

郑 娆 王 耘 编著

TIAOKONG LIUTU JIANMO  
YUANLI YU YINGYONG

# 调控流程图建模 原理与应用

CSTR



化学工业出版社

· 014008472

TQ062

16

郑 晓

王 耘

编著

TIAOKONG LIUTU JIANMO  
YUANLI YU YINGYONG

# 调控流图建模 原理与应用



北航

C1697891



化学工业出版社

· 北京 ·

TQ062  
16

551800410

本书从复杂系统的共同特点出发,强调系统组成单元对系统过程单元的调节与控制关系,在实体语法系统形式化方法的基础上,提出调控流程图建模方法,并建立了针对调控流程图的定性仿真技术、故障诊断技术和模型量化方法。以 CSTR 过程、TE 过程和原油蒸馏过程为例,介绍了调控流程图建模与仿真在化工过程中的应用思路;以糖尿病生化过程建模和中药作用机理解析为例,介绍了调控流程图建模与仿真在医药领域的应用思路。

本书强调原理与技术的结合,强调不同学科之间的内在联系与交叉,为从事复杂系统研究的研究人员提供了一种新的建模方法和应用技术,适合于相关科研人员与研究生阅读。

### 图书在版编目 (CIP) 数据

调控流程图建模原理与应用/郑晓,王耘编著. —北京:化学工业出版社,2013.9  
ISBN 978-7-122-18186-2

I. ①调… II. ①郑… ②王… III. ①化工过程-流程图-系统建模 IV. ①TQ062

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2013) 第 186618 号

责任编辑:段志兵  
责任校对:王素芹

文字编辑:孙凤英  
装帧设计:张辉

出版发行:化学工业出版社(北京市东城区青年湖南街13号 邮政编码100011)

印刷:北京永鑫印刷有限责任公司

装订:三河市宇新装订厂

710mm×1000mm 1/16 印张12 $\frac{3}{4}$  字数235千字 2014年1月北京第1版第1次印刷

购书咨询:010-64518888 (传真:010-64519686)

售后服务:010-64518899

网 址: <http://www.cip.com.cn>

凡购买本书,如有缺损质量问题,本社销售中心负责调换。

定 价:49.00 元

版权所有 违者必究

# 前言

自科学诞生以来，它以简洁、精炼和概括的特征，使无数最具智慧的科学家投身其中，构建起科学的大厦。科学之美，在于它透过表象，看清本质，对共性规律严谨、客观和可重现的表述方式，在于这些规律对人类生活的指导性价值。科学之所以能够达到这样的成就，在于它从众多现实体系中剥离、抽象出研究对象的方法论，在于促使这种抽象能够回归到现实世界的技术途径。然而，随着科学知识的增长，科学分科越来越细，科学研究越来越深入，研究结论的针对性越来越强，科学正向各个领域的细微处蔓延生长，人们越来越难以看清科学的全貌，不同领域之间的差异越来越大，不同领域之间的沟通越来越困难。在这种高度分化的同时，必然对集成融合的要求越来越高，因而出现了信息论、系统论、控制论等横断学科。横断学科不以某一领域的具体系统为研究对象，而研究存在于多个学科领域的抽象对象，研究成果亦具有广泛的适用性。这些横断学科的诞生和发展为很多领域注入了新的活力，相应的交叉学科如雨后春笋般蓬勃而出，并成为推动科学发展的新的动力。

系统论研究系统的一般模式、结构和规律，寻求并确立适用于一切系统的原理、原则和数学模型，是具有逻辑和数学性质的一门科学。对系统的数学建模与数学分析是其主要研究手段，建模方法的建立是系统科学的主要工具之一，也是系统科学的主要研究内容之一。尤其对于现代科学和工程所面对的复杂系统而言，建模和分析方法显得尤为重要。在这些复杂系统中，具有代表性的自然科学领域最为典型的有系统生物学领域、复杂化工过程领域和中医药现代化研究领域。

系统生物学是系统论与生物学交叉产生的新兴学科，其目的在于研究生物系统的构成、特征与规律，其主要任务是在对生物信息融合集成的基础上建立生物系统模型，并借以分析和研究生物系统的动态特征与干预方式。随着人类基因组计划的完成，大量的信息亟需有整合能力的建模方法推动这一领域的发展。

