддержки принятия решений в интересах повышения эффективности управленческих решений руководящего и технического персонала — Библ. 3 назв.

UDC 665.63

A. A. Macshanov, A. A. Musaev. An approach to technological items modeling // SPIIRAS Proceedings. Issue 2, vol. 2. — SPb.: Nauka, 2005.

Abstracts. A new principle based predictive mathematical model to optimize control processes at technological plants is developed. Correctness of prediction is conformed by widespread experiment. The model-based software is being applied for optimization of control processes at carbon-hydrogen aromatics producing plant of the oil refinery. — Bibl. 3 items.

1. Введение и постановка задачи

В качестве исходной простейшей постановки задачи примем, что состояние системы — промышленной установки в данный момент времени t может быть с достаточной точностью описано m параметрами, объединенными в вектор $\xi = [\xi_1, \dots, \xi_m]$. Геометрически это означает, что состояние системы представляется точкой в m-мерном фазовом пространстве R^m . Пусть имеются результаты измерений этих параметров в моменты времени t_1, \dots, t_n . Объединим полученные результаты измерений в матрицу X размерности $n \times m$. Строка этой матрицы с номером i, X(i, i) — результат i-го измерения, $i = 1, \dots n$, столбец с номером i, X(i, j) — значения измерений j-го параметра в каждом из измерений, $j = 1, \dots m$.

Как правило, у исследователя имеется априорное представление о механизме порождения этих измерений, т.е. о характере связей между измерениями по вертикали (в разные моменты времени) и по горизонтали (между различными параметрами). Для решения различных задач в условиях ограниченного объема измерительной информации приходится выбирать, какие связи являются в данной постановке наиболее существенными, а какими, соответственно, можно пренебречь. Задача исследования, в конечном счете, состоит в том, чтобы на основании полученных результатов измерений уточнить имеющиеся

априорные представления и создать математическую модель, которую можно было бы использовать для решения задач сжатого представления данных, прогнозирования, управления, имитационного моделирования и т.д. Отметим, что модель не обязательно должна быть универсальной: зачастую модель с хорошими, например, прогнозными свойствами в других аспектах оказывается неудовлетворительной.

Рассмотрим постановку, основанную на отказе (на первом этапе) от традиционного априорного разделения переменных на входные, выходные и управляемые. При таком подходе весь вектор параметров, описывающих систему, анализируется в целом, основной акцент делается на изучении системы корреляционных связей между параметрами, выраженными в безразмерных единицах. Для любой конкретной постановки переменные разделяются на наблюдаемые и ненаблюдаемые, после чего реализуется оптимального конкретный вариант единой схемы прогноза ненаблюдаемых параметров по вектору наблюдаемых. Далее наблюдаемые неуправляемые и управляемые, разделяются на выступают в роли аргументов при оптимизации. Компоненты, выделенные в качестве ненаблюдаемых, используются для формирования целевой функции (или функции потерь). Данный подход позволяет:

- получить динамически перестраиваемую модель функционирования системы:
- построить на ее основе процедуру-функцию, описывающую изменение любого набора ненаблюдаемых в данной постановке параметров при изменении выбранного набора управляемых и сохранении фиксированных заданных значений остальных параметров;
- использовать эту процедуру-функцию для решения любых оптимизационных задач, в частности, задач синтеза управлений, оптимальных по заданному критерию качества;
- построить функции влияния, описывающие воздействие небольшого приращения любого параметра на другие параметры системы.

Организованная на этих принципах многомерная модель основывается на статистических данных и является концентрированным выражением опыта технического персонала по управлению установкой за достаточно большой промежуток времени. В то же время, она позволяет извлекать из этого опыта новое знание, поскольку осуществляет оптимизацию одновременно по целому комплексу параметров, что превышает обычные человеческие возможности. Ее главное назначение — помочь в нахождении новых, зачастую «антиинтуитивных» технологических режимов.

Более продвинутая, но и более специализированная постановка задачи предполагает комплексирование построенной статистической модели с некоей опорной системой стохастических уравнений, в качестве которых традиционно принимаются, например, уравнения материальных, молекулярных, тепловых, компонентных балансов. Наибольшая трудность при этом состоит в выявлении нужных балансовых соотношений в реальной производственной статистике и оценивании свойств их стохастических составляющих. В качестве альтернативы оказывается удобным использовать систему ограничений в виде равенств и неравенств, задаваемых:

- технологическим регламентом установки;
- рекомендациями по оптимальным соотношениям между основными параметрами, задаваемыми заводом-изготовителем;

 желаемыми соотношениями между параметрами, основанными на опыте квалифицированного технологического персонала.

