



混合建模：将人工智能和领域知识相结合进行资产优化

本文主要介绍这项新技术能够解决的业务挑战、AspenTech正在向市场推出的三种混合模型、可直接创造价值的若干领域，以及AspenTech引领这一技术新浪潮并帮助过程工业在动荡未知的环境中前行的独特能力。

执行摘要

艾斯本技术有限公司（AspenTech）开发了一种能够将基于第一性原理的过程模型与领域知识、人工智能和分析算法相结合的方法。所获得的最终应用软件是一个混合建模系统，与纯第一性原理建模或纯人工智能相比，该混合建模系统的功能更加强大。

第一性原理模型能够对化工和油气过程进行精准建模，因此应用广泛。Aspen Plus® 和 Aspen HYSYS® 作为全球领先的化工过程模拟系统，在工业、研究人员和科学家四十多年来的使用过程中，其准确性和预测能力得到了验证，因而深受信赖且仍在不断提高。其模型和第一性原理的关系源于数百年来全球优秀的工艺工程师和操作人员的经验，包括AspenTech研发团队的专业知识以及Aspen Academy中的高校研究人员和客户提供的信息和帮助。



为了精进这些模型的最终精度，需结合工厂数据，将第一性原理模型与观测的工厂条件和操作性进行校准。尽管 AspenTech 提供了许多工作流程自动化的改进，但当前有效的模型校准仍需要大量的专业知识和经验。

人工智能和机器学习作为快速发展的计算工具，可以极大地提高使用工厂数据的能力，这些数据可用于校准第一性原理模型，还加快了创建基于数据的现象和过程模型的进程。人工智能可以降低过程系统建模的专业技术门槛，但必须结合领域知识，以创建真实世界的约束，使模型安全、可靠、直观地运行。

混合模型结合了人工智能、第一性原理和领域知识，无需大量专业知识就能更快地创建全面、准确的模型。机器学习利用模拟、工厂或中试数据创建模型，同时使用包括第一性原理和工程约束的领域知识来完善模型，且用户无需具有深厚的过程专业知识或成为人工智能方面的专家。这种新一代解决方案在混合模型中应用人工智能，以优化资产的设计、运营和维护，实现在线和边缘设备部署。

人工智能和机器学习可以帮助我们建立一个更强大的模型，以分析更广泛的数据集，同时利用先进的数据科学技术进行模型预测。当结合工程原理和领域知识时，这些模型比传统方法更易于建立和维护，且不需要用户具备大量的专业知识。



使用混合模型，用户可以对使用纯第一性原理不易模拟的过程和资产进行建模。例如：

- 间歇过程，体系变化太大，无法系统地建模
- 具有复杂化学和流体特性的流化床过程
- 生物反应器和发酵罐
- 复杂的炼油装置

用户获得了经验模型的准确性和第一性原理模型的优势，利用人工智能和领域技术，以更快的速度创建一个更具预测性的模型，而所需的经验少于以往。

混合模型可更好地表示工厂，并与其在较长的时间内紧密关联。因而降低了使用建模进行资产优化的门槛，所需的投入和专业知识也更少。有了这些模型，相关员工就可以进行更具价值和战略性的工作。

AspenTech通过模型组合方法，在现有的软件套件中部署混合建模功能，这种方法可以在不同的功能领域中同步部署满足预期的不同模型，以确保安全、可靠、可持续地运营资产并创造更多利润。模型组合的例子是在计划、动态优化和在线设备监控中使用降阶单元模型，这些模型都源自同一炼油装置的操作数据集和仿真模型，可实现闭环生产优化。





过程工业面临宏观经济的不确定性和前所未有的威胁。过程工业中的领军企业在其业务的所有阶段都面临前所未有的波动性。诸如油气价格波动、远程工作需求的变化和供应链中断等外部因素导致相关的过程制造商不可避免地受到影响。为应对从原料价格到社会可持续发展需求变化的挑战，各组织机构必须进行复杂的权衡。软件技术，尤其是人工智能，被广泛认为是能够帮助组织应对这些挑战并实现蓬勃发展的主要工具之一。

