

文章编号: 1005-8893(2000)02-0045-03

基于 BP 神经网络的化工过程建模研究^{*}

王其红¹, 史国栋¹, 薛国新¹, 张 奕²

(1. 江苏石油化工学院 计算机科学与工程系, 江苏 常州 213016; 2. 常州建设银行, 江苏 常州 213000)

摘要: 研究使用 BP 神经网络来完成化工过程的建模。一般的化工过程建模问题是非线性的问题。很多情形下, 与不同相有关量的变化速率数量级相差很大, 从而问题是刚性的。这时, 用数值方法难于对过程的变化精确求解。由于 BP 网络能实现任何非线性的连续映照, 故适于处理复杂化工建模问题。将 BP 神经网络用于精馏塔的温度计算, 结果令人满意。

关键词: BP 神经网络; 化工过程; 建模

中图分类号: TP 393

文献标识码: A

人们已经证明, BP 神经网络能用于实现任何非线性的连续映照。对于一般的化工过程, 由于系统的复杂性, 有时甚至连要建立起能确切反映系统行为的微分方程组也是困难的, 而使用神经网络的方法, 可以绕开许多细节性的问题, 直接建立起系统输入与输出的联系, 因而越来越受到人们的重视。

1 化工建模传统方法

传统上, 化工装置的数学模型的建立主要有两大类方法, 一类为机理模型方法。另一类为系统辨识方法。

机理模型方法需要凭藉可靠的规律及经验知识来建立原始微分方程式, 这些规律和经验知识必须被表为一般的形式。这种方程组中快变分量和慢变分量是耦合在一起的, 所以慢变分量的较大误差会导致快变分量的积累误差。为了克服这个问题, 人们提出了变量分离的方法。其基本方法是通过换元法, 使得快变分量与慢变分量之间能解除耦合关系, 即得到相互独立的若干个方程组用于具有不同变化速率的分量。然后再对每个这样的方程组使用欧位逐步积分法。基尔根据这个思想, 得到了基尔迭代法。

系统辨识方法的分析步骤一般是: (1) 确定合适的模型结构; (2) 选择适宜的实验方法和输入信号; (3) 求取模型参数, 计算出其最优的估计值; (4) 验证模型的正确性。

传统的系统辨识就是在输入和输出数据的基础上, 从一组给定的模型类中, 确定一个与所测系统等价的模型。在实际应用中, 要确定一个完全和实际系统等价的模型是很困难的。必须结合使用机理模型的研究成果。而神经网络方法最能实现这个目的。

2 神经网络建模方法

近年来人们将神经网络方法用于多种化工建模问题^[1-4]。

BP 神经网络的如下特性使得它们能用于化工建模:

(1) 非线性映照能力: 神经网络能以任意精度逼近任何非线性连续函数; 而化工建模中许多问题正是具有高度的非线性。

(2) 并行分布处理方式: 在神经网络中信息是分布存储和并行处理的, 这使它具有很强的容错性和很快的处理速度。

(3) 自学习和自适应能力: 神经网络在训练时

^{*} 收稿日期: 2000-05-11

作者简介: 王其红(1956-), 女, 江苏常熟人, 副教授, 主要从事自动化及电工电子技术方面的研究。

能从输入输出的历史数据中提取出规律性的知识,记忆于网络的权值中,并具有泛化能力,即将这组权值应用于一般情形的能力。神经网络的学习也可以在线进行。

(4) 数据融合的能力:神经网络可以同时处理定量信息和定性信息,因此它可以综合利用传统的工程技术(数值运算)和人工智能技术(符号处理)。

(5) 多变量系统:神经网络的输入和输出变量的数目是任意的,对单变量系统与多变量系统提供了一种通用的描述方式,不必再考虑各子系统间的解耦等问题。

采用 BP 神经网络能直接反映系统的输入和输出间的关系而绕开系统机理上的细节性问题。BP 网络的基本算法是一种在梯度法的基础上推导出来的有教师的 δ -学习律,或称广义 δ 法则。设输入学习样本为 P 个: $x^{(1)}, \dots, x^{(P)}$ 。已知与其对应的教师为 $t^{(1)}, \dots, t^{(P)}$, 学习算法是根据实际的输出 $y^{(1)}, \dots, y^{(P)}$ 与 $t^{(1)}, \dots, t^{(P)}$ 的误差 E (称作总体误差)来修改由其连接权和阈值构成的权向量 w , 使得 $y^{(1)}, \dots, y^{(P)}$ 与 $t^{(1)}, \dots, t^{(P)}$ 尽可能的接近。这里, 总体误差 E 被看作是权向量 w 的函数, 即 $E = E(w)$ 。每次根据 $E(w)$ 的梯度方向来确定权向量 w 的修正量 Δw 。

