



(10) 申请公布号 CN 117836730 A

(43) 申请公布日 2024.04.05

(21) 申请号 202280052106.9

(22) 申请日 2022.07.27

(30) 优先权数据

21190103.8 2021.08.06 EP

(85) PCT国际申请进入国家阶段日

2024.01.25

(86) PCT国际申请的申请数据

PCT/EP2022/071062 2022.07.27

(87) PCT国际申请的公布数据

W02023/012007 EN 2023.02.09

(71) 申请人 巴斯夫欧洲公司

地址 德国

(72) 发明人 S·S·萨马尔 O·瓦尔兹

H·施奈德

(74) 专利代理机构 北京市中咨律师事务所
11247

专利代理师 于静 刘薇

(51) Int.Cl.

G05B 19/418 (2006.01)

G05B 17/02 (2006.01)

G05B 13/02 (2006.01)

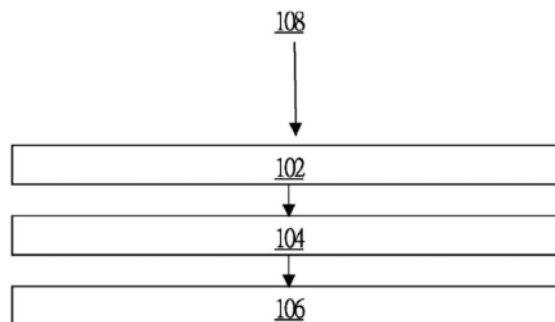
权利要求书2页 说明书10页 附图4页

(54) 发明名称

使用混合模型监控和/或控制化工厂的方法

(57) 摘要

本发明涉及一种用于监控和/或控制化工厂的计算机实施的方法。特别地,本发明涉及一种用于监控和/或控制化工厂中的物理化学过程的计算机实施的方法,该方法包括:(a)接收与物理化学过程相关的传感器数据;(b)通过向工厂模型提供传感器数据来确定至少一个物理化学参数,其中,该工厂模型包括:-机理模型,该机理模型包含至少两个方程,每个方程表示物理化学过程的一部分,以及-与机理模型相关联的数据驱动模型,其中,作为来自数据驱动模型的输出参数的标量的总数量少于机理模型的方程的数量;以及(c)输出由工厂模型确定的至少一个物理化学参数。



1. 一种用于监控和/或控制化工厂中物理化学过程的计算机实施的方法,该方法包括:
 - (a) 接收与该物理化学过程相关的传感器数据,
 - (b) 通过向工厂模型提供该传感器数据来确定至少一个物理化学参数,其中,该工厂模型包括:
 - i. 机理模型,该机理模型包含至少两个方程,每个方程表示该物理化学过程的一部分,以及
 - ii. 与该机理模型相关联的数据驱动模型,其中,该数据驱动模型是已通过基于多组历史数据的训练数据集进行训练的,该多组历史数据包括传感器数据和与化学反应相关的物理化学参数,并且其中,作为来自该数据驱动模型的输出参数的标量的总数量少于该机理模型的方程的数量,以及
 - (c) 输出由该工厂模型确定的该至少一个物理化学参数。
2. 如权利要求1所述的计算机实施的方法,其中,该至少一个物理化学参数包括反应收率、催化剂活性或装备结垢情况中的至少一种。
3. 如权利要求1或2所述的计算机实施的方法,其中,该传感器数据包括试剂的温度、压力和流速。
4. 如权利要求1至3中任一项所述的计算机实施的方法,其中,该数据驱动模型的输出用作该机理模型的至少一个方程的输入。
5. 如权利要求1至4中任一项所述的计算机实施的方法,其中,该数据驱动模型是人工神经网络。
6. 如权利要求1至5中任一项所述的计算机实施的方法,其中,该至少一个物理化学参数被输出到控制系统,该控制系统能够基于该物理化学参数来改变进行该物理化学过程的该化工厂中的装备的设置。
7. 如权利要求1至6中任一项所述的计算机实施的方法,其中,来自该至少一个数据驱动模型的输出参数是基于这些输出参数的灵敏度来选择的,其中,灵敏度是当该数据驱动模型的输出参数发生变化时这些物理化学参数的相对差异。
8. 如权利要求1至7中任一项所述的计算机实施的方法,其中,该数据驱动模型使用通过子集选择、正则化和降维中的一项或多项确定的部分传感器数据。
9. 一种存储有计算机程序的非暂态计算机可读数据介质,该计算机程序包括用于执行根据前述权利要求中任一项所述的方法的步骤的指令。
10. 通过根据前述权利要求中任一项所述的方法获得的物理化学参数用于监控和/或控制化工厂的用途。
11. 一种用于监控和/或控制化工厂中物理化学过程的生产监控和/或控制系统,该系统包括:
 - (a) 输入端,该输入端被配置为接收与该物理化学过程相关的传感器数据,
 - (b) 处理器,该处理器被配置为通过向工厂模型提供该传感器数据来确定至少一个物理化学参数,其中,该工厂模型包括:
 - i. 机理模型,该机理模型包含至少两个方程,每个方程表示该物理化学过程的一部分,以及
 - ii. 与该机理模型相关联的至少一个数据驱动模型,其中,该数据驱动模型是已通过基

于多组历史数据的训练数据集进行训练的,该多组历史数据包括传感器数据和与化学反应相关的物理化学参数,并且其中,作为来自该至少一个数据驱动模型的输出参数的标量的总数量少于这些机理模型的方程的数量,以及

(c) 输出端,该输出端被配置为输出由该工厂模型确定的该至少一个物理化学参数。

12. 如权利要求11所述的生产监控和/或控制系统,其中,该系统是该化工厂的分布式控制系统的一部分或与其连接。

13. 如权利要求11或12所述的生产监控和/或控制系统,其中,该传感器数据是从该化工厂中的传感器接收的。

14. 一种用于训练工厂模型的方法,该工厂模型适合于从化工厂中物理化学过程的传感器数据确定至少一个物理化学参数,该方法包括:

(a) 接收基于多组历史数据的训练数据集,该多组历史数据包括与该物理化学过程相关的传感器数据和物理化学参数,

(b) 通过根据该训练数据集调整参数化来训练工厂模型,其中,该工厂模型包括:

i. 机理模型,该机理模型包含至少两个方程,每个方程表示该物理化学过程的一部分,以及

ii. 与该机理模型相关联的至少一个数据驱动模型,其中,作为来自该至少一个数据驱动模型的输出参数的标量的总数量少于这些机理模型的方程的数量,以及

(c) 输出经训练的工厂模型。

使用混合模型监控和/或控制化工厂的方法

[0001] 本发明涉及一种用于监控和/或控制化工厂的计算机实施的方法。

[0002] 现代化工厂经过高度优化,以获得最大的输出量和最少的副产品。这使得能够以合理的低价格提供化学产品,并将可能影响环境的副产品减少到最低程度。在化工厂中会进行各种物理化学过程。例如,在化工厂中使用的一种特别有效的方法是用于化学反应的连续反应器:将试剂连续地进料到反应器中,与此同时产物从反应器中连续地输出。虽然一些物理化学值(如温度和压力以及产品质量)例如使用传感器就可以相对容易地确定,但许多其他重要的物理化学值(如催化剂降解度)却无法直接测量。然而,为了最大化化工厂的效率,尽可能详细地了解关于化工厂中所有物理化学值的信息是很重要的。理想情况下,这种信息可以实时获得。