复杂化工过程是系统论与化学工程交叉所产生的研究领域，其目的在于研究集物质流、信息流、能量流为一体的化工过程的动态规律，其任务包括对生产工艺的设计、优化和对生产过程的有效控制，保证化工生产的安全性、稳定性、经济性。随着化工生产规模的逐渐增长和信息化技术在化工领域的广泛应用，化工生产过程的复杂性对数学建模的需求更为突出。

中医药是我国传统医学,从系统科学的角度而言,它是一门处理临床复杂性问题的学问,不管是中医司外揣内的诊断模式,还是临床用药的遣药组方,都与中医基础理论所建立的阴阳五行、脏腑经络整体模型息息相关。虽然这种模型不是一种严格的数学模型,然而其所包含的过程和思想却有着深刻的数学内涵。如果能够利用系统建模的方法对中医药进行研究,将对中医药的发展产生重要影响。

三个学术领域,所研究的具体对象虽然不同,但都具有复杂系统的特征,都可以并且需要利用系统建模的方法进行研究。三个领域的研究对象都是由众多环节所组成的复杂过程。在系统生物学中,表现为生化反应过程;在复杂化工过程中,表现为物质、能量、信息的传递过程和化学反应过程;在中医药中,则表现为人体疾病、健康等状态的变化过程。三者 in 表达形式上具有共性的特征。从研究内容上,三者又有交叉,包括生物学与复杂化工过程交叉而产生的生物化工领域,中医药与生物学交叉而产生的中医药系统生物学领域,中医药与复杂化工过程结合的中药生产过程的质量控制领域。如果能够有效整合不同学科或领域的优势理念与技术,针对这些学科的共同特点,建立具有广泛适用性的建模方法,必将对各学科产生积极的影响,并将对学科的交叉与融合产生积极的推动作用。

基于上述考虑,本书从三个学科中抽提出过程的一种基本结构——调控流图。针对这一基本结构,构建了复杂过程的定性、定量相结合的调控流图建模方法和相应的应用技术,并以 CSTR (Continuous Stirred Tank Reactor) 过程、TE (Tennessee Eastman) 过程、原油蒸馏过程等为研究载体,建立基于定量模型的故障监测技术、基于定性模型的故障诊断技术,并以糖尿病生物过程、中药作用过程为例探讨了调控流图建模方法在生物学、医学中应用的可能性。虽然这一建模方法的基本思想来源于三个不同的学科,但其实用性并不局限于这三个学科,在具有类似结构的其他学科应该也具有广泛的实用价值。

本书的研究工作得益于国家自然科学基金的支持,得益于北京化工大学王奎升教授、江波教授、钱才富教授,北京中医药大学乔延江教授,中国石油大学王德国教授,北京科技大学王立教授,北京航空航天大学徐国强教授,中国军事科学院曾宪钊教授等专家学者所提出的建设性意见,得益于北京化工大学张贝克教授在过程仿真工作中所给予的支持与帮助。成书过程中得到研究生骆四君、高长欣、于晓娜的大力协助,化学工业出版社的编辑对书稿的修改和完善提出了宝贵意见,在此一并表示衷心的感谢!

鉴于本书的研究跨越了不同学科,笔者的学识水平和实践能力是有限的,书中难免存在不妥之处,敬请广大读者批评指正。

郑尧 王耘

2013年9月 于北京

## 符号说明

### 主要符号:

|            |                                                          |
|------------|----------------------------------------------------------|
| $c$        | 浓度, $\text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$                     |
| $c_p$      | 比热容, $\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ |
| $E$        | 活化能, $\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$                    |
| $F$        | 流率, $\text{L} \cdot \text{min}^{-1}$                     |
| $k$        | 热交换系数                                                    |
| $K_0$      | 反应速率常数, $\text{min}^{-1}$                                |
| $\rho$     | 密度, $\text{kg} \cdot \text{L}^{-1}$                      |
| $R$        | 气体常数                                                     |
| $V_s$      | 反应器体积, $\text{L}$                                        |
| $\Delta H$ | 反应热, $\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$                    |
| $T$        | 温度, $\text{K}$                                           |

### 缩略词:

|      |            |
|------|------------|
| ANN  | 人工神经网络方法   |
| CSTR | 连续搅拌釜式反应器  |
| EGS  | 实体语法系统     |
| ES   | 专家系统       |
| PCA  | 主元分析法      |
| PLS  | 偏最小二乘法     |
| PSO  | 粒子群优化算法    |
| QPT  | 定性过程理论     |
| QSIM | 定性仿真算法     |
| QTA  | 定性趋势分析     |
| RFG  | 调控流图       |
| SDG  | 符号有向图      |
| SVM  | 支持向量机      |
| TE   | 田纳西-伊斯特曼过程 |

