

过程系统工程理论与实践丛书



过程系统测量数据校正技术

袁永根 李华生 著

中国石化出版社

过程系统工程理论与实践丛书

过程系统测量数据校正技术

袁永根 李华生 著

中国石化出版社

内 容 提 要

本书是《过程系统工程理论与实践丛书》之一。该丛书是普及型高科技系列读物,主要介绍过程系统工程这门新型学科,其应用领域包括化工、石油化工、冶金、轻工、建材等物流型工业。

本书以化工过程为例,阐述了过程系统测量数据校正的理论与方法,并介绍了数据的分类、稳态过程的数据检验以及过失误差的侦破与识别。

本丛书各分册都具有普及性、实用性和可操作的特点。适用于过程工业的技术人员、管理人员以及大、中专学校师生阅读。

图书在版编目(CIP)数据

过程系统测量数据校正技术/袁永根,李华生著.
-北京:中国石化出版社,1996
(过程系统工程理论与实践丛书)
ISBN 7-80043-627-6

I. 过… II. ①袁…②李… III. 过程系统-数据处理-技术 IV. N94

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (96) 第 10267 号

*

中国石化出版社出版发行

(地址:北京市东城区安定门外小黄庄 32 号)

邮编:100013 电话:(010) 64241850

社长:周培荣

海丰印刷厂排版印刷

新华书店北京发行所经销

*

787×1092 毫米 32 开本 7 印张 124.4 千字 印 1—2000

1996 年 11 月北京第 1 版 1996 年 11 月北京第 1 次印刷

定价:12.00 元

主 编 成思危

编委会 (按姓氏笔划为序)

申同贺	许锡恩	成思危	陈丙珍
周瑞康	俞金寿	顾 炎	麻德贤
韩方煜	谭昌元	魏寿彭	

序

过程系统工程是在系统工程、化学工程、过程控制、计算数学、信息技术、计算机技术等学科的边缘上产生的一门综合性学科。它以处理物料—能量—信息流的过程系统为研究对象，其核心功能是过程系统的组织、计划、协调、控制和管理。它广泛地用于化学、冶金、建材、食品等过程工业中，目的是在总体上达到技术上及经济上的最优化。

过程系统工程大约是在 60 年代开始形成一门独立学科的，此后得到了迅速的发展，在各种期刊杂志上及三年一度的过程系统工程国际会议上发表了大量的文章，其中一些关键技术，如过程模拟、过程分析、过程综合、过程预测、过程评价、过程可靠性分析等日益成熟，应用领域也不断扩展，已经成为过程工业发展中不可缺少的一门高新技术。

二十多年来，我国学者及工程技术人员在努力学习国外先进技术的基础上，在实践中积累了不少经验，在技术上也有一些进展。但由于彼此之间缺乏联系及交流，在过程系统工程方面尚未能形成一支强大的人才队伍，有不少好的成果得不到应有的推广。有鉴于此，我国著名的系统工程专家钱学森教授在 1988 年 12 月 23 日给我的来信中，倡议成立一个全国性的学术团体。他在信中指出：“我想中国系统工程学会似尚缺少一个专门搞生产流程的委员会，而生产流程的系统工程对化学工业特别重要。您如同意，您可作为发起人向学会的秘书长或副秘书长建议成立这个委员会。”

在钱老的大力推动下，中国系统工程学会过程系统工程专业委员会于 1991 年宣告成立。在成立大会上，不少代表建议要大力普及过程系统工程的基本知识。因此在第一次理

事会上便决定要编辑出版一套《过程系统工程理论与实践丛书》，并为此组成了编辑委员会，确定了丛书的选题及作者。在中国石化出版社的大力支持下，这套丛书得以顺利地出版。在此我仅代表中国系统工程学会过程系统工程专业委员会向各位编委、各位作者，以及中国石化出版社的有关人员表示深切的感谢。