市场波动与能源转型

三股外部力量正在迫使全球能源和化工企业持续动荡。我们正在经历的全球市场供求冲击和经济复苏、能源转型和零碳行业的社会驱动力、零伤亡和环境事故的社会契约驱动力，都对企业高管团队的思维产生了巨大影响。

在利用率不可预测的情况下，过程工业相关公司专注于灵活弹性的生产策略，延长的设备维护间隔，以及稳定的产量和运营利润。可快速解决关键经济单元或整厂问题的模型，能更好地模拟工厂运行条件，解决实现这些目标所面临的关键问题。混合建模使快速建模和模型部署，甚至远程部署成为可能，以应对动态的市场因素和资产状况。这些模型是未来自优化工厂中转变运营模式的关键要素。

领域专家逐渐减少

随着领域专家的逐渐老龄化，新一代员工尚未掌握关键技能，过程组织将面临着关键知识“断层”的危机。嵌入人工智能的混合模型可解决此问题，为组织和资产创造了立竿见影的价值。对于财力并不雄厚的企业来说，需要具备在专家稀缺且昂贵的情况下构建和部署这些模型的能力。



持续地减排压力

在当前的经济周期结束后，行业仍将面临严峻的碳减排要求。转向循环经济的压力也为创新带来了许多挑战。混合模型让我们能够在广泛的资产范围内进行优化和评估，帮助我们选择最佳的策略，以满足这些目标。如今，各公司正面临由可持续性发展的压力给运营和战略决策带来的复杂的挑战。



AspenTech在过程工业中应用混合建模的愿景



对于各种规模的资产和公司来说，性能良好且准确的模型的普及是理解特定过程如何运转或响应意外变化的关键一步。随着工厂及其系统复杂性的增加，这些模型对于运营来说变得至关重要。

混合模型结合了人工智能和第一性原理，在无需大量专业知识的情况下，就能更快地交付全面、准确的模型。机器学习利用模拟或工厂数据，同时使用包括第一性原理和工程约束的专业知识来构建强化的模型，且无需用户具有深厚的过程专业知识或成为人工智能专家。