# 目 录

## 第 1 章 绪论

1

- 1.1 复杂系统建模与仿真方法概述 ..... 1
  - 1.1.1 复杂系统建模与仿真研究现状 ..... 1
  - 1.1.2 复杂过程建模常用方法 ..... 4
- 1.2 复杂过程故障诊断 ..... 6
  - 1.2.1 动态系统故障诊断 ..... 6
  - 1.2.2 化工过程故障诊断 ..... 8

## 第 2 章 实体语法系统

11

- 2.1 实体语法系统基本概念 ..... 12
- 2.2 实体语法系统与数学、复杂系统的关系 ..... 13
- 2.3 实体语法系统与涌现性 ..... 14

## 第 3 章 调控流图建模方法

17

- 3.1 调控流图的定义 ..... 17
  - 3.1.1 调控流图的形式化定义 ..... 17
  - 3.1.2 定性调控流图的形式化定义 ..... 20
- 3.2 调控流图的建模方法 ..... 21
  - 3.2.1 基于工艺流程图的调控流图建模方法 ..... 21
  - 3.2.2 基于数学模型的调控流图建模方法 ..... 24
  - 3.2.3 调控流图建模与相关建模方法的差异 ..... 26
- 3.3 CSTR 系统的调控流图建模 ..... 27

## 第 4 章 基于调控流图的定性仿真

32

|       |                     |    |
|-------|---------------------|----|
| 4.1   | 调控流图定性仿真系统          | 32 |
| 4.1.1 | 定性仿真系统的基本原理         | 32 |
| 4.1.2 | 调控流图定性仿真系统的形式化定义    | 33 |
| 4.1.3 | 调控流图定性仿真系统中的推理规则    | 34 |
| 4.2   | 基于调控流图的 CSTR 定性仿真系统 | 38 |

## 第 5 章 基于调控流图的故障诊断

40

|       |                   |    |
|-------|-------------------|----|
| 5.1   | 故障诊断与复杂系统涌现性的关系   | 40 |
| 5.2   | 基于调控流图的故障诊断系统     | 42 |
| 5.2.1 | 基于实体语法系统的故障诊断策略   | 42 |
| 5.2.2 | 调控流图故障诊断系统的形式化定义  | 42 |
| 5.2.3 | 调控流图故障诊断系统中的假设集成  | 43 |
| 5.3   | 基于调控流图的 CSTR 故障诊断 | 43 |

## 第 6 章 调控流图量化方法

47

|       |                          |    |
|-------|--------------------------|----|
| 6.1   | 调控流图量化的基本原理              | 47 |
| 6.1.1 | 基于 S-系统的调控流图量化方法         | 47 |
| 6.1.2 | 调控流图通用动力学方程              | 49 |
| 6.1.3 | 基于数据的调控流图量化方法            | 52 |
| 6.2   | 调控流图量化的步骤                | 53 |
| 6.2.1 | 基本步骤                     | 53 |
| 6.2.2 | 用于调控流图自动学习的粒子群算法         | 54 |
| 6.3   | 调控流图量化方法在 CSTR 系统中的应用    | 55 |
| 6.3.1 | CSTR 系统仿真                | 55 |
| 6.3.2 | CSTR 系统调控流图的 S-系统方程      | 55 |
| 6.3.3 | CSTR 系统调控流图的通用动力学方程      | 57 |
| 6.3.4 | 基于观测数据的 CSTR 的调控流图模型     | 59 |
| 6.3.5 | 基于调控流图通用动力学方程的 CSTR 故障监测 | 63 |

## 第 7 章 调控流图的动态人工神经网络

68

|       |             |    |
|-------|-------------|----|
| 7.1   | 人工神经网络      | 68 |
| 7.1.1 | 人工神经网络的发展阶段 | 68 |
| 7.1.2 | 常用人工神经网络    | 70 |

|       |                 |    |
|-------|-----------------|----|
| 7.1.3 | 神经网络与一些算法的联合使用  | 74 |
| 7.2   | 基于调控流图的动态神经网络模型 | 76 |
| 7.3   | 动态神经网络建模平台      | 80 |
| 7.3.1 | 平台设计思路          | 80 |
| 7.3.2 | 平台模块构建          | 81 |
| 7.3.3 | 平台的功能及应用        | 84 |

