



信息化与工业化  
两化融合  
研究与应用

# 复杂流程系统的 实时模拟与优化

邵之江 方学毅 王可心 著  
陈 曦 陈伟峰



科学出版社



国家出版基金项目  
NATIONAL PUBLICATION FOUNDATION

信息化与工业化两化融合研究与应用

# 复杂流程系统的实时模拟与优化

邵之江 方学毅 王可心 陈 曜 陈伟锋 著

科学出版社

北京

## 内 容 简 介

本书围绕复杂流程系统的模拟与优化,从非线性规划算法内核、模拟与优化技术、流程对象的优化应用三个层面论述相关理论和方法。本书汇集了作者在鲁棒优化算法构造、收敛性增强、先进初值策略、高效实时算法、优化求解器参数整定等多方面长期的理论和技术研究成果,系统地阐述了提高流程模拟与优化收敛性和实时性的新思路和新方法。结合PTA装置、空分装置的流程模拟与优化实践,对软件开发、系统实施等进行了介绍。

由于流程对象的特征,本书关注的是处理大规模、复杂、连续的优化问题。相应地,本书偏重于大规模优化技术,例如内点法、简约空间方法、序列二次规划方法;针对复杂系统模型存在的线性相关/病态/奇异等特征带来的优化求解局限性和收敛困难、非线性系统模拟/优化的初值敏感性、刚性收敛准则对计算效率的负面影响、优化求解器在计算实践中的性能瓶颈等问题,分别提出了相应的解决方法。虽然本书的讨论范畴是流程系统的稳态模拟与优化,但是所述理论与方法同样适用于联立策略下的动态系统求解。

本书可以作为运筹学、应用数学、系统工程等领域的科研参考,了解大规模非线性规划技术的应用基础理论现状;也可供化学工程等相关应用领域的研究人员和工程技术人员参考。

### 图书在版编目(CIP)数据

复杂流程系统的实时模拟与优化/邵之江等著. —北京:科学出版社,  
2014. 10

(信息化与工业化两化融合研究与应用)

ISBN 978-7-03-042021-3

I. ①复… II. ①邵… III. ①工业企业管理-生产流程-研究 IV. ①F406. 2

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2014)第 224239 号

责任编辑:姚庆爽 / 责任校对:桂伟利

责任印制:肖 兴 / 封面设计:黄华斌

科学出版社出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

新科印刷有限公司印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

\*

2014 年 10 月第 一 版 开本:720×1000 1/16

2014 年 10 月第一次印刷 印张:18 1/2

字数:370 000

定价: 108.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换)



## 《信息化与工业化两化融合研究与应用》编委会

顾问委员会 戴汝为 孙优贤 李衍达 吴启迪 郑南宁 王天然  
吴宏鑫 席裕庚 郭雷 周康 王常力 王飞跃

编委会主任 吴澄 孙优贤

编委会副主任 柴天佑 吴宏鑫 席裕庚 王飞跃 王成红

编委会秘书 张纪峰 卢建刚 姚庆爽

### 编委会委员(按姓氏笔画排序)

于海斌(中国科学院沈阳自动化研究所)	张纪峰(中科院数学与系统科学研究院)
王龙(北京大学)	陈杰(北京理工大学)
王化祥(天津大学)	陈虹(吉林大学)
王红卫(华中科技大学)	范铠(上海工业自动化仪表研究院)
王耀南(湖南大学)	周东华(清华大学)
卢建刚(浙江大学)	荣冈(浙江大学)
朱群雄(北京化工大学)	段广仁(哈尔滨工业大学)
乔非(同济大学)	俞立(浙江工业大学)
刘飞(江南大学)	胥布工(华南理工大学)
刘德荣(中国科学院自动化研究所)	桂卫华(中南大学)
关新平(上海交通大学)	贾磊(山东大学)
许晓鸣(上海理工大学)	贾英民(北京航空航天大学)
孙长银(北京科技大学)	钱锋(华东理工大学)
孙彦广(冶金自动化研究设计院)	徐昕(国防科学技术大学)
李少远(上海交通大学)	唐涛(北京交通大学)
吴敏(中南大学)	曹建福(西安交通大学)
邹云(南京理工大学)	彭瑜(上海工业自动化仪表研究院)
张化光(东北大学)	薛安克(杭州电子科技大学)