[0003] 从化工厂获得这种“隐藏”物理化学值的一种非常有用的方式是使用可访问的传感器数据并将其置于物理模型中,该物理模型可以计算出应用物理或物理化学定律无法轻易测量的物理化学值。已经开发了许多这样的模型。然而,并不是对化工厂中的所有细节都有很好的理解,因此这些模型是有局限性的。为了改进这些模型,建议添加数据驱动模型。这些数据驱动模型也被称为黑盒模型,因为与物理模型相比,它们不会明显地揭示如何从其输入得出其输出。

[0004] G.D.Bellos等人在《化学工程与加工》,第44卷(2005年),第505-515页中披露了使用混合神经网络方法对工业加氢脱硫反应器的性能进行建模。应用神经网络来确定反应的动力学参数以及反应焓和氢消耗常数。因此,神经网络为一个单一反应输出四个参数。如果有足够的历史数据可用于训练神经网络,这种方法就会很有效。作者已收集了以相同方式操作的三个不同工厂的数据。然而,在大多数情况下,可供使用的历史数据并不多。特别是对于新工厂或制造特殊产品的工厂来说尤其如此。更糟糕的是,在这些情况下,通常甚至没有非常合适的物理模型可用,因此数据驱动模型需要比众所周知的过程进行更多的补偿。

[0005] 因此,本发明的目的是提供一种监控和/或控制化工厂的方法,该方法允许用最少的历史数据来准确地确定物理化学值。本发明的目的是提供一种可以容易地应用于不同化工厂的方法,即使它们的生产过程在机理上不是很好理解。该方法应该易于实施且资源使用量最少,同时产生的结果具有较高的准确性。该方法应该在较短的一段时间内得出结果,以便在工厂的运行开始偏离其最佳状态时能够迅速进行调整,从而实现高产物收率并将不期望的副产品和温室气体排放降至最低程度。

[0006] 上述目的通过一种用于监控和/或控制化工厂中物理化学过程的计算机实施的方法来实现,该方法包括:

[0007] (a) 接收与该物理化学过程相关的传感器数据,

[0008] (b) 通过向工厂模型提供该传感器数据来确定至少一个物理化学参数,其中,该工厂模型包括:

[0009] -机理模型,该机理模型包含至少两个方程,每个方程表示物理化学过程的一部分,以及

[0010] -与该机理模型相关联的数据驱动模型,其中,该数据驱动模型是已通过基于多组

历史数据的训练数据集进行训练的,该多组历史数据包括传感器数据和与化学反应相关的物理化学参数,并且其中,作为来自该数据驱动模型的输出参数的标量的总数量少于该机理模型的方程的数量,以及

[0011] (c) 输出由该工厂模型确定的至少一个物理化学参数。

[0012] 本发明进一步涉及一种存储有计算机程序的非暂态计算机可读数据介质,该计算机程序包括用于执行根据本发明的方法的步骤的指令。

[0013] 本发明进一步涉及通过根据本发明的方法获得的物理化学参数用于监控和/或控制化工厂的用途。

[0014] 本发明进一步涉及一种用于监控和/或控制化工厂中物理化学过程的生产监控和/或控制系统,该系统包括:

[0015] (a) 输入端,该输入端被配置为接收与该物理化学过程相关的传感器数据,

[0016] (b) 处理器,该处理器被配置为通过向工厂模型提供该传感器数据来确定至少一个物理化学参数,其中,该工厂模型包括:

[0017] - 机理模型,该机理模型包含至少两个方程,每个方程表示物理化学过程的一部分,以及

[0018] - 与该机理模型相关联的至少一个数据驱动模型,其中,该数据驱动模型是已通过基于多组历史数据的训练数据集进行训练的,该多组历史数据包括传感器数据和与化学反应相关的物理化学参数,并且其中,作为来自该至少一个数据驱动模型的输出参数的标量的总数量少于这些机理模型的方程的数量,以及

[0019] (c) 输出端,该输出端被配置为输出由该工厂模型确定的该至少一个物理化学参数。

[0020] 本发明进一步涉及一种用于训练工厂模型的方法,该工厂模型适合于从化工厂中物理化学过程的传感器数据确定至少一个物理化学参数,该方法包括:

[0021] (a) 接收基于多组历史数据的训练数据集,该多组历史数据包括与该物理化学过程相关的传感器数据和物理化学参数,

[0022] (b) 通过根据该训练数据集调整参数化来训练工厂模型,其中,该工厂模型包括:

[0023] - 机理模型,该机理模型包含至少两个方程,每个方程表示物理化学过程的一部分,以及

[0024] - 与该机理模型相关联的至少一个数据驱动模型,其中,作为来自该至少一个数据驱动模型的输出参数的标量的总数量少于这些机理模型的方程的数量,以及

[0025] (c) 输出经训练的工厂模型。

附图说明

[0026] 为了便于识别对任何特定要素或动作的讨论,附图标记中的一个或多个最高有效位是指第一次介绍该要素的附图编号。

[0027] 图1展示了本发明的方法和系统。

[0028] 图2展示了工厂模型的实例。

[0029] 图3展示了工厂模型的另一个实例。

[0030] 图4展示了工厂模型的另一个实例。

[0031] 图5展示了用于确定不同工厂模型修改时的灵敏度的实例。

[0032] 图6展示了使用本发明的生产过程的实例。

[0033] 本发明涉及一种用于监控和/或控制化工厂中物理化学过程的方法。图1展示了本发明的可能的实施方式。来自工厂108的传感器数据由输入端102接收。传感器数据被提供给处理器104,该处理器被编程为执行工厂模型。该工厂模型使用传感器数据作为输入,并使用物理化学参数作为输出。该物理化学参数由输出端106输出。

[0034] “监控”是指对化工厂的任何操作状态进行观察和记录。操作状态包括内部参数,比如仅与工厂相关的那些参数,如反应器温度、压力、耗电量、输入或输出材料流、搅拌器的转速、阀的状态、工厂内空气中蒸气的浓度、工厂内部的人数。操作状态还包括外部参数,比如与工厂环境的任何交换相关的参数,如化学蒸气的排放、热量、声音、振动、光线。记录可以意味着将原始数据存储到永久性数据存储设备上,或按照公司或当局要求的格式准备文档。

[0035] “控制”是指采取任何行动来改变化工厂的操作状态。这些行动可以是直接的,例如,改变阀的状态、通过额外加热或增加冷却来改变温度。这些行动也可以是间接的,例如,提示操作者采取行动——例如,更换过滤器或调整吞吐量。

[0036] “物理化学过程”是指涉及至少一种物质(比如,化学化合物或组合物)的处理或改性的任何过程。物理化学过程包括:化学反应;纯化,比如蒸馏、结晶、过滤、离心、倾析、浮选;制剂,比如混合、喷雾干燥、共挤出、涂布;或形状改变过程,比如研磨、模制、附聚、挤出。

[0037] “化学反应”是指涉及一组化学物种与另一组化学物种间的化学转化的物理化学过程。化学反应原则上可以包含一个基元反应。然而,实际上,大多数化学反应都包含多于一个基元反应。化学反应可以包含串联或并联或两者的基元反应。包含串联基元反应的化学反应的实例是缩合反应,在该缩合反应中,首先将亲核物种添加到亲电物种中作为第一基元反应,然后消除小物种(如水)作为第二基元反应。包含多个并联基元反应的化学反应的实例是燃烧反应,在该燃烧反应中,化学物种与氧反应形成各种不同的部分氧化物物种。