这套丛书共分 10 册，基本上覆盖了过程系统工程的主要领域。出版这套丛书的目的是宣传并普及过程系统工程的基本知识，以引起读者进一步学习的兴趣。其读者对象是过程工业领域内大专以上文化程度的中青年工程技术人员。我们希望这套丛书能达到以下三点基本要求：

1. **系统性：**框架完整，逻辑清晰，每部书相对独立，深度相近，彼此之间有联系而不重复。

2. **科普性：**深入浅出，定性叙述与定量分析相结合，尽量避免复杂的数学推导。

3. **实用性：**理论与实践相结合，有一定数量的实例及应用软件介绍。

由于这套丛书是我们在过程系统工程领域内编写高级科普读物的第一次尝试，是否真正达到了上述要求，还有待读者的检验。我们热诚地希望读者能将对本书的宝贵意见通过中国石化出版社告诉我们，以便再版时加以改进。

中国系统工程学会过程系统工程
专业委员会主任委员

成思危

1994 年 4 月 6 日

目 录

第一章 绪论	1
第一节 过程系统测量数据校正的意义.....	1
一、化工过程测量数据校正的必要性.....	1
二、测量数据校正技术发展的历史沿革.....	2
第二节 测量数据校正技术的应用与研究.....	7
一、测量数据校正技术的应用领域和商品化软件.....	7
二、测量数据校正技术的研究领域和前景.....	9
参考文献	10
第二章 数学工具	13
第一节 空间、线性变换和矩阵	13
一、空间	13
二、线性变换	14
三、零空间和零度矩阵	16
四、投影矩阵	18
五、Kronecker 矩阵乘积法和 Neudeckor 算子	19
六、矩阵的秩关系式	21
七、梯度运算	21
第二节 图论初步	22
一、图的概念	22
二、树和割集	23
三、连通分支的性质	26
四、图的矩阵表示	27

第三节 统计假设的检验	28
一、U 检验法	29
二、 χ^2 检验法	35
参考文献	36
第三章 化工过程数据的校正和估计理论	37
第一节 稳态过程的数学模型	37
第二节 线性问题的解	38
一、满足化学元素平衡的校正数据法	40
二、满足物料平衡的校正法	44
三、复杂化工系统的平衡方程和数据校正	47
第三节 非线性问题的解	52
一、线性化方法	53
二、两步法	55
第四节 校正值和参数的方差估计	60
第五节 测量数据的空间冗余性和时间冗余性	63
一、时间冗余	63
二、空间冗余	64
第六节 测量误差的方差估计	65
一、直接法	65
二、间接法	66
第七节 数据校正问题的序贯模块算法	77
第八节 动态过程的数据校正技术	83
一、数学模型	84
二、数学模型的解	86
三、解的稳定性	90
参考文献	94
第四章 化工过程数据的分类	95

第一节 面向方程的方法	96
一、线性系统	96
二、双线性系统	100
第二节 面向流程的方法	110
一、分类规则	116
二、可观察性分类的算法	123
三、冗余性分类的算法	130
参考文献	136
第五章 化工过程的稳态检验	137
第一节 组合统计检验法 (CST)	137
一、假设与模型	137
二、组合统计检验程序	138
第二节 MTE 法	143
一、假设与模型	143
二、MTE 法	143
参考文献	146
第六章 过失误差的侦破与识别	147
第一节 概述	147
第二节 整体检验法	150
一、过失误差侦破	150
二、过失误差识别	152
第三节 约束方程检验法	170
一、过失误差侦破	170
二、过失误差识别	171
第四节 测量数据检验法	178
一、过失误差的侦破与识别	178
二、实用算法	179

第五节 其它方法·····	184
一、广义似然比法·····	185
二、贝叶斯方法·····	186
三、最大检定功效方法·····	188
第六节 总结·····	190
参考文献·····	204
第七章 数据校正实用化技术的发展·····	206
参考文献·····	209