## 《信息化与工业化两化融合研究与应用》序

传统的工业化道路，在发展生产力的同时付出了过量消耗资源的代价：产业革命 200 多年以来，占全球人口不到 15% 的英国、德国、美国等 40 多个国家相继完成了工业化，在此进程中消耗了全球已探明能源的 70% 和其他矿产资源的 60%。

发达国家是在完成工业化以后实行信息化的，而我国则是在工业化过程中就出现了信息化问题。回顾我国工业化和信息化的发展历程，从中国共产党的十五大提出“改造和提高传统产业，发展新兴产业和高技术产业，推进国民经济信息化”，到党的十六大提出“以信息化带动工业化，以工业化促进信息化”，再到党的十七大明确提出“坚持走中国特色新型工业化道路，大力推进信息化与工业化融合”，充分体现了我国对信息化与工业化关系的认识在不断深化。

工业信息化是“两化融合”的主要内容，它主要包括生产设备、过程、装置、企业的信息化，产品的信息化和产品设计、制造、管理、销售等过程的信息化。其目的是建立起资源节约型产业技术和生产体系，大幅度降低资源消耗；在保持经济高速增长和社会发展过程中，有效地解决发展与生态环境之间的矛盾，积极发展循环经济。这对我国科学技术的发展提出了十分迫切的战略需求，特别是对控制科学与工程学科提出了十分急需的殷切期望。

“两化融合”将是今后一个历史时期里，实现经济发展方式转变和产业结构优化升级的必由之路，也是中国特色新型工业化道路的一个基本特征。为此，中国自动化学会与科学出版社共同策划出版《信息化与工业化两化融合研究与应用》，旨在展示两化融合领域的最新研究成果，促进多学科多领域的交叉融合，推动国际间的学术交流与合作，提升控制科学与工程学科的学术水平。丛书内容既可以是新的研究方向，也可以是至今仍然活跃的传统方向；既注意横向的共性技术的应用研究，又注意纵向的行业技术的应用研究；既重视“两化融合”的软件技术，也关注相关的硬件技术；特别强调那些有助于将科学技术转化为生

产力以及对国民经济建设有重大作用和应用前景的著作。

我们相信,有广大专家、学者的积极参与和大力支持,以及编委的共同努力,本丛书将为繁荣我国“两化融合”的科学技术事业、增强自主创新能力、建设创新型国家做出应有的贡献。

最后,衷心感谢所有关心本丛书并为丛书出版提供帮助的专家,感谢科学出版社及有关学术机构的大力支持和资助,感谢广大读者对本丛书的厚爱。



中国工程院院士

2010年11月

## 前　　言

大批量、高效率的流程工业生产是构成人类物质文明的重要基础。流程工业迈向智能化是后工业时代的历史必然。智能工厂将由低级到高级、由简单到复杂，实现决策过程的自动化、自主化、智能化，形成高效的流程工业中枢神经系统，通过现有技术的集成整合、灵巧运用、模式再造，应对各种外部条件变化，实现质量、效益、环境要素的整体优化。

我国流程工业是国民经济的支柱产业，其资源资金技术密集、产业关联度高、经济总量大。经过多年的快速增长，全球化市场竞争日益激烈，导致企业利润持续缩减，国内流程工业内部积累的问题也越发突出。如何在生产运行中保持优质、高效、低耗、环保，是流程工业企业普遍面临的现实问题和重大挑战。提高流程工业的产品设计技术、工艺优化技术、运行控制技术、调度管理技术，在现有工艺条件和设备条件的基础上，通过精细化的调优、调度，提高产品质量和档次，提高生产效能，提高市场需求变化情况下的生产柔性和适应性，实现优质、高效、节能、降耗、低排，是实现流程工业产业改造和提升、保持可持续发展的必然选择，也是企业在基础自动化和信息化的平台上进一步提升智能化操作水平、迈向真正“智能工厂”的必由之路。