[0038] 化学反应可以以均相或非均相方式进行。均相化学反应涉及一个相,例如,气相或液相,比如溶液。非均相化学反应涉及至少两个相。该至少两个相可以具有不同的物态,例如,一个相是固相而另一个相是液相,或者一个相是固相而另一个相是气相,或者一个相是液相而另一个相是气相。如果该至少两个相不混溶,则它们可以具有相同的物态,例如两个不混溶的液相或两个不混溶的固相。

[0039] 化学反应可以以连续或不连续的方式进行,有时也称为间歇化学反应。在连续化学反应中,将试剂连续地进料到反应器中,在其中发生反应,与此同时产物连续地从反应器中输出。在不连续化学反应中,向反应器中注入试剂,然后发生反应,之后从反应器中收集产物。可以清洁反应器,然后再次向其中注入新试剂。

[0040] “基元反应”是指一种或多种化学物种在单一反应步骤中直接反应形成产物而无需可以观察到的或甚至可分离的中间体的化学反应。基元反应通常可以描述为具有单一过渡状态的反应。

[0041] “化工厂”是指用于制造、生产或加工一种或多种化学产品的工业目的的任何技术基础设施,即进行化学反应以生产化学化合物、通过搅拌化学化合物以生产制剂、提高化学化合物的纯度、通过循环利用废物以获得化学化合物、使化学化合物呈现不同的形式、或对

化学化合物或包含化学化合物的制剂进行包装。

[0042] 化工厂的基础设施可以包括装备或工艺单元,比如热交换器、诸如分馏柱的柱、熔炉、反应室、裂化单元、储罐、挤出机、制粒机、沉淀器、搅拌机、混合器、切割器、固化管、蒸发器、过滤器、筛网、管道、烟囱、过滤器、阀、致动器、研磨机、变压器、输送系统、断路器、机械(例如,重型旋转装备(比如涡轮机))、发电机、粉碎机、压缩机、工业风扇、泵、运输元件(比如输送机系统)、马达等中的任何一个或多个。

[0043] 进一步地,化工厂通常包括多个传感器和用于控制与工厂中的过程或过程参数相关的至少一个参数的至少一个控制系统。这种控制功能通常由控制系统或控制器响应于来自至少一个传感器的至少一个测量信号来执行。工厂的控制器或控制系统可以被实施为分布式控制系统(“DCS”)和/或可编程逻辑控制器(“PLC”)。

[0044] 因此,可以监控和/或控制化工厂的至少一些装备或工艺单元以生产一种或多种工业产品。监控和/或控制甚至可以用于优化一种或多种产品的生产。装备或工艺单元可以响应于来自一个或多个传感器的一个或多个信号而经由诸如DCS等控制器来监控和/或控制。另外,工厂甚至可以包括至少一个PLC来控制一些过程。化工厂通常可以包括多个传感器,这些传感器可以分布在化工厂中以用于监控和/或控制的目的。这种传感器可以生成大量数据。这些传感器可以被视为或也可以不被视为装备的一部分。因此,比如化学和/或服务生产等生产可以是数据密集型环境。因此,每个化工厂可以产生大量的过程相关数据。

[0045] 本领域技术人员将理解,化工厂通常包括可以包括不同类型的传感器的仪器。传感器可以用于测量一个或多个过程参数和/或用于测量装备操作条件或与装备或工艺单元相关的参数。例如,传感器可以用于测量过程参数,比如管道内部的流速、罐内的液位、熔炉的温度、气体的化学成分等,并且一些传感器可以用于测量粉碎机的振动、风扇的速度、阀的开度、管道的腐蚀情况、变压器两端的电压等。这些传感器之间的差异不仅可以基于它们所感测的参数,而且甚至可以基于相应传感器所使用的感测原理。基于传感器所感测的参数的传感器的一些实例可以包括:温度传感器、压力传感器、辐射传感器(比如光传感器)、流量传感器、振动传感器、位移传感器和化学传感器(比如用于检测诸如气体等特定物质的传感器)。在其所采用的感测原理方面存在差异的传感器的实例可以例如是:压电传感器、压阻传感器、热电偶、阻抗传感器(比如电容传感器和电阻传感器)等等。

[0046] 多个化工厂可以形成一个更大的生产单元。如本文所使用的术语“多个化工厂”是广义的术语,并且对于本领域普通技术人员来说具有其普通的和通常的含义,而并不局限于特殊的或定制的含义。该术语具体可以是指但不限于由具有至少一个共同工业目的的至少两个化工厂的综合体。具体地,多个化工厂可以包括物理和/或化学耦合的至少两个、至少五个、至少十个或甚至更多个化工厂。多个化工厂可以耦合,使得形成多个化工厂的化工厂可以共享它们的价值链、离析物和/或产品中的一个或多个。多个化工厂也可以被称为综合体、综合基地、一体化(Verbund)或一体化基地。进一步地,多个化工厂经由各种中间产品到最终产品的价值链生产可以分散在不同地点,比如分散在不同化工厂中、或者集成在一体化基地或化工园区中。这种一体化基地或化工园区可以是或者可以包括一个或多个化工厂,其中在至少一个化工厂中制造的产品可以用作另一化工厂的原料。

[0047] “传感器数据”是指表示由化工厂的传感器测量的生产工厂或其各部分的操作状态的任何数据。传感器数据可以直接从传感器接收。通常,传感器数据由化工厂的数字信号

控制器或可编程逻辑控制器收集,并从那里进行进一步传输。传感器数据可以在被传输之前例如由校准系统进行调整。来自化工厂的传感器数据也可以存储在存储介质上,例如,存储在硬盘驱动器上或云系统中的数据库上。因此,出于本发明的目的,可以从这种存储介质获得传感器数据。

[0048] 传感器数据可以包括任何可测量的物理化学值,比如温度、压力、pH、化合物的浓度或分压(比如氧气或水的含量)、试剂的流速、反应器中反应混合物的流速或反应器后产物的流速、搅拌器速度、粘度、浊度。通常,传感器数据还包括传感器的位置,特别是当多于一个传感器在装备的不同位置进行测量时。典型的实例是反应器入口处的压力传感器和反应器出口处的压力传感器。传感器数据还可以包括时间信息,即,传感器已收集到物理化学信息的时间,有时称为时间戳。

[0049] 传感器数据与被监控和/或控制的物理化学过程相关。术语“相关”必须以广义的方式理解,即,对物理化学过程产生影响或与物理化学过程的状态相关的传感器的任何信息。

[0050] 传感器数据可以直接从化工厂中的传感器接收,或者可以从数据存储介质接收。数据存储介质上的传感器数据可以是记录的传感器数据或操纵的传感器数据。操纵传感器数据的原因可能是模拟偏差并分析对物理化学参数的影响,目的是在现实发生这种情况时控制物理化学过程。实例可以是供热的变化,人们可能想要分析这种供热是否可以通过增加压力或改变流速来补偿。

[0051] 然而,为了控制化工厂,传感器数据优选地从化工厂中的传感器直接接收,优选地实时接收。实时涉及低延迟,即,延迟小于10秒或者甚至小于1秒。通常,延迟越短,化工厂的控制精度就越高。

