А К А Д Е М И Я Н А У К С С С Р
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ
А В Т О М Е Т Р И Я

№ 5 1965

УДК 519.27

О. С. КОЖИНСКИЙ
(Москва)

ИНФОРМАЦИОННАЯ СИСТЕМА ИЗМЕРЕНИЯ СОСТАВА ПРОДУКТОВ РЕКТИФИКАЦИИ

Рассматривается система измерения и экстраполяции поля состава продуктов по результатам наблюдения векторного случайного поля распределенных по высоте ректификационной колонны параметров: температуры, давления и др. Определяется минимальная среднеквадратическая ошибка измерения и экстраполяции и корреляция поля состава с векторным полем распределенных параметров.

Химический состав продуктов является основным показателем качества работы ректификационной колонны. Автоматическое измерение состава продуктов в ходе процесса химическими или физико-химическими методами в большинстве случаев затрудняется из-за сложности и многообразия разделяемых смесей. Обычно о составе продуктов судят по температуре на верхней или нижней тарелке колонны в текущий момент времени. По ряду причин термодинамического характера точность такого контроля состава оказывается невысокой. В последние годы в связи с возросшими требованиями, предъявляемыми к качеству продуктов, недостаточная точность контроля стала совершенно очевидной.

Можно выделить два основных пути повышения точности автоматического контроля состава продуктов ректификации. Первый путь — разработка датчиков состава на основе прогрессивных физико-химических методов анализа: газовой хроматографии, масс-спектроскопии, ЯМР-спектроскопии и др. Второй путь — создание систем контроля, перерабатывающих информацию от датчиков таких легкоизмеряемых параметров процесса, как температура, давление, расход и др. Предлагаемая статья посвящается анализу измерительной информационной системы, предназначенной для контроля состава продуктов ректификации.

В реальных условиях тепловые и массообменные процессы, протекающие в ректификационной колонне, можно рассматривать как взаимодействие случайных полей распределенных по колонне параметров: температуры, давления, концентраций компонентов и др. Поле концентрации любого интересующего нас компонента можно понимать как результат преобразования некоторым оператором полей всех остальных параметров. Обозначив $V(\eta, t)$ поле концентрации интересующего нас компонента, а вектором $U(\lambda, s)$ — совокупность остальных полей, указанное преобразование можно записать в виде

$$V(\eta, t) = AU(\lambda, s), \tag{1}$$

где A — оператор преобразования;

η, λ — пространственные координаты полей.

Сформулируем теперь задачу. Векторное случайное поле $U(\lambda, s)$ наблюдается в области Λ в течение времени T. Требуется найти такой оператор A^*, чтобы случайное поле

$$V^*(\eta, t) = A^* U(\lambda, s) \tag{2}$$

было, насколько возможно, более близким (в смысле какого-либо критерия) к случайному полю $V(\eta, t)$ в области Λ в конце интервала наблюдения T или в какой-либо последующий момент времени. Очевидно, что оценки состава продуктов могут быть затем получены как значения поля $V^*(\eta, t)$ в краевых и промежуточных сечениях.

Таким образом, определение системы измерения состава продуктов ректификации по результатам наблюдения поля $U(\lambda, s)$ можно считать одной из основных задач теории оптимальных систем. В наиболее общем виде задачи приближения освещены в [1]. В настоящей работе сформулированная задача рассматривается при двух допущениях:

1) функции $V(\eta, t)$ и $U(\lambda, s)$ стационарны и стационарно связаны во времени;

2) условная плотность вероятности $V(\eta, t)$ относительно $U(\lambda, s)$ нормальна.

Первое допущение упрощает задачу незначительно, но существенно облегчает практическое применение результатов. Гауссово распределение принимается потому, что функции V и U зависят от бесчисленного множества факторов, ни один из которых не доминирует существенно над остальными, и, следовательно, можно считать, что условия теоремы Ляпунова выполняются.

