



УДК 681.5.015

© 2017 г. **В.В. Климченко**¹, канд. техн. наук,
А.Ю. Торгашов¹, д-р техн. наук,
С.А. Самотылова^{1,2}

¹Институт автоматизации и процессов управления ДВО РАН,
²Дальневосточный федеральный университет, Владивосток)

МОДЕЛЬ С ОБРАТНОЙ СВЯЗЬЮ ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ КАЧЕСТВА ПРОДУКТА СОВМЕЩЕННОГО МАССООБМЕННОГО ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА*

Рассматривается задача построения модели, прогнозирующей показатель качества выходного продукта совмещенного массообменного технологического процесса, с использованием контура обратной связи по ошибке прогноза выходной переменной. Показано, что предлагаемый подход повышает точность идентификации технологического объекта.

Ключевые слова: прогнозирующая модель, обратная связь, показатель качества, совмещенный массообменный технологический процесс, идентификация.

DOI: 10.22250/isu.2017.54.55-61

Введение

Эффективность производства может быть повышена за счет оптимизации технологических режимов, без изменения основных этапов функционирования процесса с минимизацией потребления энергии, осуществлением мониторинга и контроля технологических параметров [1]. В большинстве случаев управление технологическими процессами и контроль качества производимых продуктов осуществляются на основе результатов заводских лабораторий. Данный способ является дорогостоящим и занимает длительный период времени, что приводит к временным затратам и к нарушению мониторинга процесса управления.

В настоящее время широкое распространение для повышения экономической эффективности предприятия получили модели, прогнозирующие показатели

* Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 17-07-00235 А).

качества выходных продуктов в режиме реального времени [1 – 3]. Они описывают технологический процесс посредством связи измеряемых технологических параметров (температура, давление, расход) с результатами лабораторных анализов выходной переменной и могут быть интегрированы в систему усовершенствованного управления технологическим процессом (СУУ ТП) в виде специализированного программного обеспечения.

Оптимальное управляющее воздействие формируется на основании заданных критериев в СУУ ТП с помощью прогнозирующей модели [4]. Такой тип управления и прогнозирования снижает затраты на техническое обслуживание и время отбора проб [5].

Для построения прогнозирующих моделей используются различные методы математической статистики, среди которых такие, как проекции на латентные структуры. Наиболее известным способом построения моделей, прогнозирующих показатели качества выходных продуктов, является подход на основе искусственных нейронных сетей [6]. Такой подход позволяет учитывать нелинейность исследуемого процесса. Модель строится на основе результатов измерений значений входных и выходных переменных.

В данной статье предлагается использовать контур обратной связи по ошибке прогноза выходной переменной в прогнозирующей модели совмещенного массообменного технологического процесса. Показано, что, несмотря на отсутствие обратных связей в реальном управляемом объекте, предлагаемый подход существенно повышает точность прогнозирования совмещенного массообменного технологического процесса.

Описание технологического процесса

Особенность совмещенного массообменного технологического процесса заключается в совместном протекании обратимой химической реакции с частичным или практически полным разделением образующейся смеси посредством ее ректификации. Метил-трет-бутиловый эфир (МТБЭ) получил широкое применение в производстве высокооктановых бензинов, при этом является нетоксичным компонентом. Для его получения используются метанол и изобутилен, находящийся в бутан-бутиленовой фракции (ББФ).

Схема технологической установки синтеза МТБЭ представлена на рис. 1. Сырьевые потоки ББФ и метанола подаются на установку синтеза МТБЭ. Частичная реакция синтеза МТБЭ происходит в прямоточном реакторе форконтакта (РФ) и в реакционно-ректификационном аппарате, представляющим собой две ректификационные колонны (К-1 и К-2) и расположенный между ними реактор синтеза (РС). Реакционная смесь из реактора РС выводится двумя потоками: сверху реактора отбирается газовая фаза; снизу реактора отбирается жидкая фаза,