实时模拟与实时优化技术是指采用快速、高效的优化计算技术，结合工艺知识和现场操作数据，分析生产运行的状况，通过模型计算定量获得物耗、能耗、质量指标等关键生产运行指标，对操作运行中的生产装置参数及时进行优化调整，克服原料波动、环境因素波动、上下游生产单元负荷变化等的影响，使生产运行始终保持在最佳工作状态。发达国家的成功经验表明，实时优化技术已经成为工业企业（尤其是流程工业企业）降低生产成本，提高综合经济效益，实现节能减排、优质高效生产的重要技术手段之一。

本书内容基于作者长期积累的理论研究成果和应用实践，围绕流程工业中复杂生产流程系统的实时模拟与优化展开。结合流程行业重大装备节能降耗、优质高效的高端需求，从系统全流程模拟和优化计算的角度，对实时优化理论和应用体系、算法效率提升和软件实现、行业导向和现场应用等进行论述。重点讨论稳态优化和动态优化涉及的命题构造和分析、高效算法和实现，并结合精对苯二甲酸(PTA)、空分等典型生产装置的模拟与优化，讨论实时模拟与优化的技术现状、应用现状、成功案例、存在问题和面临挑战。

本书工作得到 973 计划课题“多单元过程组合效应分析与流程优化重构”

(2012CB720503)、“基于过程模型的生产全流程在线动态运行优化理论和方法研究”(2009CB320603)、“复杂生产制造过程实时智能操作优化理论与方法研究”(2002CB312203),以及863计划课题“大型石油化工过程全流程仿真与优化技术及其应用”(2007AA04Z192)和多项国家自然科学基金项目的资助。研究生周舟、赵晓锐、祝铃钰、陈智强、蒋鹏飞等对本书工作有直接贡献。特别感谢过程系统工程专家、浙江大学控制系教授钱积新先生对课题组的引领和带动,感谢Carnegie Mellon大学Lorenz T. Biegler教授作为教育部长江讲座教授对课题组的帮助,感谢课题组其他老师和研生长期以来的鼓励,感谢国内外各位专家、朋友对我们工作的大力支持。特此一并表达衷心感谢!

通过各种数学建模和优化工具全面、深刻、系统地描述复杂工程对象,继而有效率地加以优化改进,将成为各行各业的发展趋势。各种新理论、新方法、新应用将不断涌现。限于作者的认识水平和知识结构,书中难免存在不妥之处,敬请各位读者批评指正。

作 者

2014年10月

# 目 录

## 《信息化与工业化两化融合研究与应用》序

### 前言

<b>第1章 绪论</b>	1
1.1 流程系统中的模拟技术	2
1.2 流程系统中的优化技术	3
1.2.1 流程系统的稳态实时优化	4
1.2.2 流程系统的动态优化	10
1.3 流程模拟和优化技术的研究现状与趋势	18
1.3.1 流程系统的发展趋势	18
1.3.2 流程系统的建模技术	19
1.3.3 数据校正和参数估计	21
1.3.4 单层结构 RTO	21
1.3.5 动态 RTO	23
1.4 实时模拟与优化中的关键问题	24
1.4.1 鲁棒求解策略	24
1.4.2 高效求解策略	26
1.5 本书的组织结构	28
参考文献	30
<b>第2章 非线性规划算法及其鲁棒扩展</b>	38
2.1 非线性规划基础	38
2.1.1 最优解及最优性条件	38
2.1.2 收敛速度	40
2.1.3 全局化策略	40
2.2 非线性规划算法及其简约空间实现	46
2.2.1 序列二次规划算法——SQP	46
2.2.2 内点法——IPM	48
2.2.3 简约空间方法	51
2.3 线性相关系统求解	55
2.3.1 结构正则化方法	55
2.3.2 变维法	62

