

原料性质不确定下连续重整装置改进多目标贝叶斯 操作优化

陈嘉贇, 彭鑫, 李智[†]

(华东理工大学 能源化工过程智能制造教育部重点实验室, 上海 200237)

摘要: 连续重整 (CCR) 装置是石化行业的重要装置之一, 针对该装置在原料性质不确定下的操作优化问题, 提出一种改进的多目标贝叶斯优化方法. 该方法首先采用多目标贝叶斯优化 (MOBO) 框架, 通过高斯过程代理模型高效逼近 Pareto 前沿. 为提升解集多样性, 创新引入迭代距离阈值机制, 有效缓解传统方法中的解集聚问题. 针对原料不确定性, 提出一种数据驱动的不确定性区间构建方法, 将历史统计信息与实时测定值相结合, 更准确地刻画原料波动特性. 在此基础上, 通过层级图法从 Pareto 解集中筛选候选操作点, 并在模拟的多种原料场景下评估其鲁棒性, 最终获得兼顾优化性能与运行稳健性的操作方案. 基于 27 集总 CCR 机理模型的仿真结果表明, 所提方法能以较少评估次数获得分布更优的 Pareto 前沿, 为工业装置在原料波动下的操作优化提供了有效解决方案.

关键词: 操作优化; 连续重整; 原料不确定性; 代理模型; 贝叶斯优化; 层级图法

中图分类号: TP181 **文献标志码:** A

DOI: 10.13195/j.kzyjc.2026.0159

引用格式: 陈嘉贇, 彭鑫, 李智. 原料性质不确定下连续重整装置改进多目标贝叶斯操作优化 [J]. 控制与决策.

Improved multi-objective bayesian operational optimization for continuous catalytic reforming under feedstock property uncertainty

CHEN Jia-yun, PENG Xin, LI Zhi[†]

(Key Laboratory of Smart Manufacturing in Energy Chemical Process, Ministry of Education, East China University of Science and Technology, Shanghai 200237, China)

Abstract: The continuous catalytic reforming (CCR) unit is one of the critical installations in the petrochemical industry. To address the operational optimization problem under feedstock property uncertainty, this study proposes an improved multi-objective Bayesian optimization method. The approach first adopts a multi-objective Bayesian optimization (MOBO) framework, efficiently approximating the Pareto front through Gaussian process surrogate models. To enhance the diversity of the solution set, an innovative iterative distance threshold mechanism is introduced, effectively mitigating the solution clustering issue inherent in conventional methods. For feedstock uncertainty, a data-driven method for constructing uncertainty intervals is proposed, which integrates historical statistical information with real-time measurement data to characterize feedstock variability more accurately. On this basis, candidate operating points are selected from the Pareto solution set using the level diagrams method, and their robustness is evaluated under simulated multiple feedstock scenarios, ultimately yielding an operational strategy that balances optimization performance and operational stability. Simulation results based on a 27-lump CCR mechanistic model demonstrate that the proposed method can achieve a better-distributed Pareto front with fewer evaluation iterations, providing an effective solution for the operational optimization of industrial units under feedstock fluctuations.

Keywords: operational optimization; continuous catalytic reforming; feedstock uncertainty; surrogate model; Bayesian optimization; level diagrams

0 引言

连续重整 (CCR) 作为整个石油化工行业中至关重要的装置之一, 其以经过混合精制的石脑油为原料, 在高温高压条件下

收稿日期: 2026-02-24; 录用日期: 2026-04-02.

基金项目: 国家重点研发计划项目 (2023YFB3307800); 上海市自然科学基金项目 (24ZR1415900); 国家自然科学基金面上项目 (62273149); 工业控制技术全国重点实验室项目 (ICT2024A26).

责任编辑: 褚菲.

[†]通信作者. E-mail: zhili@ecust.edu.cn.

转化为富含芳烃(苯, 甲苯, 二甲苯, 合称 BTX) 的重整汽油, 满足了市场对高辛烷值清洁汽油的大量需求^[1]. 因此, 如何在保障装置安全稳定生产运行的同时最大化挖掘其经济效益是目前热门的研究课题.

对于优化问题, 通常需要建立机理模型以评估设计操作参数的目标函数值, 并通过优化算法寻找约束条件下的最优操作变量^[2]. 目前有许多针对 CCR 装置进行操作优化的研究, 以实现其经济效益的提升或能耗的降低, 对装置的生产运行具有实际的指导意义^[3]. 侯卫锋在原有 17 集总模型基础上, 将 C8 芳烃进一步细分提出 18 集总动力学模型, 并采用序列二次规划方法 (SQP) 实现了对芳烃产率的优化^[4]. 贺益君建立了 27 集总动力学 CCR 模型, 并首次在 CCR 建模中引入轴向分区, 以较低计算成本捕捉到了轴向分布信息, 平衡了机理模型精度与计算效率^[5]. 许多学者也构建了相应集总模型以实现装置性能优化^[6-8]. 然而, 机理模型由于其复杂的内部结构, 每次进行优化评估需要耗费较大的计算成本, 难以满足现场优化的实时性要求, 因此通过代理模型拟合机理模型的输入输出关系是常见的处理方法. 刘禹含使用 LightGBM 决策树模型对 CCR 装置进行了生产产品的预测建模, 并针对操作优化进行了操作变量相关性分析^[9].

上述对于操作优化的研究多集中于某一个单独优化目标或是对多个优化目标进行加权组合, 然而多个优化目标之间往往存在着内在的冲突与权衡^[10-12]. 因此, 将多目标优化引入 CCR, 系统性地揭示各目标间的权衡关系具有现实必要性. 侯卫锋首次将多目标优化应用于工业 CCR, 针对芳烃生产中的冲突目标(最大化芳烃收率、最小化重芳烃收率) 使用非支配排序遗传算法 (NSGA) 进行了协同优化^[13]. 李鸿亮使用了一种改进的混合遗传算法, 在 17 集总模型上完成了实验验证^[14]. 杨明磊等在 33 集总动力学模型的基础上, 开发了一种分层多目标优化算法 (MODE), 首先通过固定四反应器权重进行全局搜索, 再固定压力与氢油比通过局部搜索细化优化结果, 大幅度提高了优化效率^[15]. Zainullin R. Z. 通过遗传算法实现了用于重整石油馏分的反应器装置性能的多准则优化^[16]. 许多针对其他装置的多目标优化研究也具有较高的参考价值^[17-20].