通过混合模型，用户可以对使用纯第一性原理难以模拟的过程和资产进行建模。经验模型的准确性，第一性原理模型优势、再结合人工智能和专业知识，使创建的模型预测能力更强。

AspenTech 具有40多年的专业技术领域的独特优势，将人工智能融入过程行业，开发了为工业服务的人工智能模型。AspenTech将三种优势结合在一起：

- 过程行业中强大而先进的领域技术
- 从众多互联传感器产生的大量数据中，捕捉和分析信息的能力
- 引领行业发展趋势，将机器学习与人工智能融入工业解决方案

简单的示例

通过一个聚合物反应过程的简单示例，显示了简单的机器学习和AspenTech混合建模方法之间的巨大差异（见下图）。

左图显示了由机器学习创建模型与聚合反应器的工厂数据的拟合结果。右图显示了在混合建模方法中引入第一性原理后，拟合结果的显著改善。



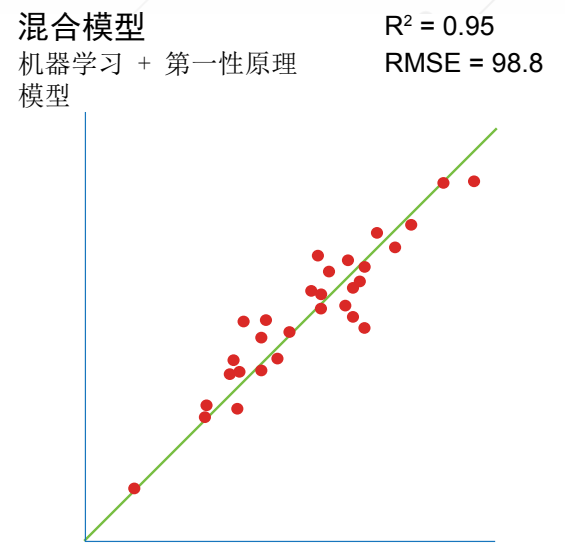
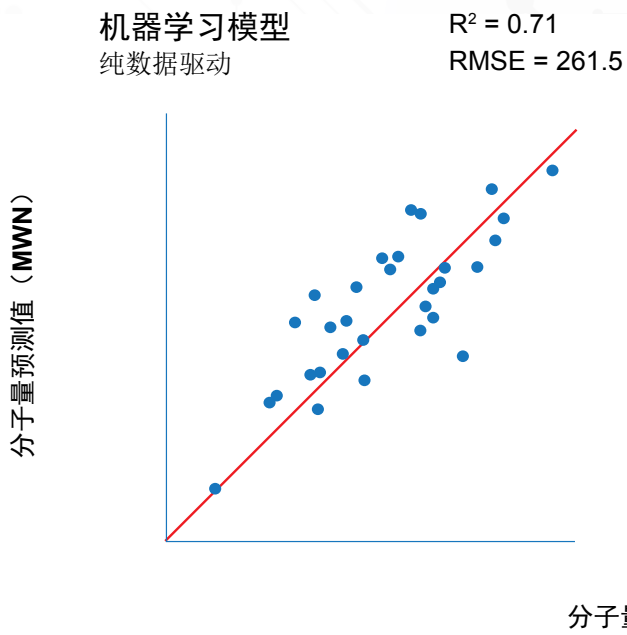


图 1. 聚合物反应过程的机器学习模型与混合模型比较

AI

AspenTech混合建模的三种类型



AspenTech创建的混合模型结合了几个关键技术组件：包括过程和工厂工程师用于快速将工厂和模拟数据转化为基于人工智能的机器学习模型的工具，而无需理解数据科学；将第一性原理的理化知识与基于人工智能的经验模型和直观的自动化工作流程相结合的工具，作为操作应用进行部署。

这些工具将以三种混合模型的形式服务于企业，且均为行业首创，即：

类型 1：人工智能驱动混合模型

此方法使用机器学习，基于工厂或实验数据，创建经验模型，并辅以第一性原理（如热力学物性等）、约束（如质量平衡）和专业领域知识。经验不足的用户也能快速生成全新的具有预测性的、更准确的模型，实现人工智能应用的全面普及。用户现在可以对使用纯第一性原理难以建模的过程和资产进行建模。例如复杂的反应装置操作过程、新材料合成过程和新技术的使用过程。