2.4 可行性恢复阶段.....	66
2.4.1 障碍法可行性恢复 .....	66
2.4.2 投影梯度可行性恢复 .....	67
2.4.3 无可行性恢复的鲁棒算法 .....	75
2.5 小结.....	78
参考文献 .....	79
<b>第3章 回溯同伦法——HBM .....</b>	<b>82</b>
3.1 背景和问题介绍.....	82
3.2 回溯同伦算法及其实现.....	84
3.2.1 变工况同伦序列问题构造 .....	84
3.2.2 HBM 算法的实现 .....	87
3.3 性能分析与讨论.....	89
3.3.1 算法大范围性能收敛测试 .....	90
3.3.2 流程物理边界搜索 .....	92
3.3.3 回溯系数的影响.....	93
3.3.4 多维工况变量 .....	96
3.4 基于灵敏度的回溯同伦算法——sHBM .....	97
3.4.1 sHBM 方法 .....	98
3.4.2 数值实验 .....	99
3.5 小结 .....	100
参考文献.....	101
<b>第4章 记忆增强型实时优化算法——MEO .....</b>	<b>102</b>
4.1 MEO 思想 .....	102
4.2 MEO 方法和分析 .....	109
4.2.1 MEO 框架 .....	109
4.2.2 理论分析.....	112
4.3 基于灵敏度的 MEO 方法——sMEO .....	120
4.3.1 sMEO 方法 .....	121
4.3.2 数值实验 .....	122
4.4 MEO 方法的全局最优化扩展——gMEO .....	125
4.4.1 gMEO 方法 .....	125
4.4.2 数值实验 .....	128
4.5 MEO 软件架构与功能模块开发 .....	132
4.5.1 MEO 软件系统架构 .....	132
4.5.2 MEO 框架总体设计 .....	133

4.5.3 标准数据接口与数据结构设计 .....	137
<b>4.6 MEO 功能模块开发 .....</b>	<b>139</b>
4.6.1 MEO 全局函数及数据 .....	139
4.6.2 计算服务集对外接口设计 .....	140
4.6.3 计算服务集各服务的设计与开发 .....	141
4.6.4 监控配置服务集的设计与开发 .....	143
<b>4.7 MEO 在 Aspen Plus 下的应用 .....</b>	<b>145</b>
4.7.1 Aspen Plus 中调用 MEO 框架 .....	145
4.7.2 MEO 框架在 Aspen Plus 下应用实例 .....	148
<b>4.8 小结 .....</b>	<b>154</b>
<b>参考文献 .....</b>	<b>155</b>
<b>第 5 章 收敛深度控制算法——CDC .....</b>	<b>157</b>
5.1 收敛深度控制的提出 .....	157
5.2 基于简约空间 SQP 算法的收敛深度控制 .....	159
5.2.1 收敛深度控制准则 .....	159
5.2.2 收敛准则性质证明 .....	162
5.2.3 数值实验 .....	163
5.3 基于内点法的收敛深度控制 .....	170
5.3.1 收敛深度控制准则 .....	170
5.3.2 收敛准则性质证明 .....	171
5.3.3 数值实验 .....	180
5.4 小结 .....	185
<b>参考文献 .....</b>	<b>185</b>
<b>第 6 章 优化求解器的参数自动整定——PAT .....</b>	<b>187</b>
6.1 优化求解器参数与性能的关系 .....	187
6.2 基于启发式和直接搜索算法的参数自动整定框架 .....	190
6.2.1 参数自动整定整体算法框架概述 .....	191
6.2.2 启发式算法及参数关联性的处理 .....	192
6.2.3 直接搜索算法 .....	193
6.2.4 算法框架的实施 .....	194
6.2.5 数值实验 .....	197
6.3 基于随机采样的参数自动整定算法 .....	199
6.3.1 随机采样参数整定算法和改进随机采样参数整定算法 .....	199
6.3.2 数值实验 .....	202
6.4 小结 .....	213

参考文献.....	214
<b>第7章 开放架构的流程模拟与优化软件体系.....</b>	<b>216</b>
7.1 流程模拟软件的研究和开发 .....	216
7.2 Aspen Open Solvers 接口集描述 .....	218
7.3 基于 AOS 接口的内点算法求解器 .....	220
7.3.1 求解器接口的实现和 IPOPT 的封装 .....	220
7.3.2 标度化技术 .....	222
7.4 扩展 Aspen Plus 对 CAPE-OPEN 优化求解器的兼容性 .....	225
7.5 数值实验 .....	228
7.6 小结 .....	233
参考文献.....	233
<b>第8章 PTA 生产过程实时模拟与优化 .....</b>	<b>235</b>
8.1 PTA 生产过程介绍 .....	235
8.2 氧化反应器建模 .....	236
8.3 氧化工段全流程仿真模拟 .....	239
8.3.1 高压吸收塔模拟结果 .....	241
8.3.2 溶剂汽提塔模拟结果 .....	242
8.3.3 溶剂脱水塔系统模拟结果 .....	242
8.4 PTA 生产过程实时模拟与监控系统 .....	243
8.4.1 计算服务系统技术构架 .....	244
8.4.2 监控系统服务端软件 .....	246
8.4.3 监控系统客户端软件简介 .....	247
8.4.4 系统预测成效分析 .....	248
8.5 PTA 生产过程的实时操作优化 .....	249
8.6 小结 .....	253
参考文献.....	253
<b>第9章 空分生产过程变负荷模拟与优化 .....</b>	<b>254</b>
9.1 工业低温空分装置流程介绍 .....	254
9.2 低温空分流程建模及模拟 .....	257
9.2.1 热力学模型选择 .....	259
9.2.2 面向工业装置操作模拟的变量设置方案 .....	259
9.2.3 稳态流程模拟结果 .....	261
9.3 空分装置变负荷操作优化命题 .....	262
9.4 空分自动变负荷操作优化求解 .....	264
9.4.1 工况可行域分析 .....	264