каждая из которых идет на дальнейшее разделение. Критерием качества синтеза МТБЭ является содержание метил-втор-бутилового эфира (МВБЭ). Для построения модели, предсказывающей содержание МВБЭ в выходном продукте, в качестве регрессоров использовали измеряемые технологические параметры: $u^{(1)}$ – расход ББФ в РФ (F_1); $u^{(2)}$ – расход орошения К-1 (F_2); $u^{(3)}$ – расход реакционной массы, поступающей в К-2 (F_3); $u^{(4)}$ – давление в среднем слое катализатора РС (Р); $u^{(5)}$ – температура в среднем слое катализатора РС (T_1); $u^{(6)}$ – температура в среднем слое катализатора РС (T_2); $u^{(7)}$ – температура в нижнем слое катализатора РС (T_3); $u^{(8)}$ – температура верха К-2 (T_4).

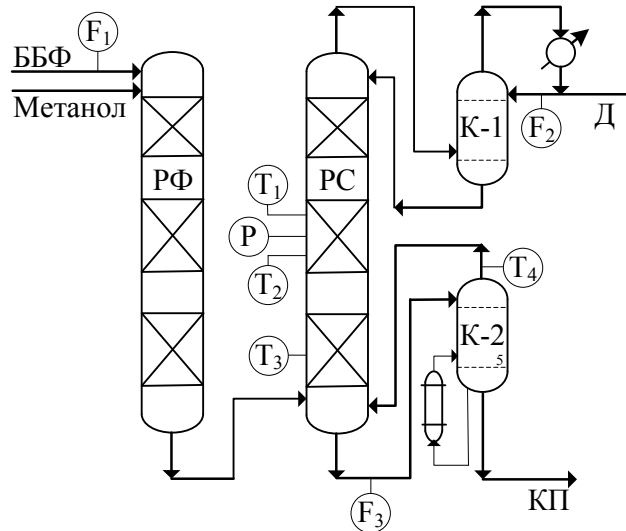


Рис. 1. Технологическая схема синтеза МВБЭ.

Для нашей задачи коэффициенты параметров модели определяли с помощью однородной модели нейронной сети с последовательными связями и сигмовидными функциями активации:

$$\varphi(w, b, u) = \frac{1}{1 + e^{-(wu+b)}}, \quad (1)$$

где $w, b = const$ – параметры функции активации с конечным числом нейронов в каждом слое, формирующей для входного вектора u соответствующий ему вектор выхода y .

Исходя из принципа постепенного усложнения модели была построена двухслойная сеть с функциями активации (1), числом входов $u^{(1-8)}$ с глубиной модели по каждому входу $h=30$. Число выходного нейрона (выхода) равно количеству анализируемых компонента МВБЭ в МТБЭ с длиной $n = 1091$. Структура сформированной нейросетевой модели представлена на рис. 2.

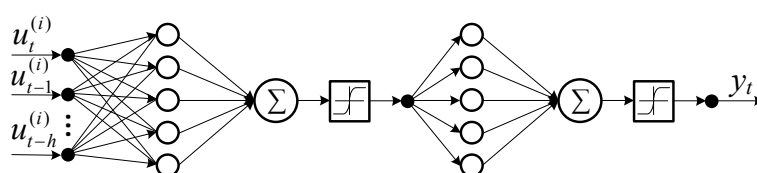


Рис. 2. Структура нейросетевой модели прогнозирования.

Критериями качества обучения сети были приняты коэффициент детерминации (R^2) и среднеквадратическая ошибка (CKO). Названные критерии рассчитывали по формулам:

коэффициент детерминации

$$R = 1 - \sum_i (y_i - \hat{y}_i)^2 / \sum_i (y_i - \bar{y})^2; \quad (2)$$

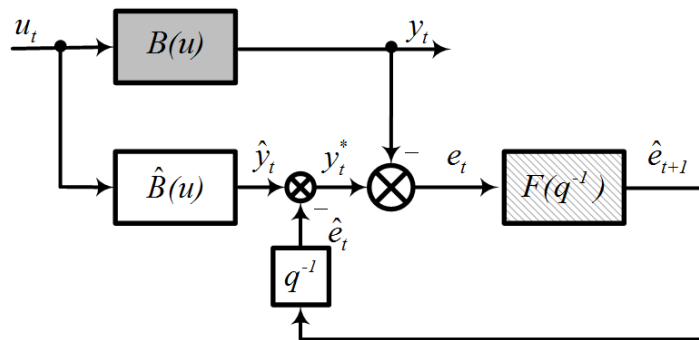
среднеквадратическая ошибка

$$CKO = \left(\sum_i^M (y_i - \hat{y}_i)^2 / M \right)^{1/2}, \quad (3)$$

где y_i – наблюдаемое значение выходной переменной; \hat{y}_i – ее значение, полученное по модели объекта; \bar{y} – среднее значение наблюдаемой выходной переменной; M – число наблюдений. Чем ближе к единице значение R^2 и чем ближе к нулю значение CKO , тем в большей мере построенная модель соответствует исследуемому объекту.

Идентификация прогнозирующего фильтра в контуре обратной связи

Для повышения точности прогнозов (уменьшения CKO погрешностей e_i , определяемых как разность $e_i = y_i - \hat{y}_i$, $i = 1, 2, \dots, M$) в модель был включен контур обратной связи (рис. 3).



■ – Технологический объект ▨ – Прогнозирующий фильтр

Рис. 3. Прогнозирующая модель с обратной связью:

B – оператор реального объекта; \hat{B} – оператор нейросетевой модели;

y_t^* – скорректированный выход модели; q^{-1} – оператор сдвига на один шаг назад;

$F(q^{-1})$ – передаточная функция фильтра; \hat{e}_t – прогноз ошибки e_t .

На первый взгляд такой подход представляется необоснованным, поскольку зависимость между входными и выходными переменными технологического объекта носит причинно-следственный характер и моделируемая установка не содержит обратных связей. Однако включение контура обратной связи в модель зачастую позволяет повысить точность прогнозирования (уменьшить среднеквадратическую ошибку прогноза). Исключение составляет лишь случай отсутствия се-

риальной корреляции в последовательности ошибок прогноза, получаемого при помощи нейросетевой модели. Иными словами, обратная связь не оказывает влияния на точность прогноза, если без нее модель генерирует ошибки e_1, e_2, \dots , последовательность которых является белым шумом. В противном случае можно идентифицировать фильтр $F(q^{-1})$, выход которого в каждый момент времени t является прогнозом будущей ошибки \hat{e}_{t+1} и $M(e_{t+1} - \hat{e}_{t+1})^2 < Me_{t+1}^2$ [7]. При этом желательно предварительно преобразовать прогнозируемую случайную величину к гауссовской, поскольку большинство статистических процедур обеспечивают оптимальные результаты именно для нормально распределенных величин.

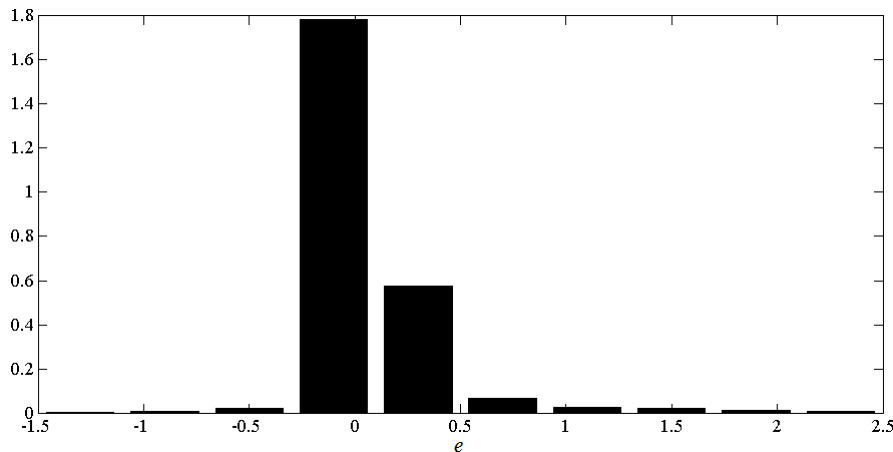


Рис. 4. Гистограмма остатков обучающей выборки e_t .