[0052] 根据本发明的方法包括(b)通过向工厂模型提供传感器数据来确定至少一个物理化学参数。

[0053] “物理化学参数”是指表征物理化学过程并且理论上可以测量的那些信息。然而,实际上,这通常不可能直接通过传感器实现,例如因为不存在合适的传感器,传感器无法放置在可以检测到信息的位置,或者这种测量在经济上是不利的。物理化学参数可以是指化学物种,例如化学成分、浓度、压力、纯度、粘度、浊度。如果使用的话,物理化学参数也可以是指催化剂,例如化学成分、浓度、压力、纯度、活性、寿命、表面积。物理化学参数也可以是指装备,例如总压力、温度、某些部分(例如管道)的流速、沿某些部分的压降、壁上不溶物质的沉积量和/或沉积速率(也称为结垢)、(例如,热交换器中的)热流。

[0054] 通常,确定与监控和/或控制化学反应具有最高相关性的那些物理化学参数。与监控和/或控制特别相关的物理化学参数是反应收率、催化剂活性和装备结垢情况。对于某些情况,确定一个物理化学参数就足够了。在其他情况下,确定多于一个反应参数(例如,至少两个、三个、五个或十个)是有利的。以这种方式,可以获得化学反应的更详细视图,从而可以采取非常合适的措施来控制化学反应。通过向工厂模型提供传感器数据来执行确定。

[0055] “工厂模型”是指以数学方式描述化工厂中的一个物理化学过程或多个物理化学过程的模型。工厂模型接收传感器数据作为输入并输出物理化学参数。工厂模型包括机理模型和数据驱动模型。因此,工厂模型可以被称为混合模型。

[0056] “机理模型”是指基于自然科学基本定律的模型,例如物理、化学、生物化学原理、

热量和质量平衡中的任何一种或多种。因此,这种模型使用方程来表示这些原理。机理模型可以包括线性或非线性常微分方程、线性或非线性偏微分方程、线性或非线性代数方程、或者线性或非线性微分代数方程。这些方程与物理化学过程有关。

[0057] 机理模型的典型实例是对物理化学过程进行建模的化学动力学模型。本质上,这种模型由常微分方程或微分代数方程组成,描述了由一组化学反应消耗或产生的化学物种的动力学。常微分方程或微分代数方程组通常由速率定律组成,这些速率定律是描述在反应中消耗或产生化学物种的速度的代数方程。这种代数方程通常取决于化学物种的浓度、给定反应中的温度以及常数,这些常数通常是温度相关的。此外,诸如质量守恒等某些不变性也可以在这种机理模型中表示为代数方程。

[0058] 可以知道哪些机理模型最适合某种物理化学过程。在这种情况下,选择适当的机理模型是简单明了的。然而,如果不知道哪些机理模型非常适合物理化学过程,则可以为类似的物理化学过程选择一组机理模型。有时,可能没有类似的物理化学过程可用,原因可能是基本机制尚不清楚或是由于其他原因无法获得适当的信息。在这种情况下,从包含已知物理化学过程的各种机理模型的模型库中挑选任意机理模型可能就足够了。显然,这种任意机理模型将不太适合给定的物理化学过程。然而,相关联的数据驱动模型可以补偿至少部分偏差,因此对于要求较低的目的来说这样的结果可能就足够了。可替代地,任意挑选不同的机理模型,一个接一个地进行尝试并选择最适合物理化学过程的机理模型。这种选择可以是自动化的。因此,机理模型可以例如由计算机程序通过以下方式从模型库中选择:任意选择几个机理模型、将机理模型一个接一个地应用于物理化学过程、确定机理模型与物理化学过程的拟合程度并选择最佳拟合机理模型。

[0059] “数据驱动模型”是指根据训练数据集进行参数化的数学模型,用于反映诸如生产工厂的反应动力学等物理化学过程。训练数据集可以包括从实验或早期生产运行获得的传感器数据和物理化学参数。与纯粹使用物理化学定律推导出的机理模型相比,数据驱动模型可以允许描述难以或者甚至无法通过物理化学定律进行建模的关系。数据驱动模型的建立没有反映任何基本的自然物理定律。这些模型仅通过使用数据中的相关性来加以考虑。

[0060] 数据驱动模型优选地是数据驱动的机器学习模型。数据驱动模型可以是线性或多项式回归、决策树、随机森林模型、贝叶斯网络、支持向量机或者优选地人工神经网络。

[0061] 根据本发明,工厂模型包括机理模型,该机理模型包括至少两个方程,每个方程表示物理化学过程的一部分。在化学反应的情况下,每个方程可以表示化学反应的一个基元反应,或者每个方程表示几个基元反应,例如通过用一个假设的基元反应来近似表示。在蒸馏的情况下,每个方程可以表示一种化合物的汽化和冷凝。该工厂模型进一步包括与至少一个机理模型相关联的至少一个数据驱动模型。术语“相关联”意味着机理模型与数据驱动模型之间存在数据交换。例如,数据驱动模型的输出可以用作机理模型的方程的输入,或者机理模型的方程的输出可以用作数据驱动模型的输入。数据驱动模型的输出可以用于机理模型的多于一个方程。在这种情况下,数据驱动模型可以输出一个标量作为输出参数,该输出参数被用作机理模型的多于一个方程(例如,两个或三个方程)中的输入。数据驱动模型的一个输出参数甚至可以用于机理模型的所有方程。如果机理模型的输出被用作数据驱动模型的输入,则机理模型的一个输出参数可以用于一个数据驱动模型或多于一个(例如,两个、三个)数据驱动模型。机理模型的一个输出参数甚至可以用于所有数据驱动模型。机理

模型也可以具有多于一个标量作为输出参数,其中,每个输出参数用于不同的数据驱动模型。机理模型也可以具有多于一个输出参数,其中,有些输出参数用于多于一个数据驱动模型,而其他输出参数仅用于一个数据驱动模型。机理模型的输出也可以用作数据驱动模型的输入,并且该数据驱动模型的输出再次用作机理模型的输入,从而形成反馈环。这对于物理化学过程可以是有用的,在这些物理化学过程中,部分产物作为试剂再次使用从而实现循环利用。

[0062] 根据本发明,作为来自至少一个数据驱动模型的输出参数的标量的总数量少于机理模型的方程的数量。术语“总数量”意味着作为所有数据驱动模型的输出参数的所有标量之和。在本上下文中,输出参数可以是标量,因此作为输出参数的标量的数量等于输出参数的数量。输出参数可以是向量或矩阵。在这种情况下,作为输出参数的标量的总数量是指该向量或矩阵中的条目或元素的数量。

[0063] 工厂模型包含至少一个数据驱动模型。它可以包含一个数据驱动模型,也可以包含多于一个(例如,两个或三个)数据驱动模型。多于一个数据驱动模型可以完全相同或彼此不同,例如,工厂模型可以包含多项式回归和人工神经网络。如果使用一个数据驱动模型,则作为输出参数的标量的总数量等于该数据驱动模型的输出物理化学参数的数量。如果使用多于一个数据驱动模型,则将作为每个数据驱动模型的输出参数的标量的数量相加,以得出作为输出参数的标量的总数量。图2、图3和图4示出了在物理化学过程由包含三个方程的机理模型表示时工厂模型的外观可能是什么样子的一些实例。为了便于说明,圆角方框表示仅具有一个输出参数的数据驱动模型。对于具有多于一个输出参数的数据驱动模型,将显示相应数量的圆角方框。