---

9.4.2 同伦法求解近似不连续解 .....	267
9.4.3 不等式约束的同伦路线构造 .....	270
9.5 自动变负荷优化结果与工业装置数据对比 .....	272
9.5.1 自动变负荷问题的可行产量组合 .....	272
9.5.2 自动变负荷问题的物理边界分析 .....	274
9.6 小结 .....	278
参考文献 .....	278
索引 .....	280

## 第1章 絮 论

流程工业或称过程工业(process industry)，是形成人类物质文明的基础工业。流程工业主要通过物理变化和化学变化，实现大宗原料型工业产品的生产、加工、供应、服务。流程工业包括石化、化工、冶金、制药、电力、建材、轻工、造纸、采矿、环保、电力等，是国民经济中占有主导性的行业。目前有超过 70 家流程工业企业位于全球 500 强的行列，占 15% 左右。我国流程工业占全国企业年总产值的 60% 以上。流程工业的发展状况直接影响到国家的经济基础，是国家的重要基础支柱产业。

流程系统(process system)是指由被加工的物流或能量流经过的诸单元工序所构成的系统，是一种各单元间根据生产工艺要求互相联结形成的复杂网络。其主要生产过程为连续生产。其相应原料和产品多为均一相(固、液或气体)的物料，而非由零部件组装成的物品。其产品质量多由纯度和各种物理、化学性质表征。

流程工业的具体特点可以表述如下。

(1) 大批量连续生产：在生产过程中，过程工业的物流和能流都相对连续、稳定，生产装置各工序间通常以管线、储罐连续衔接，工艺流程及产品相对稳定。由于采用大批量生产的模式，流程企业的订单通常与生产无直接关系。企业只有满负荷甚至超负荷生产，才能降低单位产品成本，在市场上具有竞争力。因此，流程工业企业一般按年度决定当年的生产计划和销售计划，并以此决定企业的物料平衡，即物料采购计划。一般情况下，企业按月份签订供货合同以及结算货款。每日、每周生产计划的物料平衡依靠原材料库存来保证和调节。流程企业的这一特点使得生产计划在企业全年度的生产经营中具有十分重要的地位，这也对生产计划的合理决策提出了很高的要求。

(2) 过程操作复杂、控制精度要求高：过程工业的开车、停车程序十分复杂而且代价巨大，一般不允许非计划停车。工段、设备、操作变量之间存在十分严重的耦合现象。这使得对某一参数进行调节往往会引起其他参数以及后续流程产品质量的变化，甚至可能引发生产事故。所谓“牵一发而动全身”。因此，过程工业产品质量的控制要从全过程的角度，基于工艺机理对过程中所有的单元设备进行协调控制，同时必须确保测量、控制的精度和稳定性，才能保证生产过程的安全、平稳、高效、优质。相比之下，离散制造业虽然也要求控制的精确性和稳定性，但工序内部操作条件的变化一般不会影响到其他工序。因此具有较强的容错能力。

(3) 过程工业和离散制造业的优化目标与调节手段不同：过程工业以安全、稳

定、均衡、长周期、高负荷、高质量、高收率、低物耗能耗和小污染为目标,调节手段主要是保证生产过程的工艺参数尽量维持在最优操作工况。而离散制造业往往以缩短供货周期、提高设备利用率、减少库存、实现柔性生产等为主要目标,以调整生产计划、优化排序、优化分配负荷为调节手段。

