

3. *Rong L. Two New Uncertainty Programming Models of Inventory with Uncertain Costs // Journal of Information & Computational Science, Vol. 8, №. 2, 2011, pp. 280-288.*
4. *Bhattacharyya R., Chatterjee A., Kar S. Uncertainty Theory Based Novel Multi-Objective Optimization Technique Using Embedding Theorem with Application to R & D Project Portfolio Selection // Applied Mathematics, Vol.1, 2010, pp. 189-199.*
5. *Zhou J., Li Z., Wang K. A Multi-Objective Model for Fire Station Location under Uncertainty, Advances in Information Sciences and Service Sciences, Vol.5, №.7, pp. 1184-1191, 2013.*
6. *Ding S. A New Uncertain Programming Model for Grain Supply Chain Design // An International Interdisciplinary Journal, Vol. 16, № 2(A). 2013. pp. 1069-1076.*
7. *Вересников Г.С., Огородников О.В., Панкова Л.А., Пронина В.А. Решение задач предварительного проектирования в условиях параметрической неопределенности // Проблемы управления. 2017. № 4. с. 65-73.*
8. *Veresnikov G.S., Pronina V.A., Pankova L.A., Trakhtengerts E.A. Optimal robust design with uncertain parameters // Proceedings of the 11th IEEE International Conference on Application of Information and Communication Technologies (AICT2017, Moscow). М.: IEEE (Catalog Number: CFP1756H-PRT), Vol. 1, 2017, pp. 152-155.*
9. *Ногин В.Д. Сужение множества Парето: аксиоматический подход. М.: Физматлит. 2015. 236 с.*
10. *Мальшев В.В., Кибзун А.И. Анализ и синтез высокоточного управления летательными аппаратами // М.: Машиностроение. 1987. 302 с.*
11. *Иродов Р.Д., Башкиров И.Г., Колоколова Л.Г. Летно-технические характеристики сверхзвуковых самолетов. В книге: Аэродинамика, устойчивость и управляемость сверхзвуковых самолетов. Под ред. Г.С. Бюшгенса. М.: Российская академия наук ("Наука" РАН). 2016. с. 579-620.*

*Вересников Георгий Сергеевич — канд. техн. наук, старший научный сотрудник,
Панкова Людмила Александровна — канд. техн. наук, старший научный сотрудник,
Пронина Валерия Александровна — канд. техн. наук, старший научный сотрудник
Института проблем управления им. В.А. Трапезникова РАН,*

*Башкиров Игорь Геннадиевич — д-р техн. наук, начальник отдела Центрального аэрогидродинамического института им. проф. Н. Е. Жуковского (ЦАГИ).
Контактный телефон (495) 334-92-49.
E-mail: veresnikov@mail.ru aerobig@mail.ru*

РАЗРАБОТКА ВИРТУАЛЬНОГО АНАЛИЗАТОРА ДЛЯ ПРОИЗВОДСТВА МЕТИЛ-ТРЕТ-БУТИЛОВОГО ЭФИРА В УСЛОВИЯХ ОГРАНИЧЕННОГО ОБЪЕМА ОБУЧАЮЩЕЙ ВЫБОРКИ

С.А. Сомытылова, А.Ю. Торгашов (ИАПУ ДВО РАН)

Рассматривается задача построения модели виртуального анализатора (ВА) для производства метил-трет-бутилового эфира в условиях ограниченного объема обучающей выборки — малой по своему размеру либо выборки, не содержащей данные технологического режима во всем диапазоне изменения качества продукта, что обуславливается нестационарностью объекта управления, высокой сложностью и стоимостью получения дополнительной информации. Для построения модели ВА, обеспечивающей более высокую точность оценки показателя качества выходного продукта, предлагается алгоритм доформирования исходной обучающей выборки с использованием аналитической модели ректификационной колонны процесса производства метил-трет-бутилового эфира в условиях точно неизвестного значения эффективности массопереноса по Мерффи. ВА, разработанный на основе предлагаемого алгоритма, позволяет повысить точность оценки показателя качества выходного продукта до 40 %¹.

Ключевые слова: предсказательное моделирование, виртуальный анализатор, ректификационная колонна, доформированная обучающая выборка.