[0064] 图2展示了包含接收传感器数据202作为输入的数据驱动模型206的工厂模型204。数据驱动模型206的输出用作机理模型208的输入,该机理模型可以使用传感器数据202作为附加输入。例如,数据驱动模型206可以输出方程210的校正常数。方程212和214仅使用传感器数据202作为输入。工厂模型204输出物理化学参数216。

[0065] 图3展示了包含两个数据驱动模型312和314的另一个工厂模型302。这两个数据驱动模型接收方程306和310的输出作为输入,并且各自输出物理化学参数316。例如,方程306和310可以输出由数据驱动模型312和314校正的物理化学参数。方程308不与数据驱动模型相关联。

[0066] 图4展示了另一种工厂模型404。该工厂模型包含接收传感器数据作为输入的一个数据驱动模型406。其输出用作所有方程410、412和414的输入。方程410、412和414输出物理化学参数416。

[0067] 数据驱动模型通常使用传感器数据作为输入,有时也会使用机理模型的方程的输出作为输入。为了减少对大量历史数据的需求,同时使工厂模型具有较高的准确性,将数据驱动模型的输入减少到最低程度是有利的。因此,只有一部分传感器数据用作数据驱动模型的输入。对用作数据驱动模型的输入的传感器数据进行适当选择可以包括以下选项中的一个或多个:

[0068] i) 子集选择,即,识别利用输入参数子集的数据驱动模型,其准确性接近于利用全部输入参数的数据驱动模型的准确性。文献中已知有多种高效识别这种子集的技术。

[0069] ii) 正则化或缩减方法,通常适用于基于神经网络和线性回归的方法,其中一些输

入参数的贡献被缩减为零或设置为零。这通常是通过惩罚数据驱动模型的损失函数来实现的。

[0070] iii) 降维是一种投影方法,例如,主成分分析,其中将输入参数投影到降维空间,产生“衍生输入参数”,这些输入参数然后用于数据驱动模型。这些方法的介绍可以在以下文档中找到:James、Gareth等人,An introduction to statistical learning[统计学习导论],第112卷,纽约:施普林格出版社,2013。

[0071] 本质上,所有这些方法都通过删除不太相关的变量或找到较低维度的“衍生输入参数”空间来执行与数据驱动模型相关联的输入参数的选择,从而降低数据驱动模型的复杂性。

[0072] 本发明中使用的工厂模型通常比单独的机理模型更准确,但与常规混合模型相比,训练数据驱动模型所需的历史数据更少。这种效果在选择灵敏度最高的数据驱动模型的那些输出参数时尤其明显。

[0073] “灵敏度”是指这种输出参数对物理化学参数的影响,即数据驱动模型的输出参数发生变化(即,增加或减少)时物理化学参数的相对差异。在某些情况下,仅选择灵敏度最高的输出参数就足够了。在其他情况下,可能需要使用灵敏度最高的两个或三个输出物理化学参数。通常,所选择的输出参数的数量是可用历史数据与反应参数所需准确性之间的折衷。

[0074] 在某些情况下,反应建模专家可能能够直接选择数据驱动模型的输出参数。然而,情况通常很复杂,因此必须系统地确定灵敏度,然后才能够选择适当的输出参数。图5展示了如何确定输出参数的灵敏度的方式。从包含化工厂中物理化学过程的细节的物理化学过程方案522开始,生成工厂模型502。该工厂模型502包含机理模型,该机理模型包含物理化学过程(504,506,508)的每个部分的方程。基于工厂模型502,通过将数据驱动模型与机理模型相关联来生成衍生工厂模型(510,518,526),其中,在每个工厂模型(510,512,514)中,数据驱动模型以不同的方式与机理模型相关联。在本实例中,数据驱动模型的输出用作机理模型的方程之一的输入。显然,可设想到更多选项,例如将数据驱动模型的输出用于机理模型的多于一个方程或者使用将机理模型的一个或多于一个方程的输出用作输入的数据驱动模型。对于每个工厂模型(510,512,514),数据驱动模型是用历史数据进行训练的。然后,使用验证数据来确定每个工厂模型(510,512,514)的输出(524,526,528)。对于每个工厂模型(510,512,514),数据驱动模型的输出是变化的,并且输出的变化被确定。相对差异指示灵敏度。发现灵敏度最高时的工厂模型可以用于本发明的方法。在该实例中,工厂模型502表现出低灵敏度530,工厂模型512表现出高灵敏度532,并且工厂模型514表现出中等灵敏度534。

[0075] 工厂模型可以进一步包括合并模型,该合并模型将机理模型和/或数据驱动模型的输出合并为物理化学参数。这对于包括一系列反应步骤的化学反应特别有用,即一个反应步骤的产物是下一个反应步骤的试剂。合并模型通常基于从自然定律中显而易见的边界条件。典型的边界条件是质量平衡:化学反应既不产生也不破坏质量,只是将化学物种相互转化。其他边界条件可以是某些参数的最小值或最大值,例如,浓度不能为负,或者开放连接的体积中压力不能相差太大。

[0076] 工厂模型用基于多组历史数据的训练数据集来训练,该多组历史数据包括传感器

数据和与化学反应相关的物理化学参数。“历史数据”是指至少包括传感器数据和物理化学参数的数据集,其中,每个数据集与单个物理化学过程运行相关联。因此,每个数据集包括与在预定义时间段内的物理化学过程运行相关联的数据。对于间歇过程,这种预定义时间段可以是一个间歇运行的开始到结束。对于连续过程,可以选择特征周期,例如从向反应器注入催化剂直到需要更换新催化剂的时间。历史数据可以从现有的要监控或控制的工厂获得。然而,历史数据也可以源自实验室、试验工厂或类似工厂。有时,可获得来自这些工厂中的多于一个工厂的历史数据。

[0077] 训练工厂模型通常是通过根据训练数据集调整参数化来完成的。在此上下文中,调整参数化意味着改变包括在工厂模型中的数据驱动模型中的参数,使得工厂模型的输出最接近地与训练集的反应参数相似。取决于数据驱动模型的类型,调整参数化的各种方法是已知的,并且在文献中有详细描述。

[0078] 根据本发明的方法进一步包括(c)输出由工厂模型确定的至少一个物理化学参数。输出可以意味着将物理化学参数写入非暂态数据存储介质上,例如,写入监控文件或控制文件中、将其显示在例如屏幕等用户界面上、或两者。根据本发明的方法可以被称为软传感器或虚拟传感器,其通过从由传感器数据表示的可观察量计算地导出物理化学参数来间接测量这些物理化学参数。

[0079] 还可以通过控制系统的接口来输出物理化学参数。这种控制系统可以接收物理化学参数,并基于这种物理化学参数来改变进行物理化学过程的化工厂中的装备的设置。作为实例,工厂模型已确定催化剂活性比最大催化剂活性降低一定值。控制系统可以接收催化剂活性并使输入阀降低通过反应器的试剂的流速。以这种方式,试剂在催化剂附近停留的时间更长,从而使降低的催化剂活性得到补偿。因此,试剂可以充分反应,以高收率和高质量产生期望的产物。