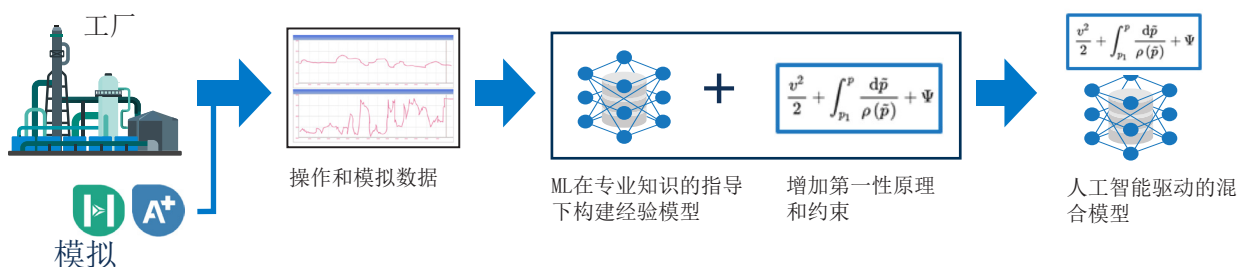


图 1：人工智能驱动混合模型工作流程；工艺工程师可以直接使用数据快速建立单元或过程模型，而不必理解数据科学的原理。

类型 2：降阶混合模型

此方法利用机器学习，创建基于大量模拟运行数据的经验模型，并辅以约束和专业领域知识，以构建满足需求、高保真度、高性能的模型。此模型在其训练范围内是准确的，充分普及了人工智能技术的应用。通过降阶模型，用户可以轻松地将建模范围从单元扩展到整厂，并在设计、运营和维护阶段中同步模型。例如，构建从原油输入到化学成品输出的价值链模型，在边缘设备上在线构建可快速部署和精简的模型，以及在计划线性程序中嵌入高精度模型。



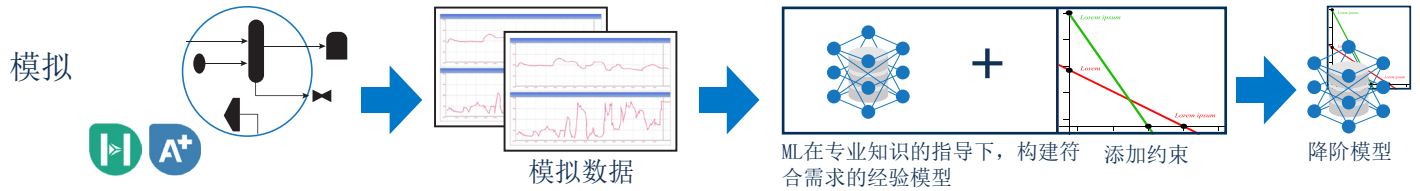


图 2: 降阶混合模型工作流程。工艺工程师使用调整后的仿真模型来生成机器学习降阶模型，这些模型可以在一系列目标应用中部署并保持一致。

类型 3: 第一性原理驱动的混合模型

此方法将现有的第一性原理模型与人工智能结合，使用操作数据以计算原始模型未能捕捉到的未知变量和关系。通过确定未知值及其关系，机器学习能够随着条件的变化持续地校准模型。这种方法是现有第一性原理模型在全球许多棕地部署的自然延伸；这种方法快速且易于采用，准确性也更高。例如，为特殊的间歇过程单元嵌入由人工智能创建，但第一性原理为主导的模型。

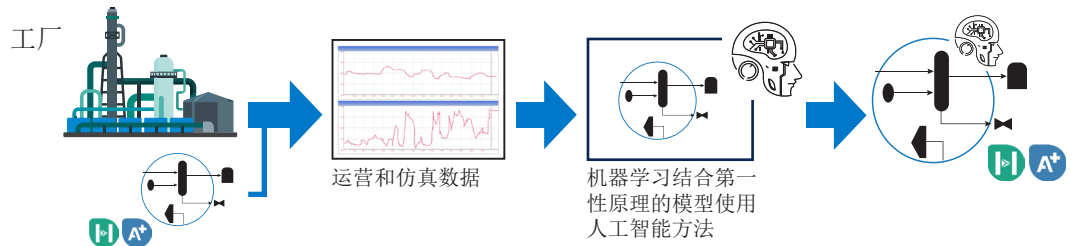


图 3: 第一性原理驱动的混合建模工作流程。机器学习结合第一性原理模型对难以建模的单元进行描述，例如许多间歇过程。

模型	摘要	例如
人工智能驱动的混合模型	一种经验模型，使用机器学习的方法，基于工厂或实验数据、第一性原理、约束和专业知识构建更精确的模型。	<ul style="list-style-type: none"> 建立复杂的过程装置和工艺模型 推理传感器 在线设备单元模型
降阶混合模型	一种经验模型，使用机器学习的方法，基于模拟运行数据、约束和专业知识来构建模型，可创建更快、更高效的符合需求的模型。	<ul style="list-style-type: none"> 炼厂范围或化工厂范围的模型 计划模型更新 部署快速解算的在线模型来预测最佳/最差情况下的清理安排 在线部署过程生产线模型 APC 非线性模型部署
第一性原理驱动的混合模型	在现有的第一性原理模型的基础上，增加数据和人工智能，以提高模型的准确性和可预测性。	<ul style="list-style-type: none"> 间歇单元建模 生物过程建模 复杂单元建模