Главное назначение такой модели — использование в качестве системы поддержки принятия решений. Эффект от ее внедрения связан, прежде всего, со значительным снижением временных затрат при переходе на новые режимы работы, например, при резких изменениях объема и качества входного сырья или при изменении производственного задания.

2. Базовая математическая модель

Рассмотрим следующую априорную модель: результаты измерений, составляющие базу данных X— независимые одинаково распределенные реализации случайного вектора ξ , подчиняющегося m-мерному нормальному закону $N_m(\alpha, \Sigma)$ с вектором средних α и ковариационной матрицей Σ .

Для вектора α имеется выборочная оценка $\alpha = \operatorname{mean}(X)$, для средне-квадратических отклонений (СКО) σ — оценка $s = \operatorname{std}(X)$ (векторы-строки размерности $1 \times m$). Их можно использовать для изменения масштаба измерений и перехода к безразмерным величинам. Для этого каждый столбец матрицы X нужно разделить на соответствующую компоненту вектора a или вектора s (а лучше провести обе операции одновременно). В общем случае нормировку можно проводить с произвольным вектором весов, не обязательно обратно пропорциональным средним или СКО. В частности, обычно бывает выгодно приписать большие веса наиболее критичным параметрам, при этом при возвращении к исходным размерностям точность их оценивания оказывается выше.

Будем считать, что нормировка уже произведена. Обычно рассуждения проводятся для известных α и \mathcal{L} , которые потом заменяются их оценками. Качество окончательной оценки, таким образом, существенно зависит от представительности используемой выборки X.

Рассмотрим постановку, в которой среди m параметров (компонент вектора ξ) p являются наблюдаемыми, а остальные q=m-p — ненаблюдаемыми. Задача состоит в получении оценки ненаблюдаемых компонент по имеющимся значениям наблюдаемых. В принятых предположениях гауссовости естественно использовать среднеквадратическую функцию потерь, при этом оптимальный прогноз ненаблюдаемых параметров оказывается линейной функцией наблюдаемых.

Будем считать, что данные уже не только нормированы, но и центрированы, то есть из каждой компоненты вычтено ее среднее. Ковариационная матрица имеет блочную структуру

$$\begin{bmatrix} \Sigma_{11} & \Sigma_{12} \\ \Sigma_{21} & \Sigma_{22} \end{bmatrix},$$

где Σ_{11} — ковариационная матрица наблюдаемых компонент размерности $p \times p$, Σ_{22} — ковариационная матрица ненаблюдаемых компонент размерности $q \times q$, Σ_{12} — взаимная ковариационная матрица наблюдаемых и ненаблюдаемых компонент размерности $p \times q$. Пусть C — некоторая матрица размерности $q \times p$. Требуется найти эту матрицу C из условия минимума среднеквадратической функции потерь R(C):

$$R(C) = tr M[(\xi_{2} - C \cdot \xi_{1})^{T} (\xi_{2} - C \cdot \xi_{1})] =$$

$$= tr[M(\xi_{2}\xi_{2}^{T}) - C \cdot M(\xi_{1}\xi_{2}^{T}) - M(\xi_{2}\xi_{1}^{T}) \cdot C^{T} + C \cdot M(\xi_{1}\xi_{1}^{T}) \cdot C^{T}] =$$

$$= tr[\Sigma_{22} - C \cdot \Sigma_{12} - \Sigma_{21}^{T} \cdot C^{T} + C \cdot \Sigma_{11} \cdot C^{T}] \rightarrow \text{min.}$$
(1)

Продифференцируем функцию матричного аргумента R(C) по переменной матрице C и приравняем производную нулю:

$$\frac{\partial R}{\partial C} = tr(-\Sigma_{12}^T - \Sigma_{12} + 2C \cdot \Sigma_{11}) = 0,$$

откуда

$$\widetilde{C} = \Sigma_{12}^T \cdot \Sigma_{11}^{-1}$$
.

Возвращаясь к исходным переменным, получаем формулу для оптимального линейного прогноза вектора ненаблюдаемых компонент $\hat{\xi}_2$ по известному вектору $\hat{\xi}_1$:

$$\hat{\xi}_{2} = M(\xi_{2}) + \Sigma_{12}^{T} \cdot \Sigma_{11}^{-1} \cdot (\xi_{1} - M(\xi_{1})). \tag{2}$$

Для практического применения данной схемы нужно заменить теоретические средние и ковариационные матрицы их выборочными оценками. Чтобы какую-то компоненту вектора $\hat{\xi}_2$ выразить снова в исходной размерности, полученное выражение нужно умножить на ранее использованный нормирующий множитель.