[0080] 本发明进一步涉及一种存储有计算机程序的非暂态计算机可读数据介质,该计算机程序包括用于执行根据本发明的方法的步骤的指令。“计算机可读数据介质”是指其上存储有一组或多组指令(例如,软件)的任何合适的数据存储设备或计算机可读存储器,这些指令体现了本文所描述的方法或功能中的任何一种或多种。指令还可以在其由可以构成计算机可读存储介质的计算机、主存储器和处理设备执行指令期间,完全或至少部分地驻留在主存储器和/或处理器内。可以进一步经由网络接口设备在网络上发送或接收这些指令。计算机可读数据介质包括例如服务器上的硬盘驱动器、USB存储设备、CD、DVD或蓝光光盘。计算机程序可以包含执行根据本发明的方法所需的所有功能和数据,或者可以提供接口以使该方法的各部分在远程系统上(例如,云系统上)得到处理。

[0081] 本发明进一步涉及一种用于监控和/或控制化工厂中物理化学过程的生产监控和/或控制系统。这种系统被配置为执行根据本发明的方法。因此,针对该方法描述的所有定义、实例和优选实施例也适用于该系统。

[0082] 根据本发明的系统包括被配置为接收与物理化学过程相关的传感器数据的输入端。这种输入端可以包括用于接收传感器数据的接口。输入端可以在本地或远程接收传感器数据,例如,经由与电信系统(比如互联网)的接口。输入端可以直接从传感器接收传感器数据,或者经由可编程逻辑控制器、分布式控制系统或包括云服务的存储介质接收传感器数据。该系统甚至可以是分布式控制系统的一部分。

[0083] 该系统进一步包括被配置为确定至少一个物理化学参数的处理器。处理器可以是本地处理器,包括中央处理单元(CPU)和/或图形处理单元(GPU)和/或专用集成电路(ASIC)和/或张量处理单元(TPU)和/或现场可编程门阵列(FPGA)。处理器还可以是与诸如云服务等远程计算机系统的接口。

[0084] 实例

[0085] 为了进一步说明本发明,图6展示了化工厂中用苯和丙烯分两步生产苯酚和丙酮的化学反应的实例:将来自苯供应器602的苯和来自丙烯供应器604的丙烯进行混合并注入由阀618控制的管式反应器606中。管式反应器606具有包含傅克(Friedel Craft)酰化催化剂的固体床,该固体床将苯转化为异丙苯608。将异丙苯608与氧气610一起进料至由阀620控制的管式反应器612中。管式反应器612还具有包含氧化催化剂的固体床,该固体床将异丙苯转化为苯酚和丙酮。产品流由阀622控制。收集苯酚和丙酮并对其进行提纯。反应器配备有温度传感器624和压力传感器626,其测量温度和压力并将这些值传送到分布式控制系统628。阀618、620和622配备有测量气流的传感器,因此可以确定每种试剂的分压。对应的值也被传送到分布式控制系统628。

[0086] 因此,由分布式控制系统628收集的传感器数据包括单位面积的总质量流量(G_z)、丙烯分压(p_{pr})、苯分压(p_{Bz})、氧分压(p_{O_2})、异丙苯分压(p_{Cm})、管式反应器606内的温度(T_1)、管式反应器612内的温度(T_2)。分布式控制系统628将传感器数据传送到执行工厂模型的处理器630。工厂模型包括使用这些传感器数据和反应器配置作为输入参数以及使用参数 f_{NN} 作为输出的神经网络。神经网络具有一个隐藏层。参数 f_{NN} 用作如下所述的包含两个方程的机理模型的输入。

[0087] 机理模型包含每个基元反应的速率常数的一个方程。对于苯和丙烯反应生成异丙苯的情况,使用以下方程,其中, k_1 和 E_{A1} 是在文献中找到的关于该反应的常数:

$$[0088] \quad r_{Cm} = f_{NN} \cdot k_1 e^{-\frac{E_{A1}}{RT_1}} \cdot \frac{p_{pr}}{p_{Bz}}$$

[0089] 对于在管式反应器612中反应以由异丙苯形成苯酚和丙酮的情况,使用以下方程,其中, k_2 和 E_{A2} 是在文献中找到的关于该反应的常数:

$$[0090] \quad r_{Ph} = f_{NN} \cdot k_2 e^{-\frac{E_{A2}}{RT_2}} \cdot \frac{p_{Cm}}{p_{O_2}}$$

[0091] 作为物理化学参数的苯酚和丙酮的收率是通过使用分别由每个反应步骤的质量平衡获得的合并模型来确定的,其中, y_i 是组分*i*的质量分数, ρ_{cat} 是催化剂的充填密度, $M_{w,i}$ 是组分*i*的分子质量,并且 $\nu_{i,j}$ 是组分*i*的化学计量系数:

$$[0092] \quad G_z \frac{\partial y_i}{\partial z} = M_{w,i} \cdot \rho_{cat} \sum_j \nu_{i,j} r_j$$

[0093] 苯酚和丙酮的收率从处理器630传送回分布式控制系统628。如果收率下降,表明催化剂活性降低,则分布式控制系统628可以通过操作阀618来减少苯和丙烯的气流。可替代地,分布式控制系统628可以通过操作阀620来减少异丙苯和氧气的气流。以这种方式,苯和丙烯或异丙苯和氧气与催化剂接触的时间增加,这可以提高转化率,从而提高产物收率。