第一章 绪 论

第一节 过程系统测量数据校正的意义

通常在过程工艺、工程及自动控制的设计、研究和生产操作中，经常要分析来自单元设备，甚至复杂过程的一系列测量数据，以便掌握它们的运行特性，改善操作。有时用这些测量的数据确定数学模型中的未知参数，用测量值作反馈控制，实现过程监控或最优化控制。根据测量数据作出单元设备或全过程的物料衡算和热量衡算，为设计提供数据，等等。所以，测量数据是许多技术工作的基础和出发点，它的可靠性和正确性直接影响上述工作的质量。以研究开发工作为例，研究测量数据的目的是掌握过程的内在规律，而就这种规律而言，研究人员是不能直接看到或摸着的，只能通过分析测量数据来掌握它。可以说，测量数据是现象，内在规律是本质。研究者的任务是透过现象看本质。如果看到的现象是一种假象，将不可能掌握真正的规律，所以研究者要善于辨别现象的真假。

本书以化工过程为例，讨论过程系统测量数据校正技术。

一、化工过程测量数据校正的必要性

一般情况下，化工过程数据（Chemical Process Data），

又称工艺数据，指的是物料流率、组成、温度、压力和相分率等等。由于测量中不可避免的误差，测量值不能精确地符合化工过程的一些内在物理和化学规律，如化学反应计量关系，物料平衡和热量平衡等等。这种现象称为测量数据的不平衡性 (inreconciliation)。产生不平衡性的原因是测量数据有误差，它又可分成随机误差和过失误差两大类。前者受随机因素的影响而产生，服从一定的统计规律。任何测量数据都含有随机误差。后者可能是由三方面情况发生而引起的：测量仪器失灵，操作不稳定和设备有泄漏现象。另一方面，从化工装置采集到的测量数据是不完整的。例如由于安装测试仪表和进行测试的代价昂贵，测量技术不可行，条件苛刻不允许采样或仪表因故不工作等原因，使得不可能采集到所有测量值。不平衡性和不完整性的数据给过程分析和研究工作带来许多困难，甚至失败。所以，对一组化工过程数据的测量值进行处理，是为了提高它的精确性和平衡性，给出它们的校正值。对缺少的数据（有些场合下称为参数），设法用已测数据和一些物理或化学规律予以估算。数据经过这番去伪存真的加工处理后，其有用的信息量就得到很大的增加。

二、测量数据校正技术发展的历史沿革

Kuehn 和 Davidson (1961)^[9] 在从事用计算机控制工艺过程的研究中，首先提出对测量的化工过程数据要进行校正，校正的准则为：在满足物料平衡和热量平衡的条件下，要求校正值与它对应的测量值的偏差的平方和最小。从数学角度讲，就是求满足一组等式约束方程的最小二乘法解。但是，他们没有注意到测量数据中有可能存在过失误差

(Gross Error), 更没有提出过失误差的鉴别方法 (Identification)。Nogita (1972)^[19] 由于提出对测量数据进行正态统计量检验一致性 (Consistency) 准则, 从而对线性物料平衡方程的情况建立了侦破 (Detection) 和识别过失误差的算法。Murthy (1973)^[13, 14] 专门讨论了反应器的物料平衡算法, 他要求进入和离开反应器的物料流率数据能满足化学元素平衡或反应计量关系 (都是线性关系), 以此校正测量数据。Madron 等人 (1977)^[11] 在反应器的数据校正工作方面又比 Murthy 工作进了一步, 他处理了非线性的物料平衡方程, 用 χ^2 统计量检验数据的一致性和识别过失的测量数据。Nogita 是在完成了数据校正之后再作一致性检验。而 Madron 是先检验一致性, 后校正数据, 这更为合理。Knep-
per 等人 (1980)^[7] 将测量数据的校正和参数估计融汇成一个整体进行处理, 并认为过程数据要满足的关系式是一种约束关系, 约束方程式可以是线性的或非线性的, 也可含有待估的参数。