尽管上述研究已经实现了部分情形下对 CCR 装置的操作优化, 但其中仍然存在问题亟待解决. 机理模型对优化参数的评估需要消耗大量时间, 然而代理模型的构建需要大量样本数据点以确保其预测精度, 而完全基于历史工业数据构建的数据驱动代

理模型缺乏对新优化样本点进行有效评估的手段. 针对以上问题, 本研究采用多目标贝叶斯优化方法实现对代理模型快速的精确建模以及对真实 Pareto 前沿的快速逼近, 通过模型更新与优化迭代的交替进行, 从而在保证优化效率的同时实现有效评估. 针对 Pareto 解集出现集聚效应的问题, 提出了一种基于样本点距离阈值的改进优化方法, 有效缓解了解集多样性缺失的问题, 对比原始方法与常见的其他多目标优化算法实现了优化性能提升.

由于原料性质的测定间隔时间较长, 在优化期间原料的真实组分构成具有相应的不确定性. 而在给定的实验室测定原料性质下优化得到的操作参数在实际波动的原料性质下可能是次优的. 因此, 研究考虑原料不确定性的优化方法在实际工程应用上具有必要性. 目前已存在相应研究针对类似具有不确定性下的优化问题^[21-22], 但大多基于变量历史的均值与方差数据进行采样, 未能充分利用当前已知的测定数据. 本研究利用当前测得的原料性质数据, 结合历史原料性质组分的统计数据, 构建了一种更加合理的不确定性区间, 通过采样模拟得到描述不确定分布的样本点, 实现了具有原料不确定性下的多目标优化工作, 并最终在一个 27 集总动力学模型上完成了实验仿真, 验证了所提出多目标优化方法的有效性.

1 连续重整过程概述

1.1 CCR 过程

CCR 工艺是现代石油炼制与芳烃生产领域中的关键转化技术, 其核心工艺特征在于实现了反应过程与催化剂再生的同步连续化操作. 相较于传统半再生式重整工艺, 连续重整装置通过集成循环再生系统, 使失活催化剂在独立再生单元内连续经历烧焦、氯化及金属再分散等步骤, 从而维持催化剂体系的高活性与稳定性^[23]. 其主要过程如图 1 所示. 来自石脑油加氢单元的精制石脑油与加氢裂化装置直供的重石脑油经过混合后, 通过过滤器作为装置原料输入. 首先混合进料进入重整混合进料换热器 (E201), 与来自重整循环氢压缩机 (C201) 的氢气混合, 并与重整反应产物进行换热. 换热后的物料进入重整进料加热炉 (F201) 加热至重整反应所需温度, 再进入第一重整反应器 (R201). 物流以径向方式穿过反应器内的扇形筒, 与连续向下移动的重整催化剂接触, 在临氢条件下发生重整反应. 由于反应器内主要发生吸热反应, R201 的出料需要经过进入第一中间加热炉 (F202) 升温至设定反应温度, 从而进入

$f_{ARO}(x)$, $f_{RGO}(x)$ 分别为在相同操作变量下的芳烃收率与重整油流量. 为了评估多目标优化结果的优劣, 这里引入了 Pareto 支配的概念. 设 $f(x) = [f_{ARO}(x), f_{RGO}(x)]$, 在该优化问题下对于一个 $f(x')$, 若存在一个 $f(x)$, 其 $f_{ARO}(x) > f_{ARO}(x')$ 且 $f_{RGO}(x) > f_{RGO}(x')$, 则称 $f(x)$ Pareto 支配 $f(x')$, 记为 $f(x) \succ f(x')$. 对于集合 $F = \{f(x) | \exists x' \in X, f(x') \succ f(x)\}$ 称为 Pareto 前沿, 集合 $X' = \{x | f(x) \in F, x \in X\}$ 称为 Pareto 解集, 两者是多目标优化中重要的概念.

贝叶斯优化 (Bayesian Optimization, BO) 是一种高效的全局优化方法^[26-27], 通过构建目标函数的概率模型, 其能够针对性选择下一个优化评估点更新相应代理模型, 从而用最少的评估次数找到全局最优解. 这种特性使其十分适合于评估代价昂贵的机理模型. 整个贝叶斯优化的基本流程如图 2 所示, 首先通过初始采样点构建代理模型, 并通过采集函数选择下一个需要进行机理评估的样本点. 利用所得到新样本点更新当前代理模型并最终重复迭代直到满足设定收敛条件. 高斯过程模型 (Gaussian process, GP) 是贝叶斯优化中最常用的代理模型, 在本研究中采用了两个 GP 来分别拟合输入操作参数与两个优化目标之间的映射关系. GP 定义函数的先验为:

$$f(x) \sim \mathcal{GP}(0, k(\mathbf{x}, \cdot)). \quad (2)$$

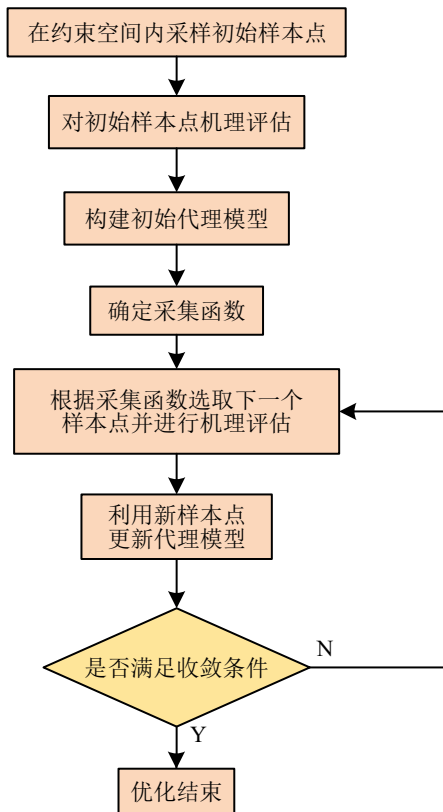


图2 贝叶斯优化基本流程

其中 $k(\cdot, \cdot)$ 为协方差函数 (核函数), 代表了样本之间的相关性. 利用观测数据集 $D = \{X_i, Y_i\}$ 可以得到相应高斯后验:

$$Y(x)|D \sim \mathcal{GP}(\mu(\mathbf{x}), \sigma^2(\mathbf{x})). \quad (3)$$

$\mu(\mathbf{x})$ 、 $\sigma^2(\mathbf{x})$ 分别为后验均值与方差, 计算方式如下:

$$\begin{aligned} \mu(x) &= \mathbf{k}_i^T [\mathbf{K}_i + \tau^2 \mathbf{I}]^{-1} \mathbf{y}_i \\ \sigma^2(x) &= k(x, x) - \mathbf{k}_i^T [\mathbf{K}_i + \tau^2 \mathbf{I}]^{-1} \mathbf{k}_i. \end{aligned} \quad (4)$$

其中 $\mathbf{k}_i = k(x, X_i)$ 代表了当前输入与训练集中所有输入的核函数值, $\mathbf{K}_i = k(X_i, X_i)$ 代表训练集数据内部之间的相关性, τ 为噪声. 综上, 在操作参数的定义域内, 首先使用了拉丁超采样方法进行初始点 X_{ini} 的采样^[28], 通过机理模型计算优化目标值作为初始数据集分别构建初始 GP 代理模型.