Введение

Одной из основных проблем, стоящих перед нефтеперерабатывающей и нефтехимической промышленностью, является повышение качества основных видов нефтепродуктов и экономической эффективности их производства. Достижение данных целей возможно не только путем модернизации самих нефтеперерабатывающих установок, но и автоматизированных систем управления технологическими процессами (АСУ ТП). Результаты анализов, получаемые средствами заводских лабораторий, как правило, не обладают необходимой полнотой и оперативностью, так как измерения проводят 1...2 раза в сутки, что вынуждает технологов поддерживать режимы, обеспечивающие боль-

шой запас по качеству продуктов, тем самым повышая расход сырья и энергии. Применение поточных анализаторов существенно повышает оперативность контроля состояния материальных потоков, однако они имеют высокую стоимость и требуют постоянной калибровки.

Решение указанной проблемы возможно при использовании моделей виртуальных анализаторов (ВА), которые позволяют оперативно отслеживать изменение качества продуктовых потоков. Внедрение ВА обеспечивает оперативное управление качеством выходных продуктов с минимальными энергозатратами и потерями. ВА могут быть интегрированы в состав систем усовершенствованного управления технологическими процессами (СУУ ТП).

¹ Работа осуществлялась при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 17-07-00235 А).

Большое влияние на развитие СУУ ТП в промышленности оказали научные коллективы ИПУ РАН [1]. Лаборатория под руководством Н. С. Райбмана в 60-е годы XX века одной из первых в мире занималась вопросами идентификации — построением математических моделей реальных объектов, процессов, систем по экспериментальным данным. Основные теоретические достижения лаборатории: обоснование и развитие дисперсионных методов идентификации нелинейных объектов; разработка теории адаптивной идентификации нестационарных систем; постановка и обоснование минимаксного (игрового) подхода к идентификации; синтез методов и алгоритмов идентификации и управления в единой системе (адаптивной замкнутой системе управления с идентификатором). В наши дни применение идентификационного подхода для построения ВА предложено Н. Н. Бахтадзе [2]. Для разработки ВА используются различные методы, такие как робастная регрессия, проекции на латентные структуры, нейронные сети. Одним из условий обеспечения качественной работы используемого метода разработки модели ВА является наличие представительной обучающей выборки, содержащей данные технологического режима на всем диапазоне изменения качества продукта. В практических же случаях обучающая выборка либо мала по своему размеру, либо не содержит данные технологического режима в области верхней границы диапазона качества продуктов (приближения параметров объекта управления к границам, обозначенным технологическим регламентом) (рис. 1). Разработаны различные методы восстановления пропусков в обучающем наборе данных, среди них замена пропуска общим средним, замена пропуска средним из ближайших, метод сплайн-интерполяции, Zet алгоритм. Однако единая методология обработки подобных данных отсутствует, несмотря на ее необходимость [3]. На практике эти методы представляют малую ценность, так как для их применения необходимо, чтобы число пропусков было небольшим. При полном отсутствии данных технологического режима для некоторых стационарных состояний описанные выше методы не применимы. Использование малоинформативного обучающего сегмента данных приводит к неэффективности самих алгоритмов построения моделей ТП, так как малые обучающие выборки не обладают достаточной информацией для получения модели ВА обеспечивающей приемлемую оценку показателей качества выходного продукта. Для решения проблемы построения ВА в условиях малого объема выборки широкое распространение получил бутстреп анализ [4], а также различные методы, основанные на нейронных сетях (НС), и их различные модификации и комбинации, такие как НС с радиально-базисными функциями и глубокие сверточные НС с бутстрепом [5]. Применение бутстреп анализа снижает риск переобучения модели за счет замены обучающей выборки бутстреп-выборками. В [6] пред-

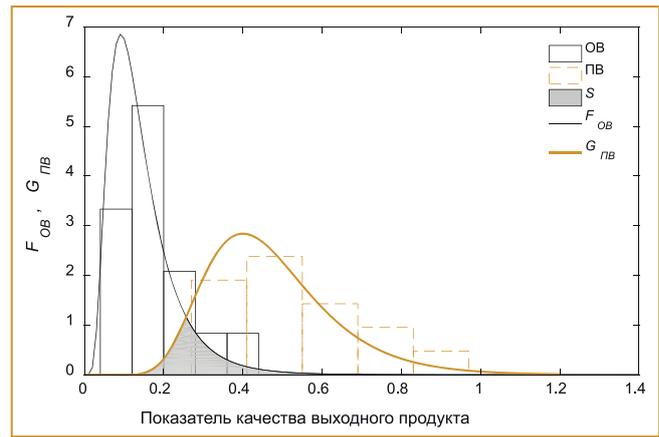


Рис. 1. Гистограммы распределения выходной переменной (показателя качества продукта), где OB – обучающая выборка, PB – проверочная выборка, S – область пересечения выборок