(4) 过程工业特别强调安全、环保、节能:过程工业的生产常常是在高温高压、易燃易爆以及有毒的条件下进行的。从安全和环保的角度出发,对生产环境、管理和控制提出了很高的要求。同时,从提升能量利用率的角度出发,对于高温高压或超低温的环境下的热量/冷量的回收利用,减小热损失也提出了很高的要求。

当代不断加剧的全球化市场竞争是流程工业企业面临的一个严峻挑战。流程工业市场日趋全球化和动态化,企业间竞争不断加剧,这些都导致流程工业企业利润的持续缩减<sup>[1-4]</sup>。国内流程工业企业在不同程度上存在能耗高、成本高、劳动生产率低、资源利用率低的特点。过程生产中流程系统的实时模拟与优化已成为有效提高企业效益的重要技术途径。

## 1.1 流程系统中的模拟技术

流程系统的模拟是根据对流程的充分认识和理解,以工艺过程的机理模型为基础,运用数学方法对过程进行建模描述,并通过计算机辅助计算的手段进行过程的热量衡算、物料衡算、设备规模估计和能量分析<sup>[5]</sup>。流程模拟可为工程设计与改造、流程剖析、优化控制、环境与经济评价和教学培训等提供强有力手段,不但能够从系统整体角度分析和判断工艺流程的好坏,还可以对新开发的工艺流程提供可靠预测,这些均有助于提高工作效率和决策的科学性<sup>[6]</sup>。

流程系统模拟技术从 20 世纪 50 年代开始发展起来,至今已经历了四代。1958 年美国 Kellogg 公司推出全球第一个化工模拟程序 H-Flexible Flowsheet,并将其用于工程设计中单元操作设备的工艺计算。20 世纪 70 年代开始出现了一系列稳态流程模拟软件,如 ASPEN、PROCESS、SPEEDUP 和 HYSIM 等。这些软件在流程工业领域产生了巨大的影响。20 世纪 80 年代中后期开始,流程模拟技术走向了成熟期。这些软件在功能和可靠性方面不断增强,其应用范围不断拓宽,成本大幅下降。随着能源的短缺情况和市场竞争的加剧,国外流程模拟软件转向以生产企业为主,成为流程企业的计算机辅助工程(CAE)核心和计算机集成制造系统(CIMS)基础,效益明显。稳态模拟技术趋于成熟。国际上流程模拟领域有代表性的而且应用较好的通用流程模拟软件有 PRO/II、Aspen Plus 和 HYSIM(已被美国 AspenTech 收购)。从 20 世纪 90 年代开始,模拟技术从“稳态”和“离线”走向“动态”和“在线”,并向实时优化发展。这一时期,新的模拟软件不断问世。如加拿大 HYPROTECH 公司的 HYSYS、美国 AspenTech 公司的 Custom Modeler

和 DYNAMICS 等。

数学模型在流程模拟中处于核心地位。流程系统的数学模型由化工单元模型和各单元间拓扑结构模型两部分组成。流程模拟的目的是根据流程拓扑中已知流股的数据及过程参数,确定包含流程系统输出在内的所有流股的数值,或是根据已知过程流股的状态值计算可满足设计规定的过程参数值。目前,主流的求解方法主要包括序贯模块法(sequential modular approach)、联立方程法(equation oriented method)、联立模块法(simultaneous modular approach)、数据驱动法和人工智能法。

(1) 经典的序贯模块法相当于对全流程系统的非线性方程组作降阶处理。这种方法建立在化工流程中的大多数变量间无函数关系的基础之上,借助分隔手段将系统分解为若干子方程组,按照流程拓扑的结构顺序进行联立求解,且各方程组之间被流股连接方程约束。应用序贯模块法方法可避免联立求解大型方程组时对存储空间的要求,做到简化问题,方便计算,但是当流程结构较为复杂时,该算法收敛性较差。

(2) 联立方程法的基本思想是将描述过程系统的所有方程全部联立起来统一进行求解。此时,流程系统模拟问题的求解转化为纯粹的数学计算问题。建立大规模过程系统模型、继承已开发的大量单元模块、设计变量的选择和初值的构造以及求解时错误诊断困难等是联立方程法所面临的难题。