对化工单元设备问题, 由于涉及的物料流股的数目不多, 解题规模也比较小, 可以直接使用拉格朗日 (Lagrange) 乘子法求解。对复杂的化工过程问题就不同了, 涉及数以百计, 甚至千计的物流, 数百台设备和数十个组分是常有的事, 从而使解题规模非常庞大。对它直接求解需要耗费计算机的大量存贮单元和计算时间。因此, 在校正计算前, 先做些缩小解题规模的工作。这与过程数据的分类分不开。化工过程数据可分成四类, 测量数据按其冗余度 (Redundancy) 分为校正型 (有冗余度) 和非校正型 (无冗余度), 未测量数据按其可观察性 (Observability) 分成可估算型 (可观察) 和不可估算型 (不可观察)。其中只有校正型

测量数据和可估算型未测数据能参加运算。如果在作校正和估算运算前不把非校正型测量数据和不可估算的未测数据剔除,就要碰到秩为零的矩阵求逆问题而使计算工作无法进行。数据的类型与流程的结构关系十分密切。特别对复杂流程的数据分类,只能通过计算解决。一旦数据作了分类,通过二个或二个以上单元的合并操作,从流程中消去非校正型测量数据和不可估算型未测数据,流程规模相应地缩小。在数据分类的算法方面,各国学者基本沿着两条思路展开,一条是以流程的平衡方程为出发点,称为面向方程法,另一条是以流程的网络图为基础,用图论工具进行分类,称面向流程法。前者的理论阐述简单明了。在具体应用时,尤其对大系统需用大容量计算机。后者虽很直观,但方法繁琐。在面向流程法的开发工作中,首先由 Vaclavek (1969)^[26]根据化工流程的拓扑性,提出单组分流股情况下的过程数据分类法,后来 (1976)^[27]又给出了多组分流股情况下的分类法,并进行了程序化。同时也为化工过程作多组分物料平衡时选择必要的测量数据以及确定所需的测量位置构划了算法的原则。Mah 等人(1981)^[22,23]以图论为工具探讨单组分下复杂化工过程中的数据分类理论与算法,以后 (1987)^[1]又给出了多组分的分类法。在面向方程的分类法路子上, Romagnuly(1980)^[20,24]由 Stadther (1974)稀疏方程解法导出数据分类算法,它适用于线性和非线性系统,比较普遍化。他认为未测变量的可估算性取决于它是否为仅含测量数据和可估算型未测数据的平衡方程的输出。但是由它算出的不可估算型未测数据,通过平衡方程的组合,实际上却是可估算型未测数据。这是该法的缺点。Crowe 等人 (1983)^[3,4]用投影矩阵法分类数据,适用于线性系统和可线性化的双线性系

统, 理论严谨。但是构造投影矩阵颇为复杂。袁永根 (1985)^[30,32] 提出用零度矩阵取代投影矩阵, 收到同样效果, 但是零度矩阵构造简单。

对线性系统的校正问题, 有严格的分析解。解表现为一系列矩阵乘积和求逆。但是对大的复杂流程而言, 大矩阵的运算不仅很费计算机的存贮空间和 CPU 时间, 而且大矩阵的求逆过程往往会出现病态 (stiff) 问题, 影响计算工作顺利进行。袁永根 (1992)^[33] 开发的序贯模块算法, 从另一条路子给出了线性校正问题分析解法。它可以沿流程一个模块一个模块地计算, 避开了矩阵的求逆运算。