## 第8章 调控流图在TE过程故障监测中的应用

86

|       |               |    |
|-------|---------------|----|
| 8.1   | TE过程          | 86 |
| 8.2   | 建模方法          | 89 |
| 8.2.1 | 基本思路          | 89 |
| 8.2.2 | 模型的拓扑结构       | 89 |
| 8.2.3 | 模型的参数估计       | 91 |
| 8.3   | 基于模型的TE过程故障监测 | 92 |

## 第9章 调控流图在原油蒸馏故障诊断中的应用

95

|       |                     |     |
|-------|---------------------|-----|
| 9.1   | 原油蒸馏工业过程            | 95  |
| 9.1.1 | 技术背景                | 95  |
| 9.1.2 | 原油蒸馏工艺流程            | 96  |
| 9.1.3 | 原油蒸馏工业过程仿真系统        | 97  |
| 9.2   | 原油蒸馏过程的调控流图建模       | 99  |
| 9.2.1 | 建模思路                | 99  |
| 9.2.2 | 建模的基本原则             | 100 |
| 9.2.3 | 原油蒸馏过程的调控流图模型       | 101 |
| 9.3   | 基于调控流图模型的原油蒸馏过程故障诊断 | 101 |
| 9.3.1 | 原油蒸馏中的故障与故障诊断思路     | 101 |
| 9.3.2 | 调控流图的定性仿真与简化        | 102 |
| 9.3.3 | 故障诊断模型              | 105 |

## 第10章 调控流图在系统生物学中的应用

109

|        |               |     |
|--------|---------------|-----|
| 10.1   | 系统生物学         | 109 |
| 10.1.1 | 系统生物学提出的背景    | 109 |
| 10.1.2 | 系统生物学中的定性仿真技术 | 110 |

|        |                                       |     |
|--------|---------------------------------------|-----|
| 10.1.3 | 数据挖掘相关的 Dependency Network 与决策树 ..... | 111 |
| 10.2   | 糖尿病调控流图建模 .....                       | 111 |
| 10.2.1 | 糖尿病的病理机制 .....                        | 111 |
| 10.2.2 | 糖尿病调控流图模型 .....                       | 112 |
| 10.3   | 糖尿病调控流图模型的应用 .....                    | 116 |
| 10.3.1 | 糖尿病病理过程定性仿真 .....                     | 116 |
| 10.3.2 | 糖尿病关键靶点的识别 .....                      | 125 |

## 第 11 章 调控流图在中药作用机理解析中的应用

129

|        |                         |     |
|--------|-------------------------|-----|
| 11.1   | 中药作用机理研究 .....          | 129 |
| 11.1.1 | 中药作用机理的复杂性 .....        | 129 |
| 11.1.2 | 中药作用机理研究现状 .....        | 130 |
| 11.1.3 | 中药作用机理研究与系统生物学的关系 ..... | 133 |
| 11.1.4 | 中药作用机理研究存在的问题 .....     | 134 |
| 11.2   | 中药作用过程的调控流图模型 .....     | 135 |
| 11.2.1 | 建模思路 .....              | 135 |
| 11.2.2 | 中药作用机理调控流图模型 .....      | 135 |
| 11.3   | 中药作用机理解析平台的构建 .....     | 139 |
| 11.3.1 | 系统基本架构 .....            | 139 |
| 11.3.2 | 数据库建立 .....             | 141 |
| 11.3.3 | 推理引擎的建立 .....           | 148 |
| 11.3.4 | 平台网站建立 .....            | 154 |

## 第 12 章 调控流图研究与应用展望

161

## 附录

163

|      |                        |     |
|------|------------------------|-----|
| 附录 1 | 常见化工过程单元的调控流图模型 .....  | 163 |
| 附录 2 | 原油蒸馏仿真系统对故障的仿真数据 ..... | 177 |

## 参考文献

181

# 第 1 章

## 绪 论

### 1.1 复杂系统建模与仿真方法概述

#### 1.1.1 复杂系统建模与仿真研究现状

复杂性科学被誉为“21 世纪的科学”。它以复杂性和复杂系统为研究对象。关于什么是复杂性与复杂系统的问题，不同的学者有不同的理解，至今复杂系统和复杂性还没有统一的确切定义。它是区别于简单系统的包含大量相互作用主体的系统，具有非线性、多样性、不确定性、多层性、涌现性、自适应性、开放性等特征<sup>[1,2]</sup>。由于理论研究和验证往往非常漫长，而且许多真实的复杂系统不能或难以利用传统的实验方法进行的研究，对复杂系统进行建模和仿真成了一种必然的普遍适用的研究方法。