ложен подход, основанный на использовании бутстреп анализа обучающей выборки путем добавления малого значения аддитивного шума к начальным наборам данных и агрегации модели. В [7] рассмотрен подход к работе с малым исходным набором данных на основе генерации виртуальной выборки. Этот метод заполняет разрывы между значениями данных выборки за счет добавления новых сгенерированных виртуальных наблюдений. Применение вышеуказанных методов эффективно, если обучающая выборка содержит данные технологического процесса на всем диапазоне изменения качества выходного продукта. Отметим, что в основном при построении ВА используется модель «черного» ящика [8]. Основным недостатком такого подхода заключается в отсутствии использования доступных априорных знаний о технологическом процессе.

В статье для решения проблемы малого объема обучающей выборки (OB) данных и повышения точности модели ВА предлагается использовать аналитическую модель технологического объекта. На основе откалиброванной аналитической модели формируется набор данных по результатам вычислительного эксперимента для доформирования исходной OB . Доформированная обучающая выборка ($ДОВ$) содержит данные технологических режимов объекта во всем диапазоне изменения качества продукта согласно технологическому регламенту промышленного массообменного технологического процесса (МТП), поэтому качество виртуального анализатора будет заведомо лучше вне зависимости от метода его получения. Построенные модели с использованием аналитической модели процесса и статистических методов могут быть близки, в сущности, к моделям на основе «серого» ящика.

Описание технологического объекта и постановка задачи

Рассматривается задача построения ВА для оценки содержания метанола ($MeOH$) в выходном (ниж-

нем) продукте производства метил-трет-бутилового эфира (МТБЭ) в случае, когда ОВ мала по своему размеру и в нее не входят данные технологического режима в области верхней границы диапазона изменения качества продуктов. Технологическая схема процесса представлена на рис. 2. В качестве сырья в колонну подаются две реакционные смеси, полученные в реакторе синтеза (РС_{синтеза}) и в реакторе форконтakta (РС_{форк-та}). Газовый поток бутан-бутиленовой фракции (ББФ) отводится с верха колонны, а поток жидкости МТБЭ с низа колонны.

Основным показателем качества данного процесса является содержание MeOH в МТБЭ. Массовая доля метанола не должна превышать 1,5% в товарном продукте МТБЭ.

Структура аналитической модели объекта довольно сложна для практического применения. В общем виде ее можно представить в виде системы уравнений на каждой j -ой ступени разделения для каждого i -го компонента включающей уравнения материального баланса, уравнения энергетического баланса и уравнения фазового равновесия:

$$\begin{cases} L_{j+1}\tilde{x}_{j+1,i} + V_{j-1}\tilde{y}_{j-1,i} + F_j z_f - L_j \tilde{x}_{j,i} - V_j \tilde{y}_{j,i} = 0 \\ L_{j+1}h_{j+1} + V_{j-1}H_{j-1} + F_j H_{F_j} - L_j h_j - V_j H_j = 0 \\ \tilde{y}_{j,i}^* = \tilde{x}_{j,i} \gamma_{j,i}^L \frac{P_{j,i}^0}{P} \\ E_j = \frac{(\tilde{y}_{j,i} - \tilde{y}_{j+1,i})}{(\tilde{y}_{j,i}^* - \tilde{y}_{j+1,i})} \quad \left(\begin{matrix} i = 1, \dots, C \\ j = 1, \dots, N \end{matrix} \right), \quad (1) \\ \sum_{i=1}^c \tilde{y}_{j,i} - 1 = 0 \\ \sum_{i=1}^c \tilde{x}_{j,i} - 1 = 0 \end{cases}$$