对复杂流程的测量数据的过失误差侦破和识别方法也要作新的研究, Mah 等人 (1982)^[12,10] 认为 Nogita 和 Madron 的一致性统计检验法是整体性检验 (Global Test), 它只能表明测量数据组中有或无过失误差的测量数据存在, 而不能定位。若用筛选法, 对大系统而言, 计算工作量十分庞大。于是提出局部检验法。他提出了约束方程检验法 (Constraint Test), 它能指出某一约束方程内所含的测量数据是否存在过失误差, 这大大地缩小了识别的范围。后来又开发了测量数据检验法 (Measurement Test), 能直接定位哪些测量数据存在过失误差。上述三种过失误差的识别方法都是建立在统计假设检验理论上, 仅适用于测量过程引起过失误差的识别, 如测量仪表失灵所致。实际情况中有时会由系统泄漏引起测量数据中存在过失误差。反映在校正问题中, 是平衡方程模型不正确, 因为原模型没能计入泄漏。统计假设检验法是无法识别它的。Mah 等人 (1987)^[16] 提出用广义似然比法 (Generalized Likelihood Ratio), 它提供了一个广泛识别过失误差的来源的方法框架, 过失误差既可以是测量仪

表或控制器所引起，也可是模型不正确所引起。

识别过失误差都是采用了概率和统计方法。这就存在一个识别的正确程度问题，换句话讲，判定某一测量数据存在过失误差，此结论成立的概率是多少。将这概率值称之为检验的能力 (The Power of The Test)。一种是充分利用当前的信息：约束方程结构，测量数据的值，值的变化范围和误差等，未计算出检验能力^[10]，另一种是不仅利用当前的数据，还利用历史数据来提高检验能力，Mah^[25]将概率论中贝叶斯理论应用于此。

在测量数据的过失误差侦破和识别计算中，测量数据的方差值的正确性直接影响侦破和识别工作的准确性。因此如何正确地估算出测量数据的方差就显得格外重要。传统的方法是在化工过程处于稳态时对某一测量点在不同时刻重复采集测量数据，用方差分析法估算出它的方差值。这是利用了测量数据的时间冗余性，方差估计值的精确性与时间冗余度成正比。Mah^[2]提出测量数据的空间冗余性概念，使用化工过程在某一时刻的不同测量点的一组测量数据，计算约束方程的残差，由此也能估算出各测量数据的方差。这时，方差估计值的精确性与空间冗余度成正比。Darouach^[5]对Mah的方法作了改进，并对相关测量数据也比较“稳健”(Robust)。

对一组测量数据，判断它是否是在系统处于稳态情况下采集的，显然有它的实际意义和理论上的重要性。Mah (1986)^[15]提出用组合统计检验法 (Composite Statistical Test) 和 MTE 法 (Mathematical Theory of Evidence)^[17]，将采集的测量数据按采集时间所属的时间区间分组，统计检验相邻二区间的测量数据的数学期望值是否相等。若相等，

意味着系统处于稳态，否则为非稳态。

到 90 年代初，对非稳态，亦即是动态系统的数据校正技术有了实质性的发展。Darouach (1991)^[5]对线性动态系统校正问题给出了分析解，并证明了解的收敛性。对于动态系统的过失误差识别工作也有了好的开端，Mah 等人 (1988)^[18]将广义似然比法 (GLR) 推广用于动态系统，它只适用于线性动态系统，而且系统在稳态附近变化，不能用于开车，停车或从一个稳态向另一个稳态过渡。此后，他们 (1992)^[8]又将动态过程看作随机动态系统，将质量控制中统计过程控制 (SPC) 图技术，如 CUSUM 图，用来判别是否存在过失误差，然后用 GLR 法识别和估计过失误差。该法适用于线性，离散时间的动态系统，而且在稳态附近操作，要求模型和测量值的噪声服从正态分布，这种噪声既可是白噪声，也可是时序相关的。

第二节 测量数据校正技术的应用与研究

一、测量数据校正技术的应用领域 和商品化软件

测量数据校正技术的应用领域有：

1. 计划与统计管理

工厂的计划管理，统计报表和生产决策都要以生产装置的物料和能耗的正确测量数据为依据。带有误差的测量数据会使管理人员无法掌握工厂的真实经济效益。使用数据校正技术为管理人员提供可靠的生产数据。