##### (1) 系统建模

建立模型的目的在于定量或定性地描述系统变量间的内在联系和变化规律，实现数学模型与实际系统在属性、行为等方面的等效关系。模型是对系统的简化描述。对于一般系统，常用的建模方法有多种。图 1-1 从不同的角度对常用的系统建模方法做了大致的分类。

根据系统的特征和理解系统的思维方式不

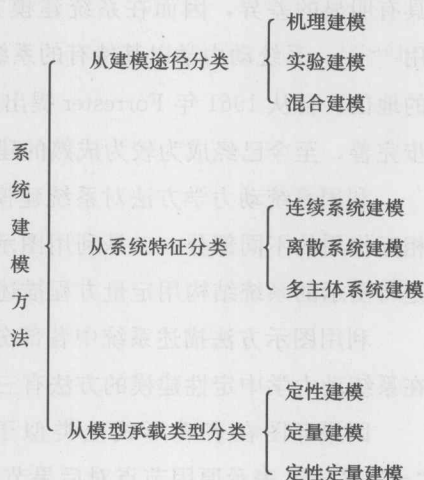


图 1-1 系统建模方法

同,目前对复杂系统进行建模的方法主要包括四类:离散系统建模、多主体系统建模、连续动态系统建模、系统动力学建模<sup>[3]</sup>。

① 离散系统建模 离散系统建模方法包括系统状态图法、流程图法和网络建模方法(包括因果图法、符号有向图法、小世界网络、Petri 网等)<sup>[4~6]</sup>。这类方法适用于不强调系统的动态特征或者可以将时间理解为离散时间的情况。由于这类方法能够用简洁的图示表征系统中各变量间的复杂关系,能够比较方便地实现基于模型的推理。在定性模型中,因果图法和符号有向图法是常用的方法。

② 多主体建模 多主体系统建模采用自底而上的方法,将系统中包含的多类对象视为具有自主行为的主体,首先对各主体的行为模式进行建模,然后依赖于各主体之间的相互作用进行系统仿真<sup>[7,8]</sup>。由于主体行为模式建模的灵活性,利用此方法容易对知识系统建模,并能够实现基于知识的不确定性推理,因而在基于知识的建模中具有一定的作用。

③ 连续动态系统建模 连续动态系统建模是建立数学模型的经典方法,利用系统的状态变量,采用代数方程和微分方程相结合的方式进行建模。为了建模的方便,目前已经将涉及的大量基本单元(如积分、微分、增益、延迟等)进行模块化,实现了动态系统的图形化建模(如 Simulink、LabView 等)。由于这类建模方法能够比较容易地引入反馈、传递函数等控制理论中的概念,目前在控制系统设计方面得到了较为广泛的应用。

④ 系统动力学建模 系统动力学建模属于连续动态系统建模的一类方法,也需要代数方程与微分方程的结合,但由于对系统的认识方式与一般动态系统建模方法具有明显的差异,因而在系统建模方法中独树一帜,在很多领域中得到广泛的应用<sup>[9~12]</sup>。系统动力学以其特有的系统思维和表达方式在系统的建模方法中占有重要的地位。自从 1961 年 Forrester 提出这种建模方法后<sup>[13]</sup>,在随后 40 余年的时间中逐步完善,至今已经成为较为成熟的建模方法。

利用系统动力学方法对系统建模,主要包括三个过程:一是将系统分解为具有相互作用的不同部分;二是利用图示的方法定性描述系统内各部分的相互关系;三是将图示的系统结构用定量方程描述。

利用图示方法描述系统中各部分的关系,是对系统进行定性建模的过程。目前在系统动力学中定性建模的方法有三种,分别为因果环图、流图和影响图。

因果环图在表现形式上类似于符号有向图,其符号只有两个,即“+”和“-”。“+”表示原因节点对后果节点是增量影响,“-”表示原因节点对后果节点是减量影响。

流图将系统中的变化分为实物流和信息流,实物流用存量和速率来表示。存量是实物的积累,速率是实物随时间变化的规律,实物流是实物集散的路径,源和汇是实物的来源或去向。用信息来控制速率变动的规律,信息来自系统外部变量或内部存量,信息流是从信息源到速率的路径。

影响图与因果环图类似,但区分了实物流和信息流,其中实物流用实线表示,信息流用虚线表示。

虽然系统动力学一般用于经济管理、组织行为学、市场营销、行为决策、社会科学、环境保护等领域,但从表现形式上来看,系统动力学流图非常接近于化工过程中物质流与信息流的关系,对化工过程的控制设计和故障诊断是一种理想的形象化模型。