Подставляя найденное значение матрицы \hat{C} в выражение для R(C), получаем ковариационную матрицу погрешностей прогноза:

$$\begin{split} \Sigma_{22} - \widetilde{2}C \cdot \Sigma_{12} + \widetilde{C} \cdot \Sigma_{11} \cdot \widetilde{C}^T &= \\ &= \Sigma_{22} - 2\Sigma_{12}^T \cdot \Sigma_{11}^{-1} \cdot \Sigma_{12} + \Sigma_{12}^T \cdot \Sigma_{11}^{-1} \cdot \Sigma_{11} \cdot \Sigma_{11}^{-1} \cdot \Sigma_{12} = \\ &= \Sigma_{22} - \Sigma_{12}^T \cdot \Sigma_{11}^{-1} \cdot \Sigma_{12}. \end{split}$$

Следует иметь в виду, что рассчитанные по этой матрице доверительные интервалы обычно оказываются чрезмерно пессимистическими.

Рассмотренная процедура прогнозирования (1), важная сама по себе, создает базу для решения задачи оптимального управления технологическим процессом. Сформируем из выделенных ненаблюдаемых параметров скалярную функцию потерь Q в виде их линейной комбинации с динамически переопределяемыми весами d_1, \ldots, d_n . Для параметров, которые необходимо максимизировать, веса отрицательны. По умолчанию веса соответствуют условным ценам выходных продуктов, однако могут переопределяться в соответствии с требованиями производственного отдела. Формула (2) позволяет построить (практически в явном виде) процедуру вычисления Q как функции параметров $\xi_1^{(1)}, \ldots, \xi_1^{(r)} (r < p)$, выделенных в качестве управляемых. Далее решается задача численной минимизации

$$Q(\xi_1^{(1)}, \dots, \xi_1^{(r)}) \to \min$$
 (3)

с ограничениями на диапазон изменения переменных, диктуемыми технологическим регламентом. В число ограничений естественно включаются ограничения типа равенств и неравенств, соответствующие априорной информации о предпочтительных режимах работы установки.

3. Развитие модели

1. Первый шаг в улучшении полученных оценок можно сделать, вводя в выборку кроме самих параметров их квадраты и получая прогноз в виде квадратичных функций наблюдаемых параметров (без перекрестных произведений). При этом для действительно нормальных данных улучшения получиться не может. Если же гауссова аппроксимация является недостаточно точной, улучшение достигается. На этом основана, в частности, одна из процедур проверки многомерной нормальности, при этом искривление прогнозной кривой можно использовать в качестве меры кривизны модели.

Недостатки данного подхода:

- завышенные требования к объему обучающей информации;
- трудность настройки;
- техническое ограничение на число управляемых параметров (не более 6-7);
- большой объем вычислений и время счета.

Тем не менее, данный подход является весьма перспективным, так как за счет потенциально высокой точности дает надежды на обнаружение новых технологических режимов, обладающих оптимальными свойствами по сложным комплексным критериям.

2. При наличии системы опорных соотношений, заданной в виде линейной системы стохастических уравнений вида $A \cdot \xi_2 = b + \eta$, также можно получить явное выражение для прогноза типа (2), минимизируя по аналогии с (1) квадратическую функцию потерь вида

$$R(C) = tr M[(\xi_2 - C \cdot \xi_1)^T (\xi_2 - C \cdot \xi_1) + (A \cdot C \cdot \xi_1 - b)^T \cdot K^{-1} \cdot (A \cdot C \cdot \xi_1 - b)],$$

однако на практике, в конкретных производственных условиях, этот подход реализовать не удается. Это связано, в частности, с трудностями корректного задания весовой матрицы K (даже в тех случаях, когда ее можно считать диагональной).

3.При наличии системы опорных соотношений, заданной в виде линейной системы равенств $A \cdot \xi_2 = b$ и неравенств $B \cdot \xi_2 = d$ (понимаемых покоординатно) целесообразно отказаться от представления прогноза в явной форме типа (2). В этом случае прогноз строится как результат численного решения оптимизационной задачи вида (1) с учетом имеющейся системы ограничений и добавочных регламентных ограничений на диапазон изменения параметров установки. Такой подход резко увеличивает время решения основной оптимизационной задачи (3), поскольку каждое вычисление значения функции Q само требует решения аналогичной внутренней оптимизационной задачи. В то же время, это едва ли не единственный путь, позволяющий избежать получения технически нереальных комбинаций параметров установки.