Известно, что в случае нормального распределения измерительная система, оптимальная по отношению к любому критерию, зависящему от модуля ошибки приближения, будет линейной [1]. В силу принципа суперпозиции понятие множественной линейной регрессии [2] можно обобщить для случая бесконечно большого числа аргументов и преобразование (2) при каждом t записать как

$$V^*(\eta, t) = M\,[V(\eta, t) \mid U(\lambda, s)] = a(\eta) + \sum_{\pi=1}^{p} \int_{0}^{\Lambda} \int_{0}^{T} w_\pi(\eta, \lambda, \tau)\, U_\pi(\lambda, t-\tau)\, d\tau\, d\lambda, \tag{3}$$

где $M[V(\eta, t) \mid U(\lambda, s)]$ — условное математическое ожидание $V(\eta, t)$ относительно $U(\lambda, s)$;

$a(\eta)$ — свободная функция, множество бесконечно большого числа свободных параметров [2];

$W_\pi(\eta, \lambda, \tau)$ — функция множественной регрессии [3], оценка весовой функции.

В качестве критерия оптимальности в классе критериев, зависящих от модуля ошибки, примем минимум среднего квадрата ошибки

$$\overline{\varepsilon^2} = M\,[\{V(\eta, t) - V^*(\eta, t)\}^2] = \min. \tag{4}$$

Подставляя в (4) $V^*(\eta, t)$ из (3) и приравнивая нулю частные производные $\overline{\varepsilon^2}$ по a и w, получаем:

$$M\left[V(\eta, t) - a(\eta) - \sum_{\pi=1}^{p} \int_0^{\Lambda}\int_0^{T} w_\pi(\eta, \lambda, \tau)\, U_\pi(\lambda, t-\tau)\, d\tau\, d\lambda\right] = 0; \tag{5}$$

$$M\left[\left\{V(\eta, t) - a(\eta) - \sum_{\pi=1}^{p} \int_0^{\Lambda}\int_0^{T} w_\pi(\eta, \lambda, \tau)\, U_\pi(\lambda, t-\tau)\, d\tau\, d\lambda\right\} \times \right.$$
$$\left. \times \sum_{\pi=1}^{p} \int_0^{\Lambda}\int_0^{T} U_\pi(\lambda, t-\tau)\, d\tau\, d\lambda\right] = 0.$$

Благодаря замене переменных $\pi=\pi'$, $\tau=\tau'$ и $\lambda=\lambda'$ произведение сумм двойных определенных интегралов легко сводится к двойной сумме четырехкратных интегралов. Меняя далее порядок операций математического ожидания и суммирования и исключая затем суммирование по π', τ' и λ', приводим (5) к виду:

$$M[V(\eta, t)] = a(\eta) + \sum_{\pi=1}^{p} \int_0^{\Lambda}\int_0^{T} w_\pi(\eta, \lambda, \tau)\, M[U_\pi(\lambda, t-\tau)]\, d\tau\, d\lambda;$$

$$M[V(\eta, t)\, U_{\pi'}(\lambda', t-\tau')] = a(\eta) + \sum_{\pi=1}^{p} \int_0^{\Lambda}\int_0^{T} w_\pi(\eta, \lambda, \tau) \times \tag{6}$$
$$\times M[U_\pi(\lambda, t-\tau)\, U_{\pi'}(\lambda', t-\tau')]\, d\tau\, d\lambda.$$

Умножая теперь первое из равенств (6) на $M[U_{\pi'}(\lambda', t-\tau')]$ и вычитая результат из второго равенства, находим

$$\sum_{\pi=1}^{p} \int_0^{\Lambda}\int_0^{T} w_\pi(\eta, \lambda, \tau)\, K_{u_\pi u_{\pi'}}(\lambda, \lambda', \tau'-\tau)\, d\tau\, d\lambda =$$
$$= K_{vu_{\pi'}}(\eta, \lambda', \tau') \tag{7}$$
$$(\pi' = 1, \ldots, p),$$