## 图(2) 系统仿真

系统仿真是利用系统模型对真实的或假想的系统进行试验,并借助于专家经验知识、统计数据对试验结果进行分析研究,进而作出决策的过程。仿真是基于模型的,模型的特性直接影响着仿真的实现<sup>[14]</sup>。与建模方法相对应,系统仿真方法也有不同的类型。这里着重介绍与本书关系密切的基于定性模型的定性仿真。

定性仿真从系统的初始状态出发,利用系统定性模型的约束方程推导出系统的后继状态,最终从初始状态到结束状态的一系列状态构成系统的定性行为。由于定性模型中含有定性知识,决定了定性仿真实质上是一种推理而不是计算的过程。

由于定性仿真是以非数字手段处理信息输入、建模、行为分析和结果输出等仿真环节,通过定性建模推导系统的定性行为,能够在缺乏定量数据的情况下对系统的行为特征进行分析,因而在定量信息不足或不需要精确定量的建模与仿真研究中得到重视。对于复杂系统而言,由于变量多、结构复杂,获取定量数据的难度大、成本高,因而被认为是定性仿真应用的主要领域。

目前已发展很多定性仿真算法,如 de Kleer 和 Brown 提出的 ENVISION 算法<sup>[15]</sup>, Forbus 提出的定性过程理论(QPT, Qualitative Process Theory)<sup>[16]</sup>, Kuipers 提出的 QSIM (Qualitative Simulation) 算法<sup>[17]</sup>等。进一步的研究将定性仿真技术与模糊数学、图论、人工智能等结合发展了模糊定性仿真<sup>[18~20]</sup>、符号有向图法(SDG, Signed Directed Graph)<sup>[21,22]</sup>、Petri 网<sup>[23]</sup>方法等,并在化工过程、医疗、航天等领域得到应用<sup>[24~27]</sup>。

系统动力学作为复杂系统的一种研究方法,最初是对连续系统进行定量建模的一种方法,定性分析只是建立定量模型的一个前期准备过程,是建立定量方程的基础,并不能完全表达系统中的各种信息。经典的系统动力学分析是包含了定性分析、

建立定量模型、仿真、系统分析与评价在内的完整过程。但由于系统动力学建模本身独特的思维方式,其定性分析系统的方法对一些复杂问题的决策具有辅助思考的作用,因而有部分研究者单独应用系统动力学的定性分析方法对系统进行分析 and 评价,并也将此类研究方法称为系统动力学方法。这种现象在系统动力学的研究中引起了争论和分歧<sup>[28]</sup>。

部分研究者认为,系统动力学的定性模型并不能充分反映系统的动力学特征。例如因果环图实质上只强调各变量之间的信息联系,对实物流所体现的变量间的关系并没有体现。影响图虽然在表现形式上区分了实物流和信息流,并表明了正向影响和负向影响的区别,但与因果环图没有本质的区别,加上两类图示中循环因果关系的存在,难以由其对系统进行严格的分析<sup>[29]</sup>。系统动力学流图是三种定性描述方法中最能体现系统动力学建模思想的图形表示方式,它能够将实物流和信息流明显区分。在对复杂系统建模时,流图具有足够的灵活性,能够有效表达各因素之间的复杂联系。但是,由于流图对信息流的表达不区分正向影响和负向影响,因此难以从流图进行逻辑推理。

从严格意义上讲,系统动力学的三种定性描述方式都只是在一定程度上表达了系统各变量之间的联系,而真正能够描述系统的动力学特征的只能是定量的系统动力学模型。但系统动力学的定性模型与定量模型之间缺乏必然的联系,从定性模型并不能完全得到系统的定量模型<sup>[30]</sup>。

另外,由于定性仿真将输出系统所有可能的状态,其状态数目与系统中变量数目的增加呈指数增长关系,因而应用于复杂大系统的仿真时常因状态空间的组合爆炸而遇到困难<sup>[31,32]</sup>。因此改进复杂系统的定性表示方法,改进定性仿真系统中过滤器的设计思路,减少定性仿真过程中的不确定性因素,成为定性仿真系统的重要研究内容。在定性仿真中加入相当的定量知识,将定量与定性有机地结合起来,也会显著减少系统的预测行为数。