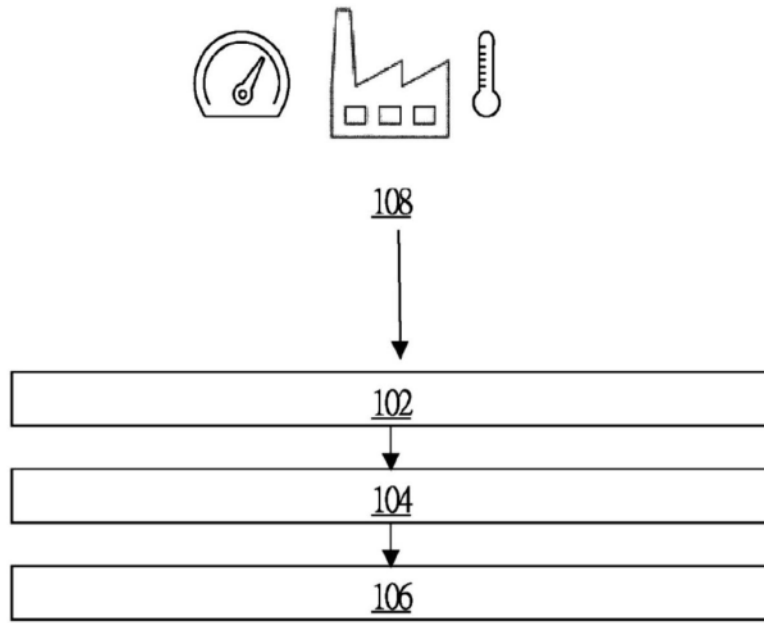


图1

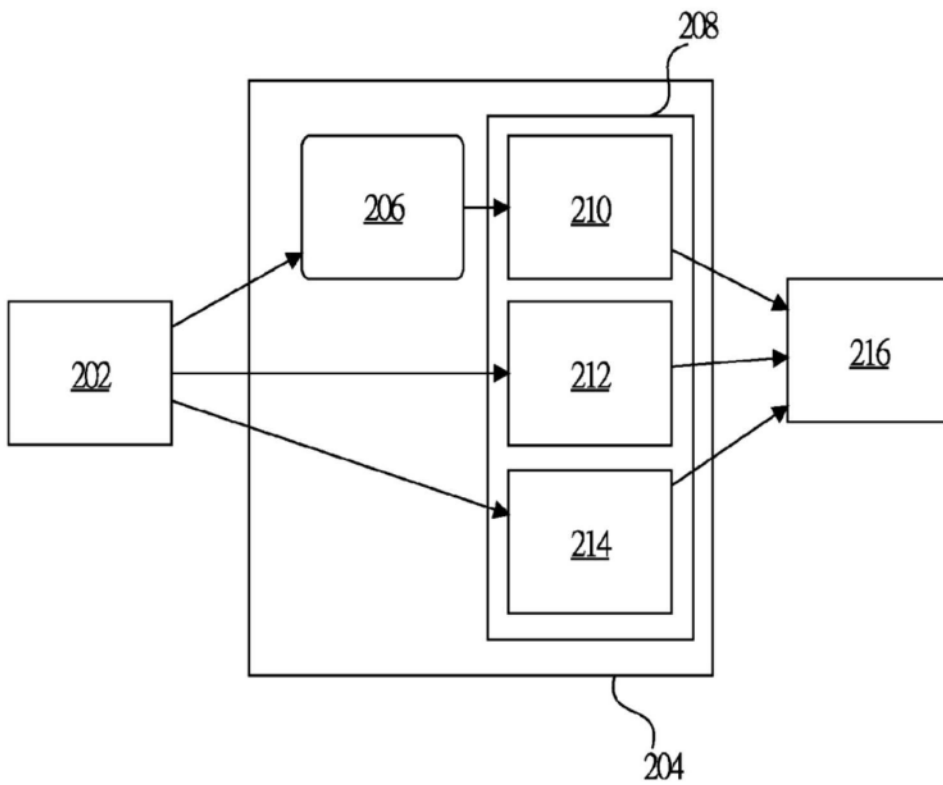


图2

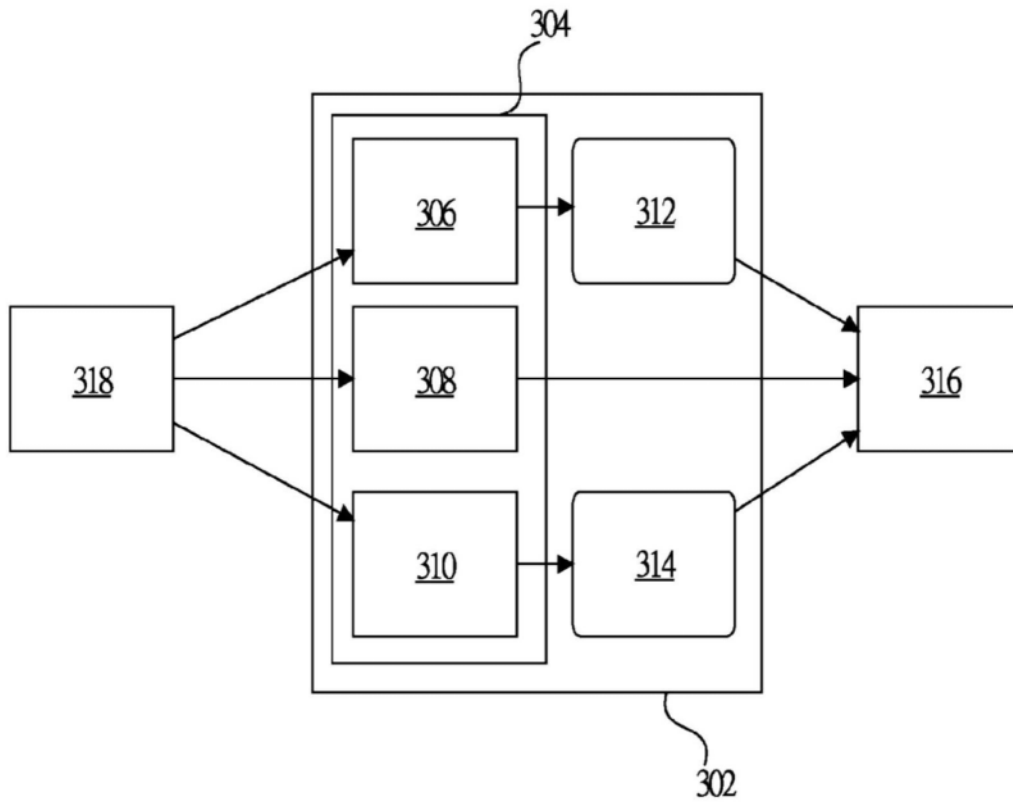


图3