整个贝叶斯优化通过定义在上述后验高斯过程的效用函数 $u(x) = u(Y(x)|D)$ 来进行序贯决策, 而每个决策都是通过求解一个最大化采集函数的内部优化子问题得到. 在多目标贝叶斯优化中, 超体积 (HV) 可以用来量化当前已观测到的 Pareto 前沿近似质量, 其代表了帕累托前沿和参考点 R 为界的体积. 通常选择每个目标的独立下确界作为参考点 R , 在本研究中 HV 代表参考点与 Pareto 前沿连接覆盖的面积, 采用期望超体积改进 (EHVI) 作为采集函数, 从而选择使该期望改进最大的点作为下一次评估的样本^[29]. 然而, 直接解析计算当前后验 GP 下的 EHVI 十分困难, 因此采用汤普森采样方法 (Thompson sampling, TS) 进行近似, 首先利用拉丁超立方方法在 X 中进行采样, 对于任一样本 x , 其 EHVI 计算公式如下:

$$\begin{aligned} \alpha_{\text{EHVI}}(x) &= \mathbb{E}_{y \sim p(Y_1(x), Y_2(x)|D)} [\Delta \text{HV}(y; \mathcal{P}_t, R)] \\ \Delta \text{HV}(y; \mathcal{P}_t, R) &= \text{HV}(\mathcal{P}_t \cup \{y\}, R) - \text{HV}(\mathcal{P}_t, R). \end{aligned} \quad (5)$$

其中 $\Delta \text{HV}(y; \mathcal{P}_t, R)$ 表示当候选点 x 的预测目标值为 y 时, 所产生的超体积改进. \mathcal{P}_t 为当前的 Pareto 解集, 随后每个样本点通过抽样近似其期望超体积改进:

$$\alpha_{\text{EHVI}}(x) \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \Delta \text{HV}^{(i)}(y^{(i)}; \mathcal{P}_t, R). \quad (6)$$

N 为提前设置的采样点数, 选择期望改进最大点作为下一个评估点:

$$x_p = \arg \max_{x \in X_p} (\alpha_{\text{EHVI}}(x)). \quad (7)$$

通过汤普森采样方法, 将复杂的高维积分的期望计算转化为采样与评估过程, 平衡了探索与利用概念. 然而, 通过上述采样方法获取的评估点可能会过于聚集在现有 Pareto 解集的附近, 导致 Pareto 前沿的扩展方向受限, 难以满足对解集多样性的要求. 因

此, 在本研究中创新性地提出了一种迭代距离阈值限制来缓解上述问题. 公式如下:

$$d_p = \begin{cases} d_{initial} - \left(\frac{p}{0.8n}\right)^2 * (d_{initial} - d_{final}) & p < 0.8n \\ 0 & p > 0.8n \end{cases} \quad (8)$$

其中 $d_{initial}$ 为初始距离阈值, d_{final} 为最终距离阈值, $d_{initial} \gg d_{final}$, p 为当前优化迭代次数, n 为总迭代次数, 在每一次迭代时, 根据所有候选样本点 X_p 的 α_{EHVI} 值, 从大到小进行排序并计算其距离现有代理模型训练集中所有样本点的最近欧氏距离 d , 当 $d < d_p$ 时, 选择下个候选点重复计算直到满足条件 $d > d_p$. 因此, 式 (7) 可以改写为:

$$x_p = \arg \max_{x \in X_p} (\alpha_{EHVI}(x)), \quad d_x > d_p. \quad (9)$$

在优化迭代的初期, 距离阈值 d_p 会处于一个较大的值来限制所选择评估点的距离与现有样本点之间的距离, 提高了贝叶斯优化中“探索”的能力. 二次函数项使得 d_p 在优化前期缓慢衰减, 而在后期则会快速衰减, 减少对评估点多样性的要求. 当迭代次数到达设定总迭代次数的 80% 时, 则取消距离阈值限制, 加强了对当前优秀样本点的利用. 传统的多目标优化算法 (如非支配排序遗传算法 II, NSGA-II) 的拥挤度机制, 在目标空间可能无法有效保持决策变量空间的多样性, 从而可能遗漏 CCR 具有实际工程意义的不同操作模式, 而所提出的距离阈值机制在决策变量空间直接运作, 通过维护一个动态衰减的阈值, 确保新产生的解与存档解在关键操作参数空间上保持一定距离, 提供了多样化的操作方案. 综上, 通过交替进行评估点选择、机理模型评估与代理模型的更新, 实现了在较少的机理评估次数下快速获取优化问题近似的 Pareto 前沿.

2.2 原料性质不确定下多目标优化

在 2.1 中, 所考虑的优化模型是在已知当前原料性质的情形下所实施的, 即在机理模型中, 给定原料组分, 通过调整操作参数并输出目标变量评估样本点. 其代理模型的构建也建立在相应原料性质不发生变化的前提下. 然而原料组分通常以一天 1~2 次的频率测取, 并且由于石脑油原料的不均匀性, 其性质组成在整个重整过程中是不断波动的. 因此, 对于操作优化, 原料真实组分具有相应的不确定性, 在确定性条件下得到的优化操作参数可能是次优解. 本研究中, 提出了一种数据驱动的不确定性分布构建方法, 通过历史原料性质数据与实验室测定的当前原料性质共同构建不确定性分布. 首先, 利用历史实

际运行数据中的原料组分, 计算各组分的均值 $\mu_{history} \in R^{n \times 1}$ 与协方差矩阵 $\Sigma_{history} \in R^{n \times n}$, n 为测定原料组分变量的个数. 若前次实验室测定原料组分为 $c_{new} \in R^{n \times 1}$, 则相应不确定性区间如下式:

$$\Sigma_{unc} = (\Sigma_{history}^{-1} + \Sigma_{obs}^{-1})^{-1}$$

$$\mu_{unc,i} = \frac{1}{\lambda_i + 1} \mu_{history,i} + \frac{\lambda_i}{\lambda_i + 1} c_{new,i}. \quad (10)$$