表 1: 混合建模风格和示例场景概述。

混合模型优势和业务价值的案例展示



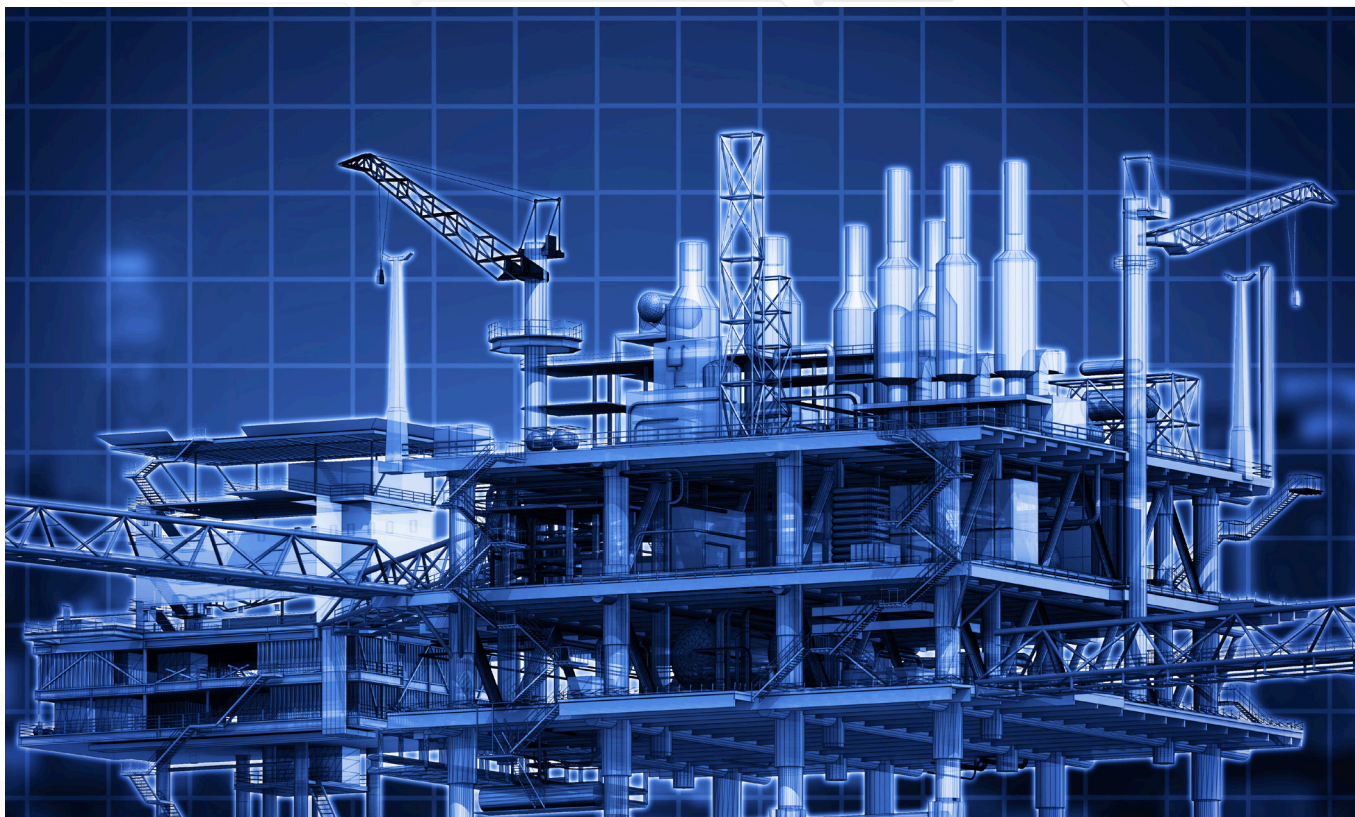
在过去的一年中，超过 80 家公司参与了 AspenTech 的混合建模测试；期间，我们使用了 30 多个工业数据集来评估此方法的稳健性。测试中发现了许多高价值的用例。