или окончательно —

$$\sum_{\pi=1}^{p} \int_0^{\Lambda}\int_0^{T} w_\pi(\eta, \lambda, \tau)\, K_{u_\pi u_1}(\lambda, \lambda', \tau'-\tau)\, d\tau\, d\lambda = K_{vu_1}(\eta, \lambda' \tau');$$
$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \tag{8}$$
$$\sum_{\pi=1}^{p} \int_0^{\Lambda}\int_0^{T} w_\pi(\eta, \lambda, \tau)\, K_{u_\pi u_p}(\lambda, \lambda', \tau'-\tau)\, d\tau\, d\lambda = K_{vu_p}(\eta, \lambda', \tau'),$$
$$(0 \leqslant \eta, \lambda, \lambda' \leqslant \Lambda;\quad 0 \leqslant \tau, \tau' \leqslant T),$$

где

$K_{u_\pi u_{\pi'}}(\lambda, \lambda' \tau'-\tau) = M[U_\pi^0(\lambda, t-\tau)\, U_{\pi'}^0(\lambda', t-\tau')]$ $(\pi, \pi' = 1, \ldots, p)$ —

корреляционная функция векторного стационарного неоднородного поля $U(\lambda, s)$;

$$K_{vu_{\pi'}}(\eta, \lambda', \tau') = M\,[V^0(\eta, t)\, U^0_{\pi'}(\lambda', t-\tau')] -$$

взаимная корреляционная функция полей $V(\eta, t)$ и $U(\lambda, s)$.

Система (8) и первое из равенств (6) полностью определяют оптимальную измерительную систему по выбранному критерию.

Найдем теперь минимальную ошибку измерения. Подставляя (3) в (4) и учитывая первое из равенств (6), после несложных преобразований получаем

$$\overline{\varepsilon^2}(\eta) = D_v(\eta) - 2\sum_{\pi=1}^{p}\int_0^{\Lambda}\int_0^{T} w_\pi(\eta, \lambda, \tau)\, K_{vu_\pi}(\eta, \lambda, \tau)\, d\tau\, d\lambda +$$
$$+\sum_{\pi'=1}^{p}\int_0^{\Lambda}\int_0^{T} w_{\pi'}(\eta, \lambda', \tau') \sum_{\pi=1}^{p}\int_0^{\Lambda}\int_0^{T} w_\pi(\eta, \lambda, \tau)\, K_{u_\pi u_{\pi'}}(\lambda, \lambda', \tau'-\tau) \times$$
$$\times\, d\tau\, d\lambda\, d\tau'\, d\lambda', \tag{9}$$

где $D_v(\eta) = M\,[\{V^0(\eta, t)\}^2]$ — дисперсия стационарного неоднородного поля $V(\eta, t)$.

Очевидно, что ошибка $\overline{\varepsilon^2}$ будет минимальной в том случае, когда весовая функция $w_\pi(\eta, \lambda, \tau)$ удовлетворяет условию (7). Следовательно,

$$\overline{\varepsilon^2}(\eta)_{\min} = D_v(\eta) - \sum_{\pi=1}^{p}\int_0^{\Lambda}\int_0^{T} w_\pi(\eta, \lambda, \tau)\, K_{vu_\pi}(\eta, \lambda, \tau)\, d\tau\, d\lambda. \tag{10}$$

Полученное выражение представляет собой обобщение теоремы разложения дисперсий [2, 3, 4] для случая векторных полей. Сумма интегралов в правой части (10) учитывает ту часть общей дисперсии поля $V(\eta, t)$, которая обусловлена изменениями поля $U(\lambda, s)$. Следовательно, эта часть дисперсии характеризует корреляцию $V(\eta, t)$ с $U(\lambda, s)$ и может быть названа множественной корреляционной функцией $D_{vu}(\eta)$. Нормируя эту функцию аналогично коэффициенту множественной корреляции [2], получаем нормированную множественную корреляционную функцию

$$R_{vu}(\eta) = \sqrt{\frac{D_{vu}(\eta)}{D_v(\eta)}} =$$
$$= \frac{1}{\sigma_v(\eta)}\sqrt{\sum_{\pi=1}^{p}\int_0^{\Lambda}\int_0^{T} w_\pi(\eta, \lambda, \tau)\, K_{vu_\pi}(\eta, \lambda, \tau)\, d\tau\, d\lambda}\,. \tag{11}$$