其中 Σ_{obs} 为观测误差协方差, 计算公式如下:

$$\Sigma_{obs} = D \cdot \Sigma_{history} \cdot D$$

$$D = \text{diag}(1/\sqrt{\lambda_1}, 1/\sqrt{\lambda_2}, \dots, 1/\sqrt{\lambda_n}) \quad (11)$$

$\lambda_i (i = 1, 2, \dots, n)$ 为各组分自适应权重系数, 公式如下:

$$\lambda_i = \lambda_0 \cdot \exp\left(-\frac{(c_{new,i} - \mu_{history,i})^2}{2\tau^2 \sigma_{history,i}^2}\right). \quad (12)$$

λ_0 为初始精度权重, τ 为衰减尺度参数. 可以发现, 某一组分的不确定性分布均值 μ_{unc} 为其历史均值与实验观测值的加权组合. 当观测值接近历史均值时, 其权重系数更高, 观测误差低, 因此相应的不确定性协方差 Σ_{unc} 较小, 并且 μ_{unc} 十分接近观测值 c_{new} . 相反, 当观测值偏离历史均值时, 相应方差值增大, 且 μ_{unc} 一定程度地向历史数据均值靠拢以实现正则化. 所提出的不确定区间界定方法, 相较于传统静态区间估计, 创新性地引入前一次实验室原料性质参数的实测值序列, 并将其作为先验信息纳入区间构建过程. 使所构建的不确定区间不仅能够反映当前批次原料的固有波动, 更能有效表征基于历史原料性质统计信息的当前不确定性范围. 因此, 该方法所刻画的不确定性范围与工业生产中实际存在的、多源耦合的原料不确定性结构更为吻合.

在得到原料组分的不确定分布均值向量与协方差矩阵后, 进行多元正态分布下的采样以获取描述不确定性的采样点: 设一个随机向量 $z = [z_1, z_2, \dots, z_n] \in R^{n \times 1}$, $z_i \sim N(0, 1)$, 可以得到相应的采样点:

$$X = \mu_{unc} + Lz. \quad (13)$$

其中 L 为变换矩阵, 由协方差矩阵 Cholesky 分解得到, $\Sigma_{unc} = LL^T$, 重复进行采样得到 s 个采样点, 用于构建描述原料不确定性的样本空间.

由于原料性质存在不确定性, 在确定条件下构建的代理模型可能会出现预测偏差. 同时, 由于原料组分较多, GP 模型依赖核函数的预测在面对高维输入的情形会导致其效率与精度明显下降. 装置发生工况切换时, 相应机理模型的动力学参数也需要进行相应调整, 因此难以通过单一静态代理模型进行

优化目标值预测. 因此, 针对上述问题, 提出一种两阶段的优化方法. 首先采用上述提出的改进多目标贝叶斯优化算法, 得到在确定原料性质条件下的 Pareto 解集 P . 随后, 根据上述提出的不确定性区间建立方法, 在其中重复采样得到 s 个样本点. 在本研究中, 采用了层级图法 (LD)^[30] 作为决策方法从 Pareto 解集中选择最优操作点. 层级图法是一种无需预先指定偏好权重的图形化决策方法, 从均衡角度评判了多目标优化解的质量, 具有高计算效率. 相较于 TOPSIS 或模糊决策等方法输出的单一得分或隶属度, LD 图提供了更丰富的空间信息, 便于结合工程经验进行综合判断, 尤其适用于优化目标数适中的决策场景. LD 法将多维目标空间映射到一维标量指标, 通过欧几里得范数衡量每个 Pareto 解到理想点的归一化距离, 公式如下:

$$\text{Norm} = \sqrt{\sum_{i=1}^m (1 - f_{i,norm})^2}. \quad (14)$$

m 为目标数, 在本研究中为两个. 理想点通常由每个目标在 Pareto 前沿上的最佳值构成, LD 方法选择 Norm 值最小的解作为最终操作条件, 该解代表了在多个冲突目标间取得了最佳平衡. 对于双目标优化问题, Norm 值最大为 $\sqrt{2}$, 为方便描述, 记 $LD = \sqrt{2} - \text{Norm}$. 在先前获得确定原料性质条件下的 Pareto 解集 P 中选取前 p 个最大 LD 值的解作为候选点. 记录这 p 个候选点所对应的操作参数并分别在采样的 s 个原料性质样本点进行机理模型验证, 得到 p 个均值 μ_p^{LD} 与 5% 分位数 $LD_p^{0.05}$. 最终候选点的得分 S_i 用下式计算:

$$S_i = w_1 \cdot \mu_i^{LD} + w_2 \cdot LD_i^{0.05} + w_3 \cdot LD_i \quad (15)$$

$$i = 1, 2, \dots, p.$$

LD_i 为第 i 个候选点在实验测定原料性质条件下的 LD 值, w_1, w_2, w_3 为相应权重, $w_1 + w_2 + w_3 = 1$. 通过上述方法, 所采取的操作策略综合考虑了对大概率情形的最优解以及对极端情形的优化保障, 从多个维度评估了操作样本点的优化性能.

3 仿真测试

本研究采用的机理模型使用 Aspen Plus v10.0 进行仿真测试. 所使用机理模型在对应工况参数下与真实 CCR 场景的一致性在文献 [25] 中已经验证. 所编写贝叶斯优化代码于 Python3.9.19 版本运行. 首先需要确定待优化的操作参数. 在连续重整模型中, 四个反应器的温度, 压力以及氢油比是可以调整的操作变量. 然而, 在实际生产装置中, 反应压力需严格按照装置设计值设定, 因此不对反应压力进行

调节. 氢油比对于产品收率影响较小, 因此最终选择四个反应器的进料温度作为操作参数. 为保证连续重整过程的技术可行性与安全性, 并使机理模型可以较为稳定地在设定操作条件下达到收敛, 四个反应温度约束限定在 460~530℃ 的区间内.