基于测试结果和潜在应用案例的反馈，以下总结了混合模型的独特优势：

- 1. 扩大建模范围和影响：**复杂的操作单元通常会带来产量、性能和质量问题。混合模型使工艺工程师能够使用第一性原理，例如特殊化学反应器模型，对几种难以描述或不可描述的设备类型进行建模。混合模型将建模范围从过程扩展到整厂，通过使用降阶混合模型解决这些棘手问题。
- 2. 建模普及化：**如今，企业组织中大量新进工程师需要处理相同的信息。混合模型使普通的工艺工程师能够在不具备专业建模技能的情况下开发设备和资产的模型，基于操作数据和内置的数据科学来开发可靠且满足预期的模型。
- 3. 创建准确、满足预期的模型：**传统上，不同的满足预期的模型具有不同的功能领域，这使得模型的开发过程成为循环的挑战。现在，在计划、动态优化和在线设备监控的适用范例中，降阶单元混合模型能够简单且准确地表示复杂过程并可轻松地相同的精炼装置操作数据集和仿真模型中导出，实现闭环生产优化。
- 4. 更好的模型维护优势：**由于具有数据驱动和第一性原理组件，混合模型可以与工厂数据紧密关联，并且能够随着业务的发展与资产运营保持同步，因此其模型维护比纯第一性原理模型更具优势。



5. 促进不同学科间的合作：降阶建模支持跨学科间的模型合作。例如，混合模型基于炼厂的严格反应器模型信息更新计划模型，改善了信息的共享和协作。





以下是一些在企业中测试成功的案例，说明混合建模将：

- 扩展了数字孪生可以解决的业务问题的范围
- 提高盈利能力和质量
- 使技术更易应用于新一代知识型员工(未开发的数字原生产品)。

炼厂和乙烯厂计划模型更新

炼厂和乙烯厂的利润与工厂计划人员和操作员密切相关，他们是实现月度生产计划的关键。利润差距通常是由于过时或不准确的计划模型，特别是某些关键的反应器装置，如FCC和加氢裂化装置。保持现有过程的模型最新是建模专家的关注点。

全球最大的炼厂之一预计，使用混合建模工作流程能够根据需要随时生成这些具体的反应器模型的最新版本，对于产量为20万桶/天的炼厂来说，保守估计每年可节约 1000多万美元。对于产品变化较大的炼厂来说，无疑是一个非常及时的解决方案。

设备监控

在线部署的单元和设备模型用途广泛，可以为操作员提供操作建议，从而提高运营产量、解决性能和安全问题以及提高合规性。例如预热换热器组模型可以提供污垢和清洁建议，甚至作出闭环决定。混合模型易于开发、更新和运行。仅污垢监测应用就可以为单个换热器组带来数千万美元/年的价值(基于测量的案例研究)。

再如，用于催化剂降解和寿命延长的炼厂反应器单元模型。通过延长催化剂寿命和提高产量/性能，这些模型可以为每个催化剂反应器单元每年创造500-1000万美元的经济价值。

特种与高性能聚合物过程建模

特种聚合物生产过程容易出现质量问题和废物。然而，聚合物反应器结构复杂，难以精确建模且非常耗时。相应建模专家供不应求。在特种聚合物的使用案例中，混合模型能够准确地表示关键聚合反应器单元的性能。