(3) 联立模块法在序贯模块法与联立方程法两种方法间取长补短,故又称双层法。其思想是首先确定流程中各模块的简化模型,模型中通常含有待估计模型参数。然后在单元模块级进行严格模型模拟,以一定精度回归待估参数值。再将各估计后的模型连接起来在流程级上求解。联立模块法避免了序贯法设置收敛模块导致收敛效率低,以及联立方程法在求解大规模方程组等方面的缺点。

(4) 数据驱动法是一种以数据库为中心的模拟方法。该方法首先根据用户需求建立数据库框架并利用用户提供的数据驱动各种算法和物性程序,将数据库填满,对数据校核无误达到一定的精度后再将数据返回给用户。

(5) 人工智能法是利用专家知识参与流程系统模拟的方法。用这些知识产生过程模拟的缺省初值,判断模拟进展正常与否,并根据标准加以校正,使过程模拟得以收敛。

## 1.2 流程系统中的优化技术

流程系统的实时优化(real-time optimization, RTO)是指结合工艺知识和现场操作数据,通过快速、高效的优化计算技术对操作运行中的生产装置参数进行优化调整,增强其对环境变化、原材料波动、市场变化等的适应能力,保持生产装置始

终处于高效、低耗并且安全的最优工作状态的技术。RTO 可以通过增加产量,提高产品质量,使生产过程始终运行在最佳工况上;可以通过经济目标的寻优,减少原料和能源的消耗,减少废弃物的排放;可以通过监测、预警、自动调整,延长设备的运行周期,减少催化剂的消耗;可以使得来自计划调度的市场信息在操作层面得到及时的贯彻实施,迅速在生产过程中反映市场供求关系的变化;可以进一步深化工艺人员、操作人员对过程工艺与操作的了解,有助于工艺的改进和操作策略的调整。

一个工业装置一旦投入运行,将始终被一系列的影响因素所干扰,使得现场运行的操作点逐渐偏离原先最优设计时确定的最佳工作点。这些影响因素可分为外部和内部不确定性两种<sup>[7]</sup>。

(1) 外部不确定性:原料变化,包括进料量、原料特性(组成、温度等);公用资源的供应约束,如能耗;市场需求变化,来自决策部门的产品规格发生的调整;气候变化。

(2) 内部不确定性:装置设备特性漂移,如换热器结垢、催化剂活性发生变化,以及来自流程中其他单元的影响,如蒸汽量波动、循环物料。

其中第(1)类外部不确定性影响因素主要来自于上层环节,第(2)类内部不确定性因素主要来自于下层环节和过程装备。RTO 的目标就是,通过实时采集生产数据,监测过程运行状况,在满足所有约束条件的前提下,不断实时地调整下层环节的工作点,以克服内部和外部不确定性因素,从而保证过程始终能够得到最佳的经济效益<sup>[8]</sup>。RTO 系统具有在线自动运行的特点,从数据采集、模型修正,到优化计算和实施,构成一个闭环,无需人工干预<sup>[9]</sup>。这里将流程系统的实时优化分为稳态和动态两种类型加以论述。

### 1.2.1 流程系统的稳态实时优化

#### 1. RTO 的发展和现状

RTO 的概念于 20 世纪 50 年代提出。由于当时软硬件条件的限制、相关优化理论研究尚不完善,一直以来未能在流程工业领域得到推广和应用。直至 20 世纪 80 年代,壳牌公司对在线大规模优化进行了首次尝试。该公司开发了具有 20000 个变量和方程的模型并采用序列二次规划算法(sequential quadratic programming, SQP)对优化命题进行求解。1986 年壳牌公司开发了 Opera 软件包,并用于乙烯生产设备上。Opera 后来成为许多 RTO 软件包的基础,如 DMO 和 RO-Meo。DMO 于 1988 年应用于美国太阳石油公司(Sunoco)的加氢裂化器实时优化上,并于 1991 年应用于美国莱昂德尔化学公司(Lyondell)的炼油厂。日本三菱化成工业公司(Mitsubishi Chemical)于 1994 年在变量和方程数高达 200000 的系统上应用了 RTO 技术。