为减少 $E(w)$ 的计算次数和避免在搜索 $E(w)$ 的最小值的过程中陷入局部极小, 可采用如下措施。

2.1 变步长算法

先设一初始步长,若一次迭代后误差函数 E 增大,则将步长乘以小于 1 的常数 β 沿原方向重新计算下一个迭代点,若一次迭代后误差函数 E 减小,则将步长乘以一个大于 1 的常数 ϕ , 这样既不增加太多的计算量,又使步长得到合理的调整。即

$$\begin{cases} \eta = \eta\phi, & \phi > 1, \text{ 当 } \Delta E < 0 \\ \eta = \eta\beta, & \beta < 1, \text{ 当 } \Delta E > 0 \end{cases} \quad (1)$$

其中 ϕ 和 β 为常数, $\Delta E = E(w_{n0}) - E(w_{n0-1})$ 。 $E(w_{n0-1})$ 和 $E(w_{n0})$ 为前后相邻两次迭代的权向量。

确定了步长后,可得到迭代公式如下

$$w_{n0+1} = w_{n0} + \eta d_{n0} \quad (2)$$

其中, d_{n0} 为 $E(w)$ 在 w_{n0} 处的最速下降方向。但 ϕ 和 β 究竟选多少,也是应考虑的问题;又它们保持不变,某种程度上使得 η 不能灵活变化;另

外,这里 η 的选择没有能充分考虑原先各次迭代中所用产生的迭代效果。

2.2 加动量项

为了加速收敛和防止振荡,引入一个动量因子 α :

$$w_{n0+1} = w_{n0} + \eta d_{n0} + \alpha \Delta w_{n0} \quad (3)$$

其中第三项是记忆上一时刻权的修改方向,而在时刻 n_0 的修改方向为时刻 $n_0 - 1$ 的方向与时刻 n_0 方向的组合。

2.3 模拟退火方法

在所有的权上加一个噪声,改变误差曲面的形状,再用模拟退火的方法,退出局部极小。

考虑精馏塔的建模。对于一个恒压多元精馏塔,其基本方程组归纳为以下形式:

$$M_{ij}(x_{ij}, V_j, T_j) = A\{x_{ij}\} - \{D_j\} = 0, \quad 1 \leq i \leq c, 1 \leq j \leq N \quad (4)$$

$$S_j(x_{ij}, V_j, T_j) = \sum_{i=1}^c K_{ij} x_{ij} - 1 = 0, \quad 1 \leq i \leq N \quad (5)$$

$$H_j(x_{ij}, V_j, T_j) = (h_{j+1}^V - h_j^L) V_{j+1} - (h_j^V - h_j^L)(V_j + G_j) - (h_j^L - h_{j-1}^L) L_{j-1} + (h_{Fj} - h_j^L) F_j - Q_j = 0, \quad 2 \leq j \leq N-1 \quad (6)$$

其中, c 为体系的组分数,下标 i 为组分的顺序数, j 表示平衡级顺序数, N 为平衡总级数, F_j 为各级进料, V_j 为各平衡级的汽相流量, L_j 为各平衡级的液相流量, T_j 为各平衡级的温度, x_{ij} 为各平衡级的液相组成, K_{ij} 为平衡常数, Q_j 为中间加热器或冷却器负荷。(4) 式有 cN 个方程式, (5) 式和 (6) 式各有 N 和 $N-2$ 个方程式,外加顶部回流罐和底部再沸器的焓平衡方程各一个。因此,描述多元精馏塔每级均达到平衡时的全塔方程总数为 $(c+2)N$ 个。全塔独立变量数则为每个平衡级中各组分的液相浓度 x_{ij} , 共 cN 个,每级温度 T_j , 共 N 个,以及每级汽相流量 V_j , 计 N 个。故独立变量总数为 $(c+2)N$ 个。因此独立变量数与方程数相等。上述方程组是可解的。