基于实际数据，我们已经在复杂的聚合物生产应用中测试了混合模型的有效性，取得了优于其他所有方法的结果和经济效益。我们与一家知名聚合物制造商一起测试了数据集，该制



造商估计该模型为每条生产线至少带来100万美元/年的价值，解决了之前一直无法解决的问题。

全厂选优建模和优化

企业需要整厂范围的模型来解决可持续性和灵敏性相关的业务问题，但这些模型现在很难构建。降阶模型可以将模型抽象为企业视图，用于为经营管理和战略决策提供信息支持。整厂范围的模型运行更快、更直观，可推动敏捷的决策和资产优化，提高过程的安全性、可持续性并带来收益。

除了这些应用案例，这些混合的、人工智能驱动模型也将从根本上改变人类在业务中与智能系统交互的工作方式。工人们将不再需要花费大量时间来构建和重建模型以及手动处理大量电子表格中的数据流信息，而可以完成更高级别的功能，做出前瞻性的、数据驱动的决策，从而提高模型整体的准确性、效率和性能，同时降低系统风险。





人工智能正在迅速其在工业领域提供预测和洞察能力。**AspenTech**相信，虽然人工智能可为工业过程和设备提供有效的洞察，领域的专业知识仍然是关键。因此，我们开发了一种混合建模方法，将人工智能和领域专业知识相结合。**AspenTech**推出了三种类型的混合建模方式，涵盖广泛的高业务价值的案例，可以在当前的环境下，为操作员和工程师创造可衡量的价值。**AspenTech**与80多个知名客户保持合作，其中许多客户分享了宝贵的过程操作数据和模型，用以测试模型的工作流程和功能，以帮助我们定义直观的可用性。

AspenTech通过模型组合技术，将不同功能领域所适用的不同模型进行同步，实现混合建模功能在现有软件套件中的部署，以达到安全、可靠、可持续地运营资产并创造更大收益的目的。

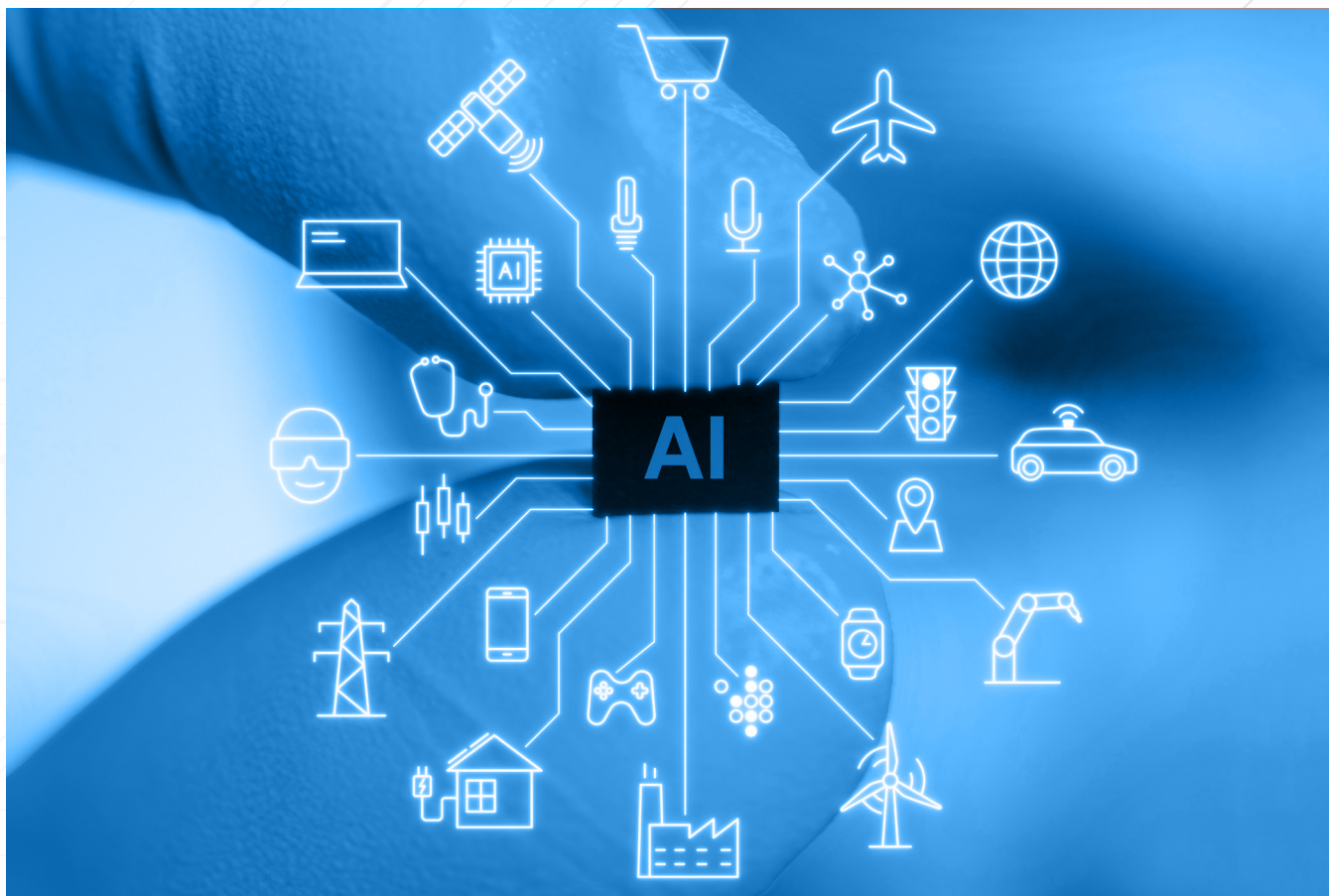
今天，过程工业相关组织正面临前所未有的挑战。面对需求的不确定性、原料和原油价格的波动、可持续性发展的压力和全球竞争，您需要提高敏捷性和洞察力，开展针对整个企业的分析，从而为您的企业规划出更好的发展蓝图。这一计划也因退休潮的到来而更具挑战性，因为退休潮会使企业损失数十年的经验。