Из последнего уравнения следует, что

$$0 \leqslant R_{vu}(\eta) \leqslant 1. \tag{12}$$

Можно также показать, что при любых фиксированных π, η и λ

$$R_{vu}(\eta) \geqslant |\rho_{vu_\pi}(\eta, \lambda, \tau)|_{\max}, \tag{13}$$

где $|\rho_{vu_\pi}(\eta, \lambda, \tau)|_{\max}$ — максимальное по абсолютной величине значение нормированной взаимной корреляционной функции поля $V(\eta, t)$ с любой составляющей поля $U(\lambda, s)$ при данных значениях η и λ.

Указанные свойства нормированной функции множественной корреляции позволяют оценить повышение точности измерения состава продуктов ректификации по результатам наблюдения поля $U(\lambda, s)$ по сравнению с обычно применяемым измерением по температуре на нижней или верхней тарелке колонны в текущий момент времени. Действительно, учитывая (11), формулу для минимальной погрешности измерения можно записать так:

$$\overline{\varepsilon^2}(\eta)_{\min} = D_v(\eta)\left[1 - R^2_{vu}(\eta)\right], \tag{14}$$

откуда следует, что погрешность измерения тем меньше, чем больше $R_{vu}(\eta)$. Аналогично можно записать формулу для минимальной погрешности $\overline{\varepsilon^2}(\eta)^{\text{об}}_{\min}$, например, для нижнего сечения колонны $(\eta=\lambda=0)$:

$$\overline{\varepsilon^2}(0)^{\text{об}}_{\min} = D_v(0)\left[1 - \rho^2_{vu_1}(0, 0, 0)\right], \tag{15}$$

где $\rho_{vu_1}(0, 0, 0)$ — значение нормированной взаимной корреляционной функции поля состава $V(\eta, t)$ с полем температуры $U_1(\lambda, s)$ при $\eta=\lambda=\tau=0$.

Поскольку (13) справедливо при любых фиксированных π, η, λ и τ, из (14) и (15) ясно, что

$$\overline{\varepsilon^2}(0)_{\min} \leqslant \overline{\varepsilon^2}(0)^{\text{об}}_{\min}. \tag{16}$$

Из (14)—(16) следует, что рассматриваемая система может уменьшить минимальную среднеквадратическую погрешность измерения состава остатка в

$$\alpha = \frac{\overline{\varepsilon^2}(0)^{\text{об}}_{\min}}{\overline{\varepsilon^2}(0)_{\min}} = \frac{1 - \rho^2_{vu_1}(0, 0,0)}{1 - R^2_{vu}(0)} \geqslant 1 \text{ раз}. \tag{17}$$

Аналогично можно записать формулы для уменьшения погрешности измерения состава дистиллата $(\eta=\lambda=\Lambda)$ и промежуточных фракций.

В отличие от измерительных систем, основанных на физико-химических методах анализа продуктов, рассматриваемая система позволяет экстраполировать поле $V(\eta, t)$, а следовательно, и состав продуктов, что очень важно для оптимального управления процессом ректификации. Зависимость между полем $U(\lambda, s)$ и упрежденным на время $t_{\text{упр}}$ значением оценки поля $V(\eta, t)$ определяется

$$\begin{aligned} V^*(\eta, t + t_{\text{упр}}) &= M\left[V(\eta, t + t_{\text{упр}}) \mid U(\lambda, s)\right] = \\ &= a^э(\eta) + \sum_{\pi=1}^{p} \int_0^{\Lambda}\int_0^{T} w^э_{\pi}(\eta, \lambda, \tau)\, U_{\pi}(\lambda, t-\tau)\, d\tau\, d\lambda. \end{aligned} \tag{18}$$