где $\tilde{y}_{j,i}$ — концентрация i -го компонента на j -ой тарелке в паровой фазе; L_{j+1} — поток жидкости, поступающий на j -ую тарелку; $\tilde{x}_{j+1,i}$ — концентрация i -го компонента, поступающего на j -ую тарелку в жидкой фазе; V_{j-1} — паровой поток, покидающий j -ую тарелку; $\tilde{y}_{j-1,i}$ — концентрация i -го компонента, покидающего j -ую тарелку в паровой фазе; F_j — расход сырья, поступающего на j -ую тарелку; z_f — количество i -го компонента в сырье, поступающего на j -ую тарелку; L_j — поток жидкости на j -ой тарелке; $\tilde{x}_{j,i}$ — концентрация i -го компонента на j -ой тарелке в жидкой фазе; V_j — паровой поток на j -ой тарелке; $\gamma_{j,i}^L$ — коэффициент активности i -го компонента в жидкой фазе на j -ой тарелке; $P_{j,i}^0$ — парциальное давление i -го компонента; P — общее давление в системе; E_j — эффективность массопереноса

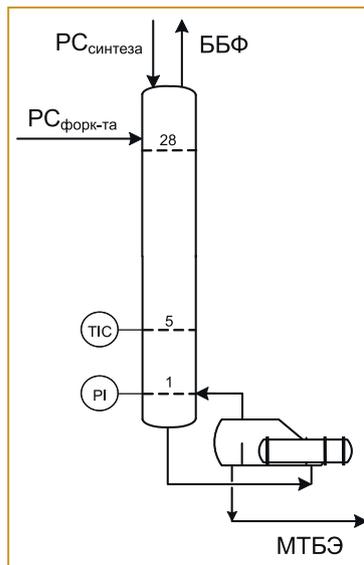


Рис. 2. Технологическая схема ректификационной колонны процесса производства МТБЭ: РС — реакционная смесь; ББФ — бутан-бутиленовая фракция

са по Мерффри на j -ой тарелке; h_{j+1} — энтальпия жидкости, поступающей на j -ую тарелку; H_{j-1} — энтальпия пара, покидающего j -ую тарелку; H_{F_j} — энтальпия питания на j -ой тарелке; h_j — энтальпия жидкости на j -ой тарелке; H_j — энтальпия пара на j -ой тарелке; C — общее количество компонентов в системе; N — общее число тарелок в ректификационной колонне. Для расчета коэффициента активности γ i -го компонента использована модель UNIQUAC [9].

Использование аналитической модели для построения моделей ВА напрямую невозможно, так как эффективность массопереноса по Мерффри является неизвестной величиной, также не известен состав сырья, поступающий в колонну, поэтому на практике широкое распространение получили ВА на основе линейных регрессионных моделей:

$$\hat{y} = \hat{b}_0 + \sum_{m=1}^M \hat{b}_m \cdot u_m, \quad (2)$$

где u_m — входные переменные, доступные измерению в каждый период времени; \hat{y} — оцененное значение выходной переменной объекта; m — число входных переменных ($m = 1, \dots, M$); \hat{b}_0 — свободный член; \hat{b}_m — параметры модели ВА.

Для оценки точности модели ВА используются: коэффициент детерминации (R^2)

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{q=1}^Q (y_q - \hat{y}_q)^2}{\sum_{q=1}^Q (y_q - \bar{y})^2}$$
 и квадратный корень из среднеквадратической ошибки (RMSE)

$$RMSE = \left(\frac{\sum_{q=1}^Q (y_q - \hat{y}_q)^2}{Q} \right)^{1/2},$$

где y_q — измеряемое значение выходной переменной ($q = 1, \dots, Q$), \hat{y}_q — ее значение, полученное на основе ВА, \bar{y} — среднее значение наблюдаемой выходной переменной. Модель тем больше соответствует исследуемому объекту, чем ближе к единице значение коэффициента детерминации R^2 , а значение RMSE ближе к нулю.

Алгоритм доформирования обучающей выборки на основе аналитической модели процесса

Рассматривается исходная ОВ $X_{OB} = \langle U_{OB}, Y_{OB} \rangle$ объемом Q , включающая значения входных переменных

$$U_{OB} = \begin{bmatrix} u_{1m} & \dots & u_{1M} \\ \vdots & & \vdots \\ u_{Q,m} & \dots & u_{Q,M} \end{bmatrix} \text{ и выхода } Y_{OB} = [y_1, y_2, \dots, y_Q]^T,$$

и проверочная выборка (ПВ) $X_{ПВ} = \langle U_{ПВ}, Y_{ПВ} \rangle$ объемом W .

Алгоритм доформирования ОВ на основе аналитической модели технологического объекта (ТО) включает следующие шаги.