在本实验中, 模拟了在获得实验室测量的原料组分前提下针对产品收率进行操作优化. 因此, 机理模型中设置主要影响产品收率的原料组分如表 1 所示, 研究探索了在该原料组分基础上, 调整操作变量对产品收率的影响. 5N6、5N7、5N8 分别代表了碳 6、碳 7、碳 8 的五元环烷烃, 同理 6N6、6N7、6N8 代表各碳原子数下的六元环烷烃, 各组分单位均为摩尔分率. 总进料流量设置为 140 000 kg/hr, 循环氢量为 1 300 kmol/hr. 优化过程对初始采样点数不敏感, 因为其在迭代中不断优化, 因此为验证基于代理模型贝叶斯优化可行性, 首先采用拉丁超立方采样生成 40 个初始点构建 GP 代理模型, 训练集与测试集比例为 4:1, 使用 5 折交叉验证评估模型预测性能. 模型采用了 RBF 核函数, 公式如下:

$$k_{\text{RBF}}(x, x') = \sigma_f^2 \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^4 \frac{(x_i - x'_i)^2}{\ell_i^2}\right). \quad (16)$$

σ_f^2 与 ℓ_i^2 的初始值均设为 1. 为了验证所构建代理模型对于最佳操作点的优化能力, 首先针对芳烃收率这一优化目标进行了单目标优化来测试. 由于模型对分离罐部分进行了理想化, 因此芳烃收率通过分离罐液相芳烃组分流/总进料流量计算得到. 经过 30 次贝叶斯优化迭代后的结果如图 3 所示, 后三十个点为通过采集函数选取的评估点, 经过机理模型验证其真实芳烃收率. 可以看到经过十余次迭代就收敛到了对应原料性质下的近似最佳芳烃收率值, 验证了贝叶斯优化与 GP 代理模型对于本研究问题的可行性. 最优方案对应的操作参数如图 4 所示, 与之前的分析一致, 由于烷烃脱氢环化与环烷烃芳构化为强吸热反应, 芳烃收率在整体上随着反应器温度的增加而提高. 而第二反应器的最佳温度略低, 可能的原因是在当前进料流量下, 通过略微降低反应器温度可以在保证芳烃潜含量转化为芳烃的同时, 抑制部分加氢裂化反应, 有利于芳烃生成. 反应温度与芳烃收率之间呈现出了非线性关系. 对于多目标优化, 本实验选择了芳烃收率与重整油流量两个相互冲突的优化目标: 反应器温度的提高有利于芳烃生成, 然而也会加剧裂化反应将烯烃裂解成轻组分, 从而减少了重整油流量. 因此, 使用全部 40 个初始样本点分别建立了两个 GP 代理模型预测芳烃收率与重整油流量, 两者均使用了 RBF 核函数. 由于采集函数选择了 EIHV, 因此需要确立上下界以进行归

一化操作并计算相应 HV 值. 根据历史数据, 芳烃收率的范围设定为 $[0.60, 0.72]$, 重整油流量范围设定为 $[114000, 134000]$, 单位为 kg/h , 并设两者的下确界作为参考点用于 HV 值计算.

表1 各原料组分参数值

原料组分	摩尔分率	原料组分	摩尔分率
5N6	0.051	C6A	0.011
5N7	0.114	C7A	0.023
5N8	0.137	EB	0.05
6N6	0.051	XY	0.06
6N7	0.114	TMB	0.018
6N8	0.137	MEB	0.013
C9N	0.208	PB	0.013

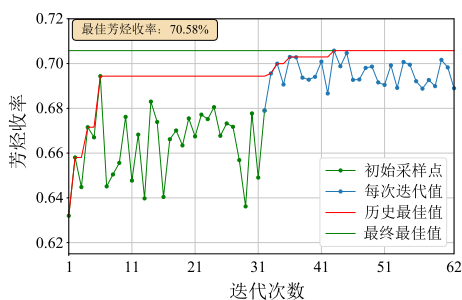


图3 芳烃收率优化收敛曲线

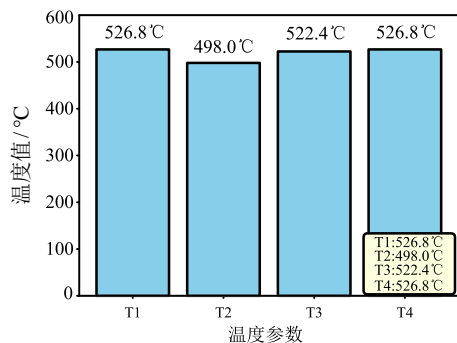


图4 各反应器温度优化结果

整个优化的迭代次数设置为 90 次, 由于操作参数均为反应器温度, 具有相同量纲, 因此距离阈值无需归一化. 对于距离阈值初始值我们设置为 30°C , 以确保初期有足够的探索范围. 当初始值设置大于 40°C 时, 经实验绝大部分所选择机理评估点难以满足距离阈值要求, 最终退化为无距离阈值贝叶斯优化, 而初始阈值设置过小难以有效保证多样性, 最终阈值为 10°C , 经贝叶斯优化后得到了一个近似的 Pareto 前沿.

为验证所提出的迭代距离阈值方法的有效性, 分别在相同初始条件下进行了原始多目标贝叶斯优化与添加距离阈值机制的多目标贝叶斯优化, 并采用了目前运用最广泛的多目标优化方法 NSGA-II 作为对比方法. 为保证公平性, 选用相同的 40 个初

始样本开始优化, 每次优化迭代选择种群内不确定性最高的点进行机理评估并更新代理模型. 所得到的 Pareto 前沿视图见图 5. 图 5(a) 为 40 个初始采样点构成的初始 Pareto 前沿. 图 5(b) 为原始贝叶斯优化经 90 次迭代后的结果, 由于未设距离阈值, 评估点聚集在初始前沿附近, 多样性不足, 导致前沿扩展有限; 迭代后期代理模型不确定性降低, 探索效率下降, 优化效果较差. 图 5(c) 为 NSGA-II 方法的优化结果, 可以发现解集没有明显的集聚效应, 但整个前沿缺乏向右下角拓展的趋势, 依然存在多样性不足问题. 图 5(d) 为引入距离阈值后迭代 30 次的结果, 样本点分布均匀, 前沿向两侧有效扩展, 多样性显著改善. 图 5(e) 为 90 次迭代后的前沿, 进一步纵向扩展, 优化效果良好. 图 5(f) 展示了多次迭代后完善的 Pareto 前沿. 表 2 中 HV 值表明, 所提方法在 30 次迭代时已优于原始方法, 且随迭代次数增加持续提升. NSGA-II 方法虽能够通过交叉变异与拥挤度计算一定程度弥补多样性缺失问题, 然而其作为启发式优化算法对于机理评估计算昂贵的问题并不适配, 在 90 次迭代次数下难以有效搜寻优质 Pareto 解, HV 值表现较差. 所提出方法在 90 次迭代后 HV 增长趋缓, 表明接近收敛.