### 1.1.2 复杂过程建模常用方法

复杂过程是指由多种类型子系统按照不同方式相互连接、相互作用构成的动态系统,包括化工过程、生化反应过程、临床诊疗过程、经济演变过程等。化工过程是复杂过程研究的重要领域。化工过程是指将指定的原料经过传热、传质、化学物理反应、相变等一系列物质和能量的转换,最终变化形成规定质量要求产品的过程。化工过程中包含着物质流、能量流、信息流,多变量、非线性和不确定性,导致其动态特性十分复杂。在对化工过程的研究中,各种工艺过程划分为单元操作或单元

过程,继以考察其所含的传递过程(动量、质量和能量)及化学反应过程,成为后继的化工模拟、模型建立的关键内容<sup>[33]</sup>。近年来,化工过程研究对象逐渐向微观和宏观两个方向延伸,研究对象具有明显的非线性和多尺度特征,复杂化工过程的建模与仿真成为化工过程研究的重要手段和发展方向之一<sup>[34]</sup>。在传统的化工过程的建模方法中最常用的是基于机理的建模方法与基于实验的建模方法<sup>[35]</sup>。

机理建模是通过分析过程的物理化学本质和机理,利用化学工程学的基本理论,如质量守恒定律、能量守恒定律及化学反应动力学等基本规律,建立一套描述过程特性的数学方程式及边界条件。由于在这种模型中过程的内部机理可以很清楚地展示出来,也称为白箱模型。机理建模的特点是模型具有可预测性并且具有较强的演绎功能,但建模较困难。首先,这类建模主要以对系统的认识为基础,需要对所研究的化工过程具有充分和可靠的先验知识,但掌握丰富先验知识并不是很容易的,取决于研究者认识的深度与水平。其次,由于在建立模型的过程中必须做出一些简化和假设,否则所建模型就会过于复杂,不易求解,但这也同时使得机理建模与实际过程之间有相当的误差。最后,由于化工过程种类繁多,机理非常复杂,影响因素繁多,高度非线性,所以,要想根据机理来建立准确、可靠的数学模型是非常困难的。

基于实验的建模方法以工艺过程数据为基础,采用统计学方法、人工智能或机器学习方法建立不同变量间的定性、定量关系。由于这种模型对复杂化工过程系统的内部机理完全不了解,所以也称为黑箱模型。基于实验的建模方法常用的有支持向量机方法(SVM, Support Vector Machine)<sup>[36]</sup>、人工神经网络方法(ANN, Artificial Neural Network)<sup>[37,38]</sup>等。实验建模的特点是建模较为容易,但应用范围较窄,难以外推。由于受数据自身的限制,这种方法很难对化工过程进行精细建模和仿真,更难体现化工过程的多尺度复杂性特征。

为了提高实验模型的精度和泛化能力,近年来出现了一些综合的建模方法。如遗传算法、卡尔曼滤波、微粒群算法、主成分分析法和神经网络等机器学习方法相结合的建模方法<sup>[39~42]</sup>等。这些方法首先根据过程数据建立神经网络模型,然后用遗传算法等对原始训练集进行预处理和优化,来防止由于训练样本中的异常数据造成的过拟合等现象,以最大限度地提高模型的精度。研究者还提出了一些其他的综合建模方法,如连续系统建模(神经网络)和离散系统建模方法(Petri网)的结合<sup>[43]</sup>或是两种机器学习方法(如,神经网络和支持向量机)的组合<sup>[44]</sup>等。

另外一种建模方法是将机理建模和实验建模结合起来,形成混合建模,可以充分利用两者的优势而相互补充。这是一种“灰箱”建模方法,是化工过程建模领域的一个新的发展方向<sup>[45~47]</sup>。这种方法充分利用过程的各种先验知识,降低了对样本

数据的要求,使模型不仅具有良好的局部逼近性能,而且还有较好的全局性能,克服了黑箱模型所存在的外推能力差等缺点,可以准确地模拟复杂过程在大范围内的动态特性。常用的混合建模方法有机理模型与神经网络结合、机理模型与支持向量机结合等<sup>[48~50]</sup>。

尽管前述这些方法已在化工过程中广泛应用,但对化工过程中包含质量传递、热量传递、动量传递和化学反应在内的作用机理而言,在实际应用过程中建立复杂化工过程的机理模型仍然是一个具有挑战性的任务<sup>[51]</sup>。这促使化工过程的建模与仿真必须与复杂性科学的研究结合起来,建立复杂化工过程的建模方法与手段<sup>[34]</sup>。目前常用的复杂系统建模方法前面已有介绍。由于这些建模方法的表述形式与复杂过程联系并不密切,应用于复杂过程的多尺度机理建模仍然需要很多探索性工作,并未形成明确的思路和公认的方法体系。为此,有必要从复杂过程自身的特点出发,建立具有针对性的复杂过程建模方法。