现在，是时候积极采用数字化和人工智能技术，为我们提供一条平稳的发展道路。这条道路以您已使用数十年的强大工具为基础，可以帮助您进一步实现自动化，并且从模型中获得实用的见解，您还可以远程访问这些工具。这将使人工智能技术在过程工业装置和工厂的设计和操作中更加普及。

鉴于这项技术可以快速为企业提供强大的竞争优势，能源、化工、承包和相关行业的知名企业正在与**AspenTech**展开合作。这些优势可以转化为利润，促进可持续性发展和节约资本支出，以及为企业带来可持续的业务优势。



请立即联系 **AspenTech** 股份有限公司，了解数字化和人工智能如何帮助您改进业务，以及具体评估可快速应用的领域，最终提高业务绩效。



投稿作者：

Ron Beck,
AspenTech 股份有限公司营销战略总监

Gerardo Munoz,
AspenTech 股份有限公司高级产品营销专家。

关于 AspenTechnology

Aspen Technology (AspenTech) 是优化资产绩效的领先软件供应商。我们的产品在复杂的工业环境中蓬勃发展，对于优化资产设计，运营和维护生命周期至关重要。AspenTech 独特地将数十年的流程建模专业知识与大数据机器学习相结合。我们的专用软件平台通过在整个资产生命周期内提供高回报，实现知识工作的自动化并建立可持续的竞争优势。因此，资本密集型行业的公司可以最大限度地延长正常运行时间并推动性能极限，更快，更安全，更长时间和更环保地运营资产。

请访问 [AspenTech.com](https://www.aspentech.com) 了解更多信息。

© 2020 Aspen Technology, Inc.、AspenTech®、aspensONE®、Aspen 树叶标志、aspensONE 标志和 OPTIMIZE 是艾斯本技术有限公司的商标。保留所有权利。AT-06245