以上多目标优化实验在确定的原料性质下进行. 然而, 对于具有原料不确定性的情形, 实验采用所提出的优化方法确定最佳操作点用于实际装置运行. 为模拟原料性质的不确定性, 首先选取了 18 年 1 月份到 12 月份某工厂 500 个与先前同一工况下的实际历史 CCR 装置进料数据, 其中包含了相应进料原料的组分构成信息. 所选取原料性质由于在同一种工况下, 波动范围限定在可接受范围内. 因此在对应的反应动力学与催化剂活性下, 其机理模型的性能指标输出与真实工业场景依然具有高度一致性, 结果在文献 [25] 中同样经过验证. 由于原料中各碳原子数下的五元环烷烃与六元环烷烃含量相差极小, 因此为简化计算, 将两者合并后均分. 表 3 中显示了从历史数据中计算得出的各原料组分摩尔分率均值, 与表一中的数值比较接近. 在得到了各原料组分的均值向量与协方差矩阵后, 通过式 (10)~式 (12) 计算当前测定值下原料各组分的不确定性区间, 设超参数 $\lambda_0=5$ 且 $\tau=1$, 当前时刻的原料性质取表 1 内数据, 然后通过式 (13) 在不确定性区间中进行随机采样. 通过采样得到共 20 个原料性质样本点以描述不确定性, 由于组分单位为摩尔分率, 在采样后对每个样本点进行归一化. 本研究通过层级图法 (LD) 对所有 Pareto 解进行评估, 通过式 (14) 计算 Norm 值并转化为 LD 值, 选取 LD 值最大的前 5 个 Pareto 解作为最

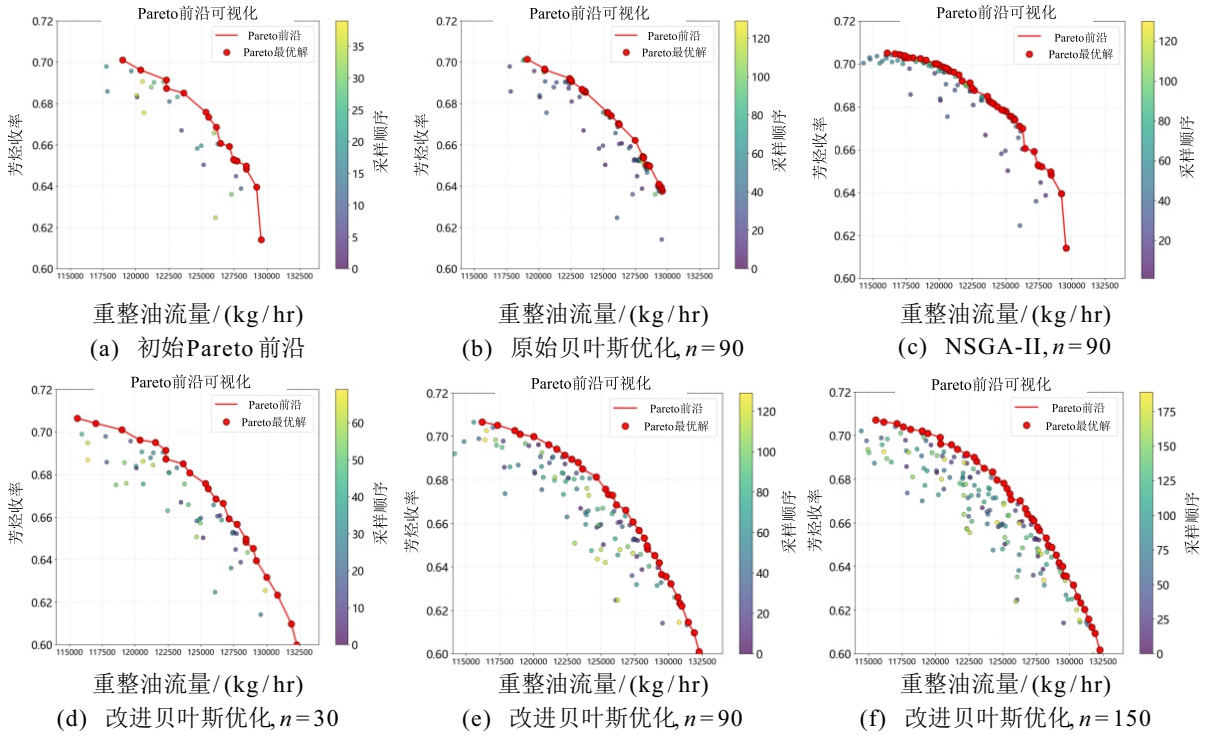


图5 Pareto 前沿可视化

表2 各优化迭代次数下 HV 值

	初始	N=90(无距离阈值)	NSGA-II, N=90
HV值	0.5430	0.5560	0.5628
	N=30	N=90	N=150
HV值	0.5797	0.5882	0.5886

表3 历史各原料组分均值

原料组分	摩尔分率均值	原料组分	摩尔分率均值
C6N	0.1064	EB	0.0502
C7N	0.2283	XY	0.0602
C8N	0.2693	TMB	0.0192
C9N	0.2026	MEB	0.0127
C6A	0.0138	PB	0.0127
C7A	0.0246		

终操作参数候选点.

在上述条件下, LD 值与各优化目标值的关系图如图 6 所示, 可以发现 LD 值与两个优化目标呈现出了抛物线的分布关系, 较高的 LD 值代表了操作参数对两个目标之间较好的平衡性. 在根据 LD 值选择了 5 个最优操作点后, 将它们分别在采样得到的 20 个原料性质点下进行相应机理评估, 从而得到对应性质下的 LD 值. 最终的评估结果如图 7 的箱型图展示, 其中参与计算的 LD 分数均值, 5% 分位值以及当前实验室测定原料性质下的 LD 值都进行了标记以更加直观地观察, 5% 分位值利用核密度估计

(KDE) 拟合分布函数计算. 由图 7 中可知, 候选点 1 在当前原料性质下的 LD 值最大, 然而其在不确定

定性下的 LD 均值与 5% 分位值的表现并非最优秀. 相反, 候选点 5 的 LD 虽在当前测定值下较候选点 1 略低, 但其在不确定性分布下的均值与下分位数都表现地更为优异. 通过式 (15) 对 5 个候选点分别计算最终优化得分, 这里给予三个评价系数相同权重, 结果如表 4 中所示, 候选点 5 得到了最高的评分, 因此其所对应操作参数被选择. 相较于原操作参数候