4. Результаты практической реализации предлагаемого подхода

Описанные выше математические и алгоритмические решения реализованы в виде системы поддержки принятия решений (СППР) в интересах повыше-

ния эффективности управленческих решений руководящего и технического персонала на установке каталитического риформинга ЛГ-35-8/300Б нефтеперерабатывающего предприятия.

Установка предназначена для получения ароматических углеводородов с предварительной гидроочисткой сырья и последующим извлечением бензола, толуола и ксилола экстрагентом из стабильного катализата риформинга. Наиболее важными целевыми продуктами являются бензол ГОСТ 9572-78 и толуол по ГОСТ 14710-78 [1, 2].

Основными регулируемыми параметрами процесса и, одновременно, наиболее значимыми факторами, влияющими на качество получаемых продуктов, являются температуры на входе в реакторы блоков риформинга и гидроочистки. Управление осуществляется путем корректировки указанных параметров в зависимости от загрузки и свойств сырья, а также от производственных требований по соотношению целевых продуктов. При правильном понимании всей системы корреляционных связей между различными параметрами возникает возможность решения задачи оптимизации теплового баланса при заданных свойствах сырья и ограничениях на качество выходного продукта.

Макет СППР реализован в виде комплекса компьютерных модулей с эргономичным интерфейсом, позволяющего решать любую из сформулированных выше задач, в частности, выполнять расчет оптимальных режимов функционирования в различных постановках. При этом в части, относящейся к оптимизации, рассматриваемый макет СППР решает задачу минимизации линейной комбинации выбранных параметров (в безразмерных величинах) с коэффициентами, отражающими степень важности того или иного показателя. Эти коэффициенты задаются пользователем. Максимизируемым параметрам приписываются отрицательные веса, минимизируемым — положительные. Если на какие-то из выходных параметров не налагается специальных требований, они включаются в число оптимизируемых с весом 0. При этом они не будут участвовать в процессе оптимизации, однако программа выведет их прогнозируемые значения.

На рис. 1 приведен экран блока оптимизации в процессе постановки следующей задачи: максимизировать выход основных продуктов (бензола, толуола, рафината, стабильной газовой головки) с весовыми коэффициентами, пропорциональными их условным ценам, при одновременной минимизации потерь в виде остаточной ароматики в рафинате.

Загрузка и качество сырья заданы; такие свойства выходных продуктов, как процент парафинов и нафтенов в экстракте, процент основного вещества и содержание метилциклопентана (МЦП) в бензоле, начало кипения рафината в процессе оптимизации не участвуют, но требуется получить их оценку (эти параметры снабжены нулевыми весами). На рис. 2 приведен экран вывода результатов оптимизации.

Применение процедуры оптимизации ко всей имеющейся базе данных за 2001–2002 г.г. дало следующие результаты относительно отношения суммарной стоимости выходных продуктов к стоимости сырья:

- среднее за 2001–2002 гг. 1.196;
- результат оптимизации 1.223.

Рассмотрим более подробно происхождение этих эффектов. Разработанная СППР предлагает свои варианты технологического режима, при котором одновременно достигается:

Параметры процесса	Нижние границы	Верхние границы	Введи текущі значен	не управляемы		Введите веса выходов
1. Загрузка сырья, м3/час	38.0000	64.0000	55.415	i8 <u> </u>		1
2. Качество сырья, 10%, град.С	71.0000	80.0000	75.841	6		1
3. Качество сырья, 50%, град.С	76.0000	86.0000	80.851	5 🗆		1
4. Качество сырья, 90%, град.С	83.0000	99.0000	92.138	16		1
5. Т входа в P2, град.C	470.0000	492.0000	484.54	46		1
6. Перепад в Р2, град.С	-70.0000	-42.0000	-56.223	77 🔽		1
7. Т входа в РЗ, град.С	470.0000	488.0000	480.57	43		1
8. Перепад в РЗ, град.С	-38.0000	-15.0000	-30.742	26		1
9. Т входа в Р4, град.С	470.0000	490.0000	483.00	99 🔽		1
10. Перепад в Р4, град.С	-12.0000	0.0000	-5.069	3 🔽		1
11. Т загрузки К4, град.С	94.0000	120.0000	108.50	50 🔽		1
12. Тверха К4, град, С	58.0000	75.0000	68.087	ı 🔽		1
13. Расход орошения в К4, м3/час	5.0000	15.0000	10.433	37 V		1
14. Давление в К4, кГ/см2	6.0000	7.7000	6.874	3 🔽		1
15. Расход экстрагента, м3/час	190.0000	270.0000	228.41	58 🔽		1
16. Расход рисайкла, м3/час	31.0000	48.0000	42.495	0 0		1
17. % параф. и нафт. в экстракте	0.0200	0.2600	0.116	1 [V	0
18. % ОВ в рафинате	0.4700	3.7500	1.494	3 🔲	V	-2
19. % ОВ в бензоле	99.7300	99.9200	99.810	18	V	0
20. МЦП в бензоле, % мас.	0.0130	0.0820	0.046	8 🗀	V	0
21. Начало кипения рафината, град. С	50.0000	61.0000	55.396	0 [V	1
22. Выход бензола, т/ч	2.9167	6.4583	5.010	5	V	-1.2
23. Выход толуола, т/ч	3.2500	9.7917	6.812	2 🔲	V	-3.4
24. Выход рафината, т/ч	12.2917	23.1667	19.324	3	V	-3
25. Выход стаб. головки, т/ч	0.0000	4.2917	2.330	4 🗆	V	-0.28
Линейная оптимизация	Нелине	ейная оптимиза	ация	Вью	код	