Гистограмма ошибок нейросетевой модели (рис. 4) наводит на мысль, что распределение случайной величины $v = e + 1,5$ можно аппроксимировать плотностью гамма-распределения, параметры которого были оценены в среде Matlab:

$$f_v(v) \approx \frac{1}{0,0397^{39,54} \Gamma(39,54)} v^{38,54} \exp(-v/0,0397),$$

где Γ – гамма-функция Эйлера. Интегральную функцию распределения величины v обозначим $F_v(v)$. Если теперь обозначить интегральную функцию распределения стандартизованной нормальной величины как $F_N(\cdot)$, а через F_N^{-1} – функцию, ей обратную, то величину $z_t = g(e_t) = F_N^{-1}(F_v(e_t + 1,5))$ можно приближенно считать распределенной по нормальному закону, с нулевым средним и единичной дисперсией.

Для временного ряда z_t в среде Matlab была построена модель авторегрессии первого порядка:

$$z_t - 0,7746z_{t-1} = \varepsilon_t,$$

где ε_t – гауссовский белый шум с нулевым средним и дисперсией $\sigma_\varepsilon^2 = 0,4$.

Таким образом, прогноз \hat{z}_{t+1} можно представить в виде [7]:

$$\hat{z}_{t+1} = 0,7746z_t. \tag{4}$$

Условное распределение величины z_{t+1} при известных z_t, z_{t-1}, z_{t-2} является нормальным распределением с математическим ожиданием \hat{z}_{t+1} и дисперсией σ_ε^2 [7]. Поэтому, принимая за прогноз невязки e_{t+1} условное математическое ожидание этой величины, найдем:

$$\hat{e}_{t+1} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_\varepsilon}} \int_{-\infty}^{\infty} g^{-1}(z) \exp\left\{-\frac{(z - \hat{z}_t)^2}{2\sigma_\varepsilon^2}\right\} dz, \text{ где } g^{-1}(z) = F_V^{-1}(F_N(z)) + 1,5.$$

Эффективность модели прогнозирующего фильтра, найденной в результате анализа данных обучающей выборки, оценивалась на данных тестовой выборки. Результаты прогнозов иллюстрируются на рис. 5.

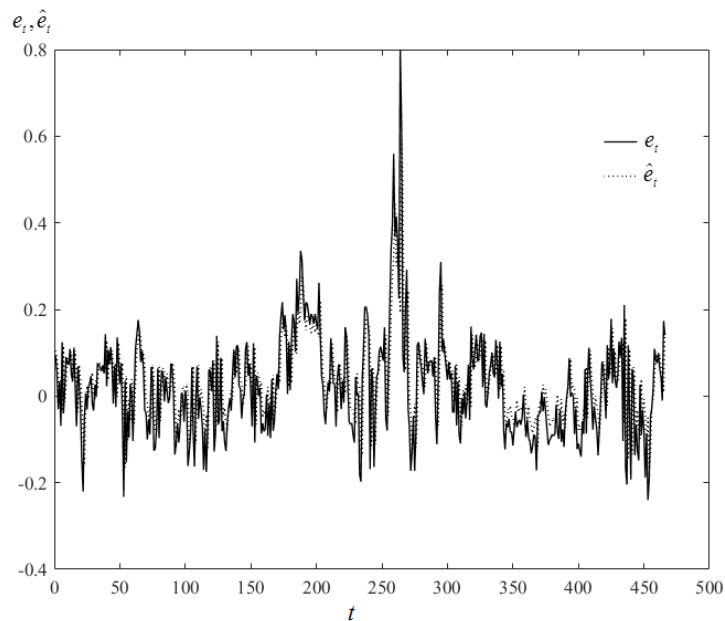


Рис. 5. Прогнозирование ошибок модели без обратной связи:

сплошной линией изображены ошибки e_t , пунктирной – их прогнозные значения \hat{e}_t .