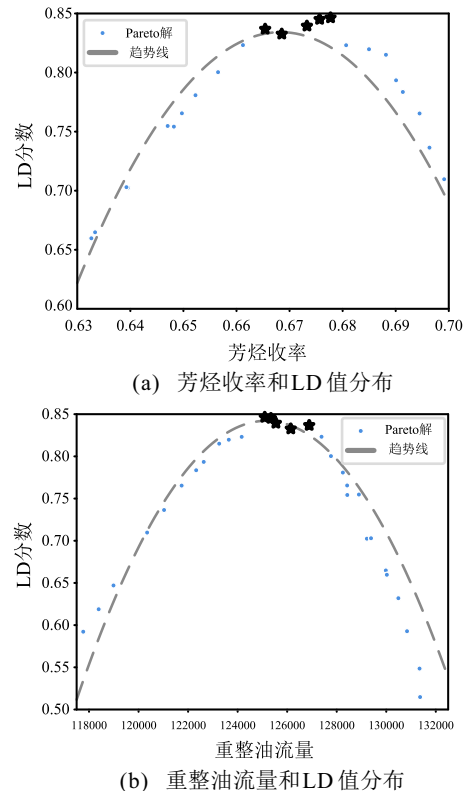


图6 双优化目标对应 LD 值分布

选点 1, 考虑原料不确定性的优化选择了更为全面的候选点 5, 这种差异性体现了所提方法的有效性。

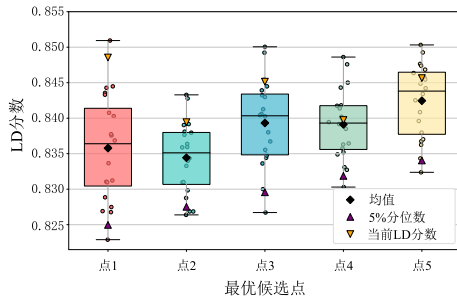


图7 最优候选点 LD 分数分布箱型

表4 最优候选点综合评分

	候选点1	候选点2	候选点3	候选点4	候选点5
综合评分	0.8338	0.8364	0.8380	0.8369	0.8407

最终, 对整个优化方法的时间性能进行评估。由于代理模型的预测与更新在毫秒级, 因此主要考虑机理评估的耗时。每次机理评估平均约耗时 10s, 迭代 90 次加初始 40 个样本约耗时 1300s 得到近似 Pareto 前沿, 并经过 100 次不确定性机理评估, 总共约耗时 2300s 完成整个优化过程迭代。对比 12h 的原料性质测量周期, 方法可以满足实时性要求。

综上, 通过权重的改变, 原料不确定性相关参数根据所期望优化目标偏重进行调整, 从而选择更保守或更激进的优化方案选择。所提优化方法既考虑了操作参数的鲁棒性又注重对当前测定原料性质下的优化性能, 在丰富了选择多样性的同时也能够针对原料不确定性进行操作参数的合理调整与优化。

4 结论

本研究提出了一种基于改进多目标贝叶斯优化的操作优化方法, 该方法以 CCR 装置作为优化对象, 芳烃收率与重整油流量作为双优化目标, 给出了考虑原料不确定性的操作参数。首先, 利用 Aspen Plus 模拟了 27 集总动力学下的连续重整机理模型, 用于对操作参数进行机理评估。其次, 利用拉丁超立方采样在约束空间中采样了初始样本点构建初始 GP 代理模型, 精确实现了给定原料性质下的优化目标预测。聚焦多目标问题, 采用 EIHV 方法作为代理模型迭代更新的采集函数, 并使用汤普森采样方法将采集函数复杂的期望计算简化为采样近似。针对优化得到 Pareto 解集出现的“集聚”效应, 创新性地在优化迭代过程中提出了一种距离阈值机制, 通过限制选择的操作参数在操作变量空间与先前样本点的欧氏距离来保证解集的多样性。最后, 利用历史过程数据与前次实验室测定数据共同确定了当前的原料性质不确定性区间。所提出方法通过 CCR 机理模型

进行仿真与评估, 结果表明, 对于多目标优化问题, 所提出改进贝叶斯优化显著拓宽了 Pareto 前沿的范围, 提升了优化效果, 并能够适应具有原料不确定性的情形, 为 CCR 装置操作优化提供了相应的理论指导。

参考文献 (References)

- [1] Atarianshandiz M, McAuley K B, Shahsavand A. Modeling and parameter tuning for continuous catalytic reforming of naphtha in an industrial reactor system[J]. *Processes*, 2023, 11(10): 2838.
- [2] 韩永明, 李帅, 耿志强, 等. 基于双通道 CNN-LSTM-Attention 预测模型的晋华炉煤气化过程操作优化[J]. *控制与决策*, 2026, 41(4): 1110-1121. (Han Y M, Li S, Geng Z Q, et al. Multi-objective optimization of coal gasification process in Jinhua furnace based on two-channel CNN-LSTM-Attention prediction model[J]. *Control and Decision*, 2026, 41(4): 1110-1121.)
- [3] Taghavi B, Fatemi S. Modeling and application of response surface methodology in optimization of a commercial continuous catalytic reforming process[J]. *Chemical Engineering Communications*, 2014, 201(2): 171-190.
- [4] Hou W F, Su H Y, Hu Y Y, et al. Modeling, simulation and optimization of a whole industrial catalytic naphtha reforming process on aspen plus platform[J]. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 2006, 14(5): 584-591.
- [5] Dong X J, He Y J, Shen J N, et al. Multi-zone parallel-series plug flow reactor model with catalyst deactivation effect for continuous catalytic reforming process[J]. *Chemical Engineering Science*, 2018, 175: 306-319.
- [6] Jiang H B, Li Z M, Sun Y, et al. Optimization of the countercurrent continuous reforming process based on equation-oriented modeling and the SQP algorithm[J]. *ACS Omega*, 2022, 7(2): 1757-1771.
- [7] Sa'idi M, Mostoufi N, Sotudeh-Gharebagh R. Application of bee colony algorithm for optimization of CCR reforming process[J]. *Computer Aided Chemical Engineering*, 2012, 31: 620-624.
- [8] Babaqi B S, Takriff M S, Othman N T A, et al. Yield and energy optimization of the continuous catalytic regeneration reforming process based particle swarm optimization[J]. *Energy*, 2020, 206: 118098.
- [9] 刘禹含, 曹萃文. 基于 LightGBM 的催化重整装置产品预测及操作优化相关性分析[J]. *石油学报: 石油加工*, 2020, 36(4): 756-766. (Liu Y H, Cao C W. Product prediction technology and optimal operation correlation analysis for catalytic reforming unit based on LightGBM[J]. *Acta Petrolei Sinica: Petroleum Processing Section*, 2020, 36(4): 756-766.)
- [10] Jiang M, Wang Z Z, Qiu L M, et al. A fast dynamic evolutionary multiobjective algorithm via manifold transfer learning[J]. *IEEE Transactions on Cybernetics*, 2021, 51(7): 3417-3428.
- [11] Han F, Chen W T, Ling Q H, et al. Multi-objective particle swarm optimization with adaptive strategies for