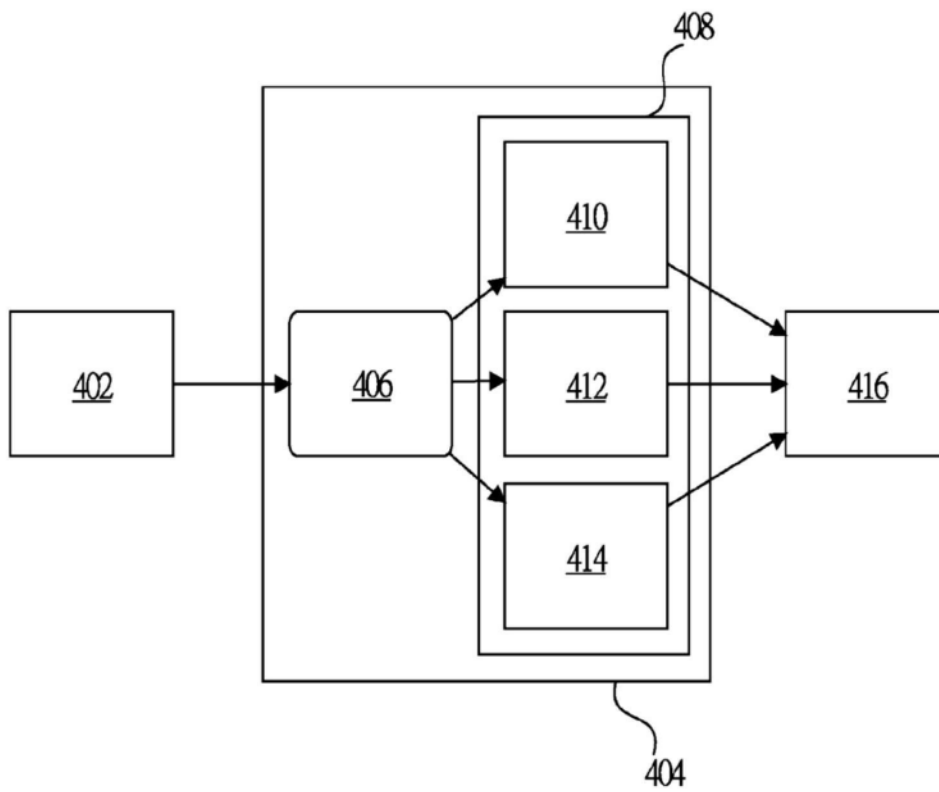


图4

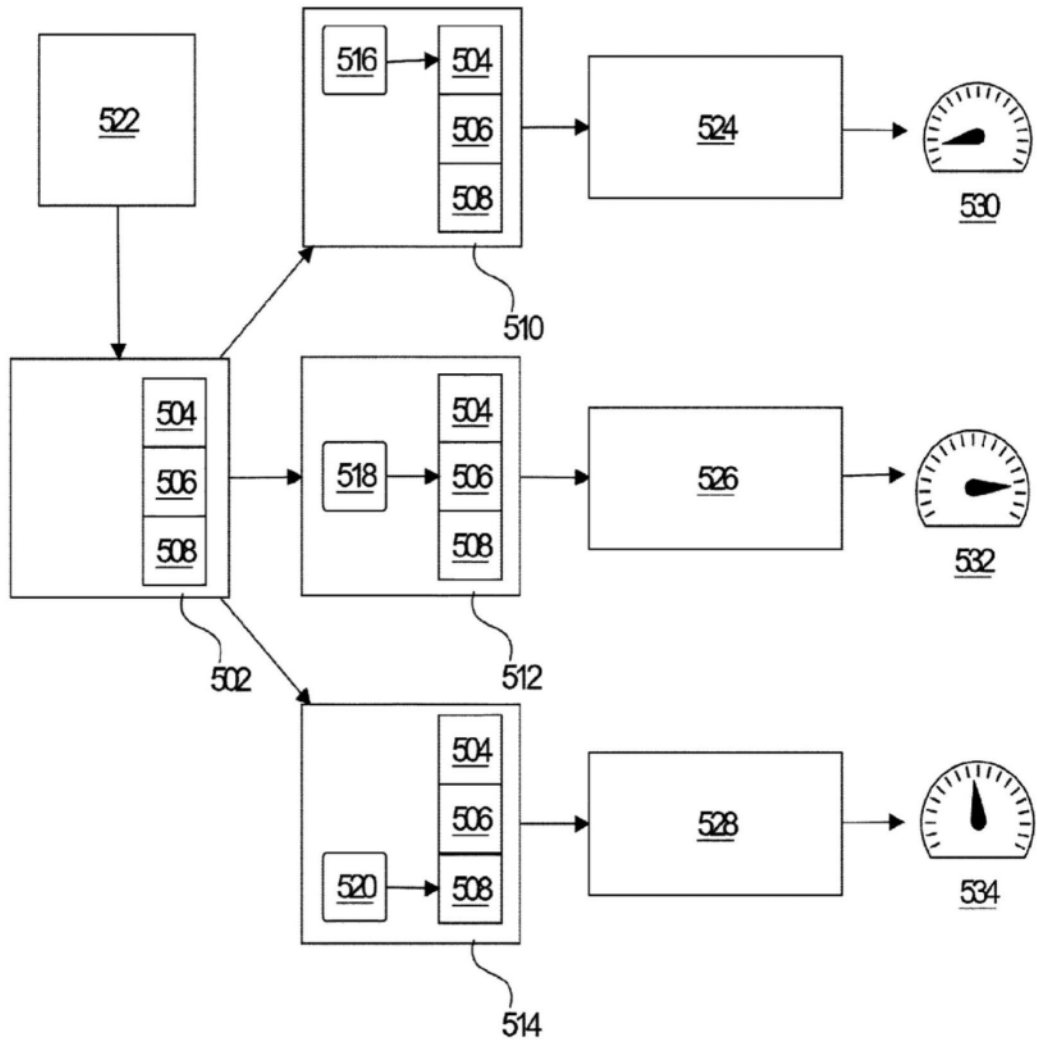


图5

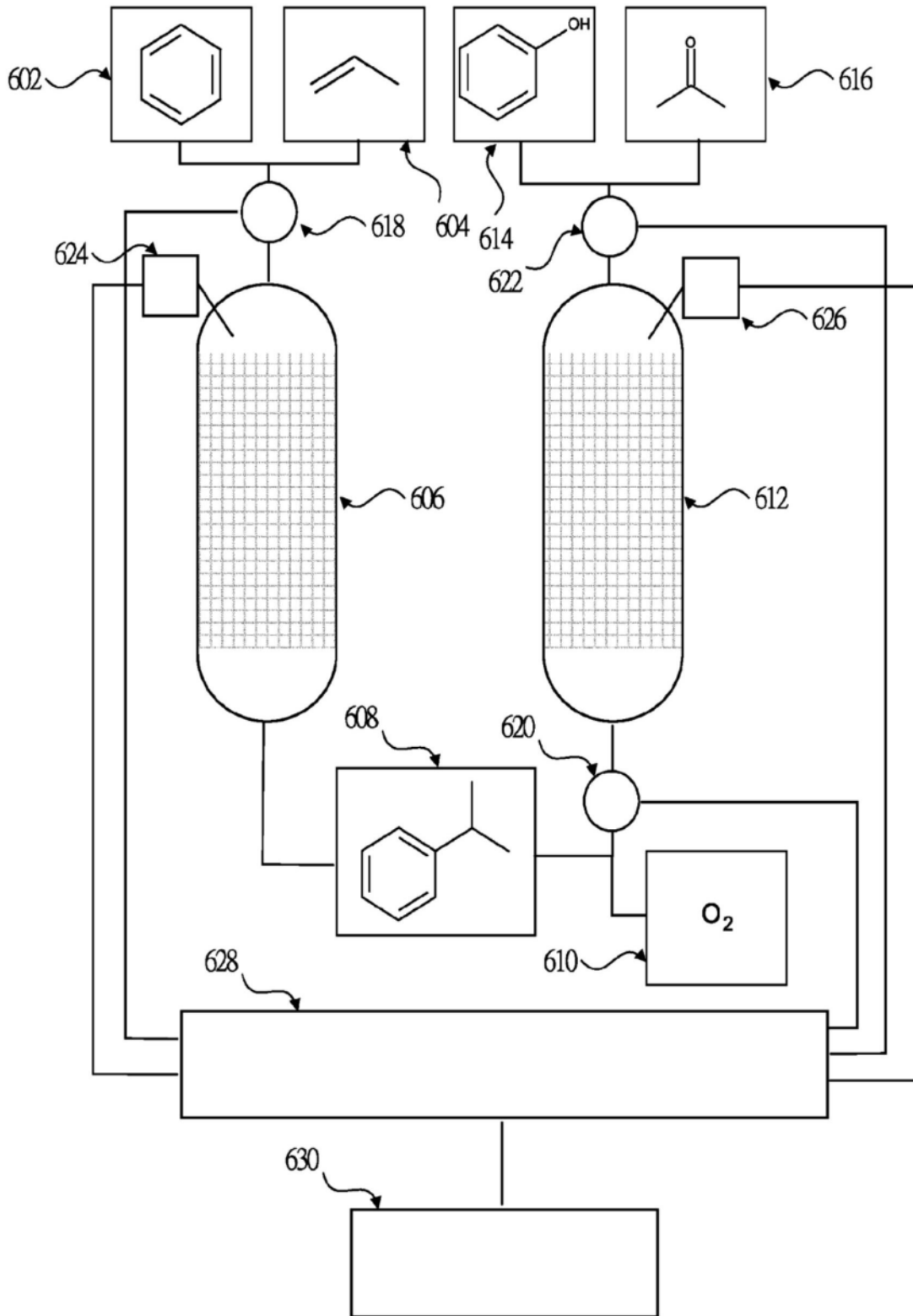


图6