Критерий (4) после преобразований, аналогичных данным выше, приводит к системе двумерных интегральных уравнений типа Фредгольма:

$$\sum_{\pi=1}^{p} \int_0^{\Lambda}\int_0^{T} w^э_{\pi}(\eta, \lambda, \tau)\, K_{u_\pi u_1}(\lambda, \lambda', \tau'-\tau)\, d\tau\, d\lambda = K_{vu_1}(\eta, \lambda', \tau' + t_{\text{упр}});$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \tag{19}$$

$$\sum_{\pi=1}^{p}\int_{0}^{\Lambda}\int_{0}^{T} w_{\pi}^{э}(\eta,\lambda,\tau)\,K_{u_\pi u_p}(\lambda,\lambda',\tau'-\tau)\,d\tau\,d\lambda = K_{vu_p}(\eta,\lambda',\tau'+t_{упр})$$

$$(0 \leqslant \eta,\lambda,\lambda' \leqslant \Lambda;\ 0 \leqslant \tau,\tau' \leqslant T).$$

Определяя математическое ожидание от левой и правой части (18), получаем

$$m_v(\eta) = a^э(\eta) + \sum_{\pi=1}^{p}\int_{0}^{\Lambda} m_{u_\pi}(\lambda)\int_{0}^{T} w_{\pi}^{э}(\eta,\lambda,\tau)\,d\tau\,d\lambda, \qquad (20)$$

где $m_v(\eta) = M[V(\eta, t)] = M[V(\eta, t+t_{упр})]$ — математическое ожидание стационарного неоднородного поля $V(\eta, t)$;

$m_{u_\pi}(\lambda) = M[U_\pi(\lambda, s)] = M[U_\pi(\lambda, t-\tau)]$ — математическое ожидание π-й составляющей стационарного неоднородного поля $U(\lambda, s)$.

Система (19) и равенство (20) полностью определяют оптимальную по отношению к критерию (4) систему экстраполяции поля $V(\eta, t)$.

Так же, как и раньше, получаем формулу для минимальной среднеквадратической ошибки экстраполяции поля

$$\overline{\varepsilon^2}(\eta)^э_{\min} = D_v(\eta) - \sum_{\pi=1}^{p}\int_{0}^{\Lambda}\int_{0}^{T} w_{\pi}^{э}(\eta,\lambda,\tau)\,K_{vu_\pi}(\eta,\lambda,\tau+t_{упр})\,d\tau\,d\lambda, \qquad (21)$$

или после замены переменной $\tau + t_{упр} = \tau'$ —

$$\overline{\varepsilon^2}(\eta)^э_{\min} = D_v(\eta) - \sum_{\pi=1}^{p}\int_{0}^{\Lambda}\int_{t_{упр}}^{T+t_{упр}} w_{\pi}^{э}(\eta,\lambda,\tau'-t_{упр})\,K_{vu_\pi}(\eta,\lambda,\tau')\,d\tau'\,d\lambda. \qquad (22)$$

Из последнего выражения нетрудно видеть, что при $t_{упр} \to \infty$ для любого запоминающего устройства (ЗУ) системы, в частности, при $T = \infty$ минимальная среднеквадратическая ошибка экстраполяции стремится и дисперсии поля $V(\eta, t)$:

$$\lim_{t_{упр}\to\infty} \overline{\varepsilon^2}(\eta)^э_{\min} = D_v(\eta). \qquad (23)$$

Из (22) следует, что при времени упреждения, большем времени затухания $t_з$ взаимной корреляционной функции полей $V(\eta, t)$ и $U(\lambda, s)$, ошибка экстраполяции T при любом ЗУ тоже равна дисперсии поля $V(\eta, t)$.

Таким образом, $t_з$ является естественным и максимально целесообразным пределом для ЗУ измерительной системы и времени упреждения

$$T,\ t_{упр} < t_з. \qquad (24)$$

П р и м е р. Полученные результаты были использованы для построения математической модели сероуглеродной колонны. Температурное поле колонны $U_1(\lambda, s)$ регистрировалось многоточечным потенциометром в 4 точках: на 1, 9, 27 и 35-й (верхней) тарелках. Другие составляющие поля $U(\lambda, s)$ не контролировались. В фиксированные моменты времени отбирались пробы остатка и дистиллата, которые затем анализировались ксантогенатным способом на содержание сероуглерода. Продолжительность реализаций всех функций составила 210 минут.