- feature selection[J]. *Swarm and Evolutionary Computation*, 2021, 62: 100847.
- [12] 曾骏驰, 张欣, 钱鹏江, 等. 基于灰色关联与自适应参考向量的高维多目标进化算法[J]. *控制与决策*, 2026, 41(1): 153-164.
(Zeng J C, Zhang X, Qian P J, et al. Grey relation-based evolutionary algorithm with self-adaptive reference vectors for many-objective optimization[J]. *Control and Decision*, 2026, 41(1): 153-164.)
- [13] Hou W F, Su H Y, Mu S J, et al. Multiobjective optimization of the industrial naphtha catalytic reforming process[J]. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 2007, 15(1): 75-80.
- [14] 李鸿亮, 陆金桂, 侯卫锋, 等. 基于混合遗传算法的催化重整过程多目标优化[J]. *化工学报*, 2010, 61(2): 432-438.
(Li H L, Lu J G, Hou W F, et al. Multi-objective optimization based on hybrid genetic algorithm for naphtha catalytic reforming process[J]. *CIESC Journal*, 61(2): 432-438.)
- [15] Wei M, Yang M L, Qian F, et al. Integrated dual-production mode modeling and multiobjective optimization of an industrial continuous catalytic naphtha reforming process[J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2016, 55(19): 5714-5725.
- [16] Zainullin R Z, Zagoruiko A N, Koledina K F, et al. Multi-criterion optimization of a catalytic reforming reactor unit using a genetic algorithm[J]. *Catalysis in Industry*, 2020, 12(2): 133-140.
- [17] Nguyen V H, Le T T, Nguyen A T, et al. Optimization of milling conditions for AISI 4140 steel using an integrated machine learning-multi objective optimization-multi criteria decision making framework[J]. *Measurement*, 2025, 242: 115837.
- [18] 赵嘉, 吕丰, 肖人彬, 等. 自适应分组和拥挤距离更新的多目标狼群算法[J]. *控制与决策*, 2024, 39(11): 3772-3780.
(Zhao J, Lv F, Xiao R B, et al. Multi-objective wolf pack algorithm based on adaptive grouping strategy and crowding distance[J]. *Control and Decision*, 2024, 39(11): 3772-3780.)
- [19] Wang Z Y, Li J, Rangaiah G P, et al. Machine learning aided multi-objective optimization and multi-criteria decision making: Framework and two applications in chemical engineering[J]. *Computers & Chemical Engineering*, 2022, 165: 107945.
- [20] 周平, 张天娇. 基于隐性记忆的非平稳时变污水处理过程多目标运行优化[J]. *控制与决策*, 2023, 38(8): 2389-2400.
(Zhou P, Zhang T J. Implicit memory based multi-objective operation optimization of wastewater treatment process under nonstationary time-varying conditions[J]. *Control and Decision*, 2022, 38(8): 2389-2400.)
- [21] Dong X J, Shen J N, Ma Z F, et al. Robust optimal operation of continuous catalytic reforming process under feedstock uncertainty[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2022, 47(84): 35641-35654.
- [22] Baghban A, Castro P M, Oliveira F. Data-driven robust optimization for pipeline scheduling under flow rate uncertainty[J]. *Computers & Chemical Engineering*, 2025, 193: 108924.
- [23] Iranshahi D, Jafari M, Rafiei R, et al. Optimal design of a radial-flow membrane reactor as a novel configuration for continuous catalytic regenerative naphtha reforming process considering a detailed kinetic model[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2013, 38(20): 8384-8399.
- [24] Smith R. Kinetic analysis of naphtha reforming with platinum catalyst[J]. *Chemical Engineering Progress*, 1959, 55(6): 76-80.
- [25] 周红军, 石铭亮, 翁惠新, 等. 芳烃型催化重整集总反应动力学模型[J]. *石油学报: 石油加工*, 2009, 25(4): 545-550.
(Zhou H J, Shi M L, Weng H X, et al. Lumped kinetic model of aromatic type catalytic naphtha reforming[J]. *Acta Petrolei Sinica: Petroleum Processing Section*, 2009, 25(4): 545-550.)
- [26] 林成龙, 马义中, 肖甜丽, 等. 数据驱动的贝叶斯 SVR 自适应建模及昂贵约束多目标代理优化[J]. *控制与决策*, 2023, 38(10): 2977-2986.
(Lin C L, Ma Y Z, Xiao T L, et al. Data-driven Bayesian SVR adaptive modeling and expensive constrained multi-objective surrogate optimization[J]. *Control and Decision*, 2023, 38(10): 2977-2986.)
- [27] 郭恭涵, 丁晖殿, 李强, 等. 间歇精馏操作过程的动态贝叶斯优化方法[J]. *化工学报*, 2025, 76(2): 755-768.
(Guo G H, Ding H D, Li Q, et al. Dynamic Bayesian optimization method for batch distillation operation process[J]. *CIESC Journal*, 2025, 76(2): 755-768.)
- [28] Zhang F, Cheng L, Wu M Y, et al. Performance analysis of two-stage thermoelectric generator model based on Latin hypercube sampling[J]. *Energy Conversion and Management*, 2020, 221: 113159.
- [29] Pandita P, Ghosh S, Wang L P. Computationally efficient Bayesian optimization for multi-objective industrial applications[C]. *AIAA Scitech Forum. Virtual*, 2021: 2021-1482.
- [30] Blasco X, Herrero J M, Sanchis J, et al. A new graphical visualization of n -dimensional Pareto front for decision-making in multiobjective optimization[J]. *Information Sciences*, 2008, 178(20): 3908-3924.

作者简介

陈嘉贇 (2000–), 男, 硕士生, 主要研究方向为数据驱动炼化装置过程监控与操作优化, E-mail: 1525719296@qq.com;

彭鑫 (1987–), 男, 教授, 博士, 主要研究方向为工业过程智能建模、控制与优化, E-mail: xinpeng@ecust.edu.cn;

李智 (1989–), 男, 副教授, 博士, 主要研究方向为复杂炼化过程建模、性能评估与优化, E-mail: zhili@ecust.edu.cn.