## 1.2 复杂过程故障诊断

### 1.2.1 动态系统故障诊断

故障诊断技术于 20 世纪 60 年代出现于美国,后来在世界各国都逐渐受到重视,开始应用于航天、航空、核反应堆、热电厂、机器人等工业过程中,并取得显著经济效益和社会效益。故障是指系统中一个以上的变量或特性偏离了可以接受的正常范围<sup>[52]</sup>。根据系统运行过程中产生的各种信息来判断故障发生与否,并进而判断故障特征和发展趋向的过程称为故障诊断。故障诊断技术包含了故障检测、故障分离、故障辨识等内容<sup>[53]</sup>。故障检测就是判断系统中是否发生了故障以及检测出故障发生的时刻。故障分离就是在检测出故障后确定故障的类型和位置。故障辨识就是在分离出故障后确定故障的大小和时变特性。评价一个故障诊断系统的性能指标主要有:故障诊断的灵敏度、及时性、准确性、鲁棒性以及故障的误报率和漏报率等。

按照故障诊断中所优先依据的知识,目前动态系统故障诊断方法主要有基于定量模型的方法、基于定性模型的方法(包括基于知识的方法)、基于历史数据的方法三大类<sup>[54]</sup>。

#### (1) 基于定量模型的方法

基于定量模型的方法是化工过程故障诊断的基本方法,这类模型主要指系统的

解析模型。基于解析模型的方法是最早发展起来的,其基本思想是建立被诊断系统较为精确的数学模型,然后将系统的实际行为与系统模型进行对比,确定其差异,即产生残差,通过对残差进行分析和处理来对故障进行诊断和预测,这一过程也称为解析冗余。在正常情况下,残差为零,当系统出现故障时,残差明显呈现较大值。残差应该对故障的灵敏度较高,而对一些干扰和噪声的灵敏度较小。因此,故障诊断的关键问题就是过滤或抑制不确定性信号和未知输入响应的影响,从而能够更有效地进行故障分离。

根据残差产生方法的不同,基于定量模型的方法可分为状态估计法、参数估计法<sup>[55]</sup>、等价空间法<sup>[56,57]</sup>。状态估计法中又有观测器法<sup>[58,59]</sup>和滤波器法(如卡尔曼滤波、粒子滤波等)<sup>[60~62]</sup>。

要生成残差,就必须建立系统准确的模型,这个模型可以是机理模型也可以是经验模型,在实际工程设计中应用的多为多变量线性模型。而对复杂的非线性系统而言,建立精确的数学模型存在现实的困难,并且由于参数的增多,计算速度也会明显降低。而且这种方法过分依赖系统的数学模型,对于建模误差、参数扰动、噪声和干扰十分敏感,也使得这种方法难以适应实际系统的具体要求,因而并没有得到广泛的应用。

## (2) 基于定性模型的方法

基于模型的故障诊断方法起初所采用的模型多为系统的定量模型。但由于定量模型本身所存在的难以建立以及计算量大等问题,基于定性模型的故障诊断方法逐渐发展起来。对系统的定量模型进行定性化处理并进一步采用定性推理策略也为解决定量模型计算量大的问题提供了一类解决方法。

基于定性模型的故障诊断方法是定性建模与定性推理相结合的方法<sup>[63]</sup>,适用于系统复杂、无法建立精确数学模型的情况下。在定性模型建立时,知识获取的方法包括专家经验整理和对系统深层机理的推理。由于传统的专家系统中的知识是直接来自现实世界的观察中总结出来的,缺乏对系统内部机制的描述,当遇到原有专家知识之外的情况,则无以应对。这就需要对系统深层机理进行定性推理,进而得到系统的定性知识。根据定性知识的不同表达形式,定性模型又分为基于有向图的因果图法<sup>[64~68]</sup>,基于 QSIM、QPT 或因果序的定性物理模型法<sup>[69]</sup>,故障树法<sup>[70,71]</sup>,层次分析法<sup>[72,73]</sup>等。

基于定性模型诊断的搜索策略有两种<sup>[74]</sup>。第一种搜索策略是将系统正常状态作为一个参照模板来判断是否出现故障,并识别出故障在系统中的位置。这种方法不需要预先知道系统的所有故障类型,可以诊断出一些新的未知故障。第二种搜索策