Рис. 1. Экран блока оптимизации СППР установки ЛГ-35-8/300Б.

- снижение содержания ароматики в рафинате более чем на 1%;
- увеличение выработки рафината на 1–2% за счет соответствующего снижения выработки более дешевых газообразных компонентов;
- перераспределение выработки ароматики в пользу более дорогих компонентов.

При этом только одно снижение содержания ароматики в рафинате обещает выигрыш порядка 1% в год. Основной выигрыш дает увеличение выработки рафината за счет снижения выхода газов.

Управляемые параметры :	Выходные параметры:
5. Т входа в Р2, град С = 477.272 (среднее = 484.545) 6. Перепад в Р2, град С = -63.114 (среднее = -56.228) 7. Т входа в Р3, град С = 484.287 (среднее = 480.574) 8. Перепад в Р3, град С = -22.871 (среднее = -30.743) 9. Т входа в Р4, град С = 476.505 (среднее = 483.010) 10. Перепад в Р4, град С = -8.535 (среднее = -5.069) 11. Т загрузки К4, град С = 101.252 (среднее = 108.505) 12. Т верха К4, град С = 71.544 (среднее = 68.087) 13. Расход орошения в К4, м3/час = 12.717	17. % параф. и нафт. в экстракте = 0.060
(среднее = 10.434) 4. Давление в К4, кГ/см2 = 7.287 (среднее = 6.874) 5. Расход экстрагента, м3/час = 249.208 (среднее = 228.416) 6. Расход рисайкла, м3/час = 36.748 (среднее = 42.495)	(среднее = 2.330) ЭКОНОМИЧЕСКИЕ ПОКАЗАТЕЛИ Стоимость сырья = 38.364 Стоимость учтенной продукции = 42.943 Отношение = 1.119

Рис. 2. Экран блока вывода результатов линейной оптимизации нагрузки на печи 1.

Предсказываемые на основании предлагаемой модели экономические эффекты могут оказаться завышенными в силу ограничений технического характера. В частности, модель рекомендует увеличение перепада температур в реакторных колоннах при поддержании высокой температуры верха, что приводит к дополнительным энергозатратам и повышению нагрузки на печи. Кроме того, эффект достигается за счет некоторого повышения среднего содержания МЦП в бензоле. В связи с приведенными соображениями в качестве нижней оценки ожидаемого эффекта следует принять величину порядка \$0.1–0.2 на баррель перерабатываемого сырья.

5. Заключение

Разработанный общий метод построения математических моделей технологических установок и его программная реализация в виде СППР для руководства и технического персонала установки ЛГ-35-8/300Б позволяют решать широкий круг производственных задач, в частности:

- выявление оптимальных режимов работы установки;
- выявление оптимальных свойств входного сырья;
- получение численных оценок выигрышей и потерь при использовании тех или иных технологических и сырьевых режимов.

Эксперименты с построенным макетом позволили обнаружить набор необычных технологических режимов, при которых одновременно

- уменьшается доля потерь;
- увеличивается выработка более дорогих продуктов за счет уменьшения выхода газообразных составляющих.

В настоящее время идет уточнение границ и условий применимости найденных режимов, т.к. значительное повышение расчетной стоимости выходных продуктов достигается, в частности, за счет увеличения нагрузки на системы нагрева промежуточных продуктов.

Литература

- [1] Промышленные установки каталитического риформинга. Под. ред. *Ластовкина Г. А.* Л.: Химия, 1984. 232 с.
- [2] Глазов Г. И., Сидорин В. П. Каталитический риформинг и экстракция ароматических углеводородов. М: Химия, 1981. 118 с.
- [3] Вермишев Ю. Х. Методы автоматического поиска решений при проектировании сложных технических систем. М: Радио и связь, 1982. 152 с.