Каждому моменту времени t (ось абсцисс) соответствует ошибка модели без обратной связи e_t и ее прогноз \hat{e}_t , полученный в момент $(t - 1)$.

Результаты расчета критериев идентификации модели с отсутствием обратной связи и ее включением в модель на обучающей и проверочной выборках приведены в табл. 1.

Таблица 1

Наименование	Сравнительный анализ критериев			
	$R^2_{обучение}$	$R^2_{проверка}$	$CKO_{обучение}$	$CKO_{проверка}$
Без обратной связи	0,4732	0,5783	0,2875	0,1211
С обратной связью	0,8359	0,7535	0,1605	0,0927

Оценка CKO модели с обратной связью, вычисленная по тестовой выборке данных, оказалась на $(0,1211 - 0,0927)/0,1211 = 0,2345 \approx 23\%$ меньше, чем CKO модели без обратной связи.

Заключение

Внедрение контура обратной связи в модель технологического процесса позволило уменьшить среднеквадратическую ошибку прогноза, несмотря на то, что реальная моделируемая установка не содержит обратных связей. Сравнение предсказанных значений с фактическими (рис. 5) показывает, что построенная модель прогнозирующего фильтра (4) дает неплохие прогнозы на “спокойных” (с небольшим и приблизительно постоянным разбросом) временных интервалах. Что же касается интервалов с “аномальными” значениями (Outliers), прогнозирующий фильтр, хоть и успешно предсказывает направление выбросов, допускает большую ошибку в предсказании их величины. По-видимому, свойства процесса e_t лучше описывались бы моделью с дополнительной составляющей в виде какого-либо (например, пуассоновского) потока событий (выбросов), но для оценки интенсивности потока выборка данных должна содержать хотя бы несколько десятков выбросов. Иными словами, судя по рис. 5, для рассматриваемого технологического объекта объем доступной для анализа выборки данных должен достигать не менее двух тысяч измерений.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Olanrewaju M.J., Huang B., Afacan A.* Online composition estimation and experiment validation of distillation processes with switching dynamics // *Chemical engineering science.* – 2010. – Vol. 65, Issue 5. – P.1597-1608.
2. *Власов С.С., Шумихин А.Г.* Моделирование процесса отбензинивания нефти при прогнозировании показателей качества бензина // *Вестник СГТУ.* – 2012. – № 1(63), вып. 1. – С.90-94.
3. *Chatterjee T., Saraf D.N.* On-line estimation of product properties for crude distillation units // *Journal of Process Control.* – 2004. – Vol. 14. – P.61-77.
4. *Торгашов А.Ю., Гончаров А.А., Самотылова С.А.* Современные методы построения систем усовершенствованного управления технологическими процессами // *Вестник Дальневосточного отделения РАН.* – 2016. – № 4(188). – С.102-107.
5. An industrial application of virtual analyzer for distillation columns / *V. Conz, J. Trierweiller, O. Santos, S. Facchin* // *2nd Mercosur Congress on Chemical Engineering.* – 2005. – P.1-10.
6. *Tun M.S., Lakshminarayanan S., Emoto G.* Data Selection and Regression Method and Its Application to Softsensing Using Multirate Industrial Data // *Journal of Chemical Engineering of Japan.* – 2008. – Vol. 41, No. 5. – P.374-383.
7. *Box G.E.P., Jenkins G.M., Reinsel G.C.* Time series analysis: forecasting and control. 3-rd ed. Englewood Cliffs. – N.J.: Prentice Hall, 1994.

Статья представлена к публикации членом редколлегии О.В. Абрамовым.

E-mail:

Владимир Владимирович Климченко – volk@iacp.dvo.ru;

Андрей Юрьевич Торгашов – torgashov@iacp.dvo.ru;

Светлана Александровна Самотылова – samotylova.sa@gmail.com.