Таблица 1

λ \ τ, мин	0	3	6	9	12	15	18	21	24
1	—0,040	—0,078	—0,092	—0,100	—0,083	—0,081	—0,073	—0,095	—0,107
9	0,582	0,610	0,612	0,548	0,479	0,390	0,319	0,255	0,184
λ \ τ, мин	27	30	33	36	39	42	45	48	51
1	—0,156	—0,172	—0,191	—0,151	—0,128	—0,057	—0,027	0,035	0,061
9	0,086	—0,005	—0,070	—0,126	—0,180	—0,217	—0,265	—0,285	—0,328

$D_v(1)=0,0000133$; $D_{u_1}(1)=0,280$; $D_{u_1}(9)=0,0981$.

По экспериментальным данным подсчитывались оценки моментов первого и второго порядков. В табл. 1 для иллюстрации приводятся значения оценок нормированной взаимной корреляционной функции $^n(\eta, \lambda, \tau)$ и дисперсий $D_v(\eta)$ и $D_{u_1}(\eta)$ при некоторых значениях η, λ и τ, причем η и λ рассматриваются как безразмерные дискретные величины — номера тарелок.

Далее из системы линейных алгебраических уравнений, эквивалентной (8) [4], находились значения оценок весовой функции $w_1(\eta, \lambda, \tau)$ при $p=1$ и $\eta=1$. Из-за ограниченного объема ЗУ машины весовая функция определялась лишь при 2 значениях λ: $\lambda=1$ и $\lambda=9$. Значения весовой функции приведены в табл. 2.

Таблица 2

λ \ τ, мин	0	3	6	9	12	15	18	21	24
1	—0,405	—2,888	—1,347	—1,670	0,386	3,728	0,157	0,719	1,657
9	6,088	3,690	0,716	0,695	—0,817	4,329	0,120	1,221	1,582
λ \ τ, мин	27	30	33	36	39	42	45	48	51
1	0,988	—0,926	—0,865	—4,459	0,400	0,378	—0,533	0,833	—3,804
9	—1,842	—0,510	1,440	—0,913	—1,046	—1,258	—0,918	1,095	—1,024

Значение нормированной функции множественной корреляции при $\eta=1$, вычисленное по данным табл. 1 и 2, по дискретному аналогу (11) [4] при $p=1$, равно 0,929. Следовательно, экспериментальные данные в первом приближении не отвергают принятое допущение о линейности рассматриваемого объекта.

Подставляя в (17) вычисленное значение нормированной функции множественной корреляции и значение $\rho_{vu_1}(\eta, \lambda, \tau)$ при $\eta=\lambda=1$ и $\tau=0$ из табл. 1, находим $\alpha=7{,}29$. Таким образом, при измерении концентрации сероуглерода в остатке по результатам наблюдения температурного поля колонны на 1 и 9-й тарелках в течение 51 *мин* среднеквадратическая ошибка может быть уменьшена более чем в 7 раз по сравнению с обычно применяемым измерением. Дальнейшее повышение точности, согласно (14)—(17), может быть достигнуто при использовании более полной информации о поле $U(\lambda, s)$.

ЛИТЕРАТУРА

1. В. С. Пугачев. Теория случайных функций и ее применение к задачам автоматического управления. М., Физматгиз, 1962.
2. Я. И. Лукомский. Теория корреляции и ее применение к анализу производства. М., Госстатиздат, 1961.
3. Н. С. Райбман. Основы теории построения математических моделей сложных объектов автоматизации статистическими методами. (Автореф. докт. дисс.). М., 1965.
4. О. С. Кожинский. Статистические методы определения характеристик объектов с распределенными параметрами.— Тезисы VI Всесоюзной конференции по автоматическому контролю и методам электрических измерений. Новосибирск, 1964.

Поступила в редакцию
18 июня 1965 г.