我们考虑产航煤和重石脑油及轻石脑油精馏塔中重沸炉回炉出口温度和底部出料温度计算。这时,有关操作条件有:底部再沸器加热量,塔顶回流比,塔底出料阀开度,航煤出料阀开度,重石脑油出料阀开度,轻石脑油出料阀开度。根据测量得出运行过程中进料温度和进料流量随时间的变化规

律如下

$$F_{in}=F_{in} \left(t \right)$$
(7)

$$T_{in}=T_{in} \left(t \right)$$
(8)

由所有的操作条件和以上两式产生输入样本, 所采用的神经网络结构是一种典型的 BP 网络结构, 它具有一个输出层, 一个输入层, 一个隐层。其中, 输入层的结点数为 $(c+2) N \cdot P$, 这里, P 表示所考虑的时间窗中所包含的时间点数; 输出层的结点数为 Q 。 Q 为所关心的关键状态量的个数。经过训练, 求得各权值, 由此计算出各输出。在训练过程中, 收敛过程体现了这样的特点: 权向量—误差空间中的误差曲面出现了若干平坦区, 当权向量搜索点进入平坦区后, 收敛过程明显减慢。采用变步长算法较好地克服了这一问题。表 1 给出了神经网络计算结果和运行资料的对照。由表可见, BP 神经网络的计算结果具有足够精度。

表 1 运行温度和计算温度的比较

重沸炉回炉出口温度		塔底出料温度	
运行资料值	BP 网络计算值	运行资料值	BP 网络计算值
360	365	298	306
351	354	287	292
341	343	275	278
325	323	257	256
309	312	239	237
289	288	217	213
270	268	196	191
246	243	170	164
222	217	144	137

3 结 论

用 BP 神经网络对化工过程进行建模, 能绕开涉及系统内部机理的细节性问题直接由输入得出输出。对于一般的非线性系统, 特别是具有高刚性比的系统, BP 神经网络建模方法是一种行之有效的方法。

参考文献:

[1] 陈志奎. 原油蒸馏过程的数学模型和各类软件 (II) ——常减压蒸馏塔系统模型中的设计核算型快捷法 [J] . 计算机与应用化学, 1999, 16 (1): 29—34.

[2] Sanjay Gupta, Pi—Hsin Liu, Spyros A Svoronos. Hybrid First—Principles/Neural Networks Model for Column Flotation [J] . AIChE Journal, 1999, 45 (3): 557—566.

[3] Rohani S. Haeri M, Wood H C. Modeling and Control of a Continuous Crystallization Process: Part 1 Linear and Non—linear Modeling [J] . Computers & Chemical Engineering, 1999, 23: 263—277.

[4] Arun Tholudur, Fred Ramirez W. Neural—Network Modeling and Optimization of Induced Foreign Protein Production [J] . AIChE Journal, 1999, 45 (8): 1 660—1 670.

A Study on the Modeling of Chemical Processes with BP Neural Networks

WANG Qi—hong¹, SHI Guo—dong¹, XUE Guo—xin¹, ZHANG Yi²

(1. Department of Computer Sciences and Engineering, Jiangsu Institute of Petrochemical Technology, Changzhou 213016, China; 2. Changzhou Construction Bank, Changzhou 213000, China)

Abstract: A study on the modeling of chemical processes with BP neural networks is presented. Usually, the modeling problem of a chemical process is a nonlinear problem. In many cases, the quantitative differences between the changing rates of variables related to different phases are quite great, thus the problems have a high stiffness, and it is difficult to solve the modeling problem accurately with the common digital calculation methods. It is showed that BP neural networks could perform any continuous nonlinear mapping. Hence they are suitable for handling complicated dynamic problem. In the paper a BP neural network is used to calculate the temperatures of the output flows of a fractionation tower. The results were satisfactory.

Key words: BP neural networks; chemical process; modeling