Таблица 1. Оценка сходимости результатов расчета и экспериментальных данных с промышленной установки производства МТБЭ ($E_1=0,5; E_2=0,9$)

| Наименование технологического параметра | Экспериментальные данные | Данные моделирования | Относительная ошибка δ , % |
|---|--------------------------|----------------------|-----------------------------------|
| Содержание | | | |
| MeOH в МТБЭ | 0,013 | 0,014 | 7,14 |
| МТБЭ | 98,45 | 98,89 | 0,44 |
| Давление | | | |
| Верх РК | 68 | 68 | 0 |
| Низ РК | 70 | 70 | 0 |
| Температура | | | |
| Верх РК | 32,15 | 34,69 | 7,32 |
| Низ РК | 68,08 | 67,92 | 0,24 |
| 5 ^{ая} тарелка РК | 60,37 | 62,25 | 3,02 |

Шаг 1. На основе откалиброванной аналитической модели ТО (подбор эффективности по Мерффи, при котором достигается максимальное соответствие между экспериментальными данными и аналитической модели ТО) формируется вспомогательная выборка (ВВ) объемом Q^* , включающих значения входных переменных

$$U_{ВВ} = \begin{bmatrix} \hat{u}_{1m} & \dots & \hat{u}_{1M} \\ \vdots & & \vdots \\ \hat{u}_{Q^*,m} & \dots & \hat{u}_{Q^*,M} \end{bmatrix} \text{ и выхода}$$

$$Y_{ВВ} = [y_{m_1}, y_{m_2}, \dots, y_{m_{Q^*}}]^T$$

Для исследуемого промышленного объекта допущается, что эффективность массопереноса по Мерффи на 6...28 тарелках равна $E_1=0,5$, а на 1...5 тарелках равна $E_2=0,9$.

Оценка сходимости результатов расчета и экспериментальных данных с промышленной установки производства МТБЭ приведены в табл. 1 (измеряемые величины технологических параметров приведены в процентах от максимальных значений шкал приборов).

В качестве регрессоров использовались следующие технологические параметры: температура (u_1 — ТИС) и давление (u_2 — Р1,) низа ректификационной колонны (РК) (рис. 2).

Шаг 2. В исходную ОВ добавляются данные, полученные на аналитической модели объекта, таким образом, получаем ДОВ размером R .

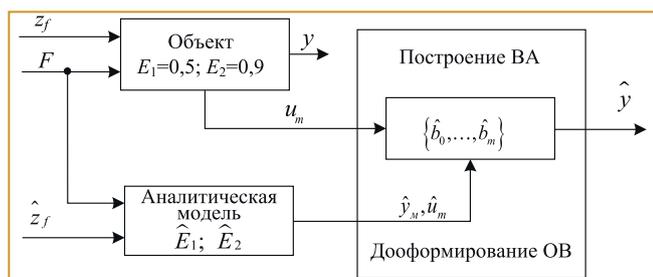


Рис. 3. Иллюстрация предлагаемого подхода к построению ВА на основе ДОВ

Шаг 3. Предполагается, что доформирование выборки будет эффективно только в том случае, если параметры аналитической модели настраивались на выборке объема $Q=Q^*$, где Q^* — необходимый объем ВВ. Оценку объема выборки проводили с использованием области пересечения выхода ДОВ и ПВ. Так как оцениваемый объем выборки зависит от распределения выходной переменной, то возникает задача оценки ее распределения в ДОВ и ПВ.

Функцию распределения выходной переменной для двух законов в интервалах $a < Y_{ОВ} < b$ и $a < Y_{ВВ} < b$ можно получить как сумму $F_{ДОВ} = \int_a^b F_{ОВ} dx + \int_a^b F_{ВВ} dx$.

Принадлежность к каждому распределению проверялась по критерию согласия Колмогорова, который определяется путем деления модуля разности между эмпирическими и теоретическими кумулятивными частотами на корень квадратный из числа наблюдений:

$$\lambda_{ОВ} = \frac{D_Q}{\sqrt{Q}}, \quad \lambda_{ВВ} = \frac{D_{Q^*}}{\sqrt{Q^*}}$$

где $D_Q = \sup_{Y_{ОВ}} |F_Q(Y_{ОВ}) - F(Y_{ОВ})|$, $D_{Q^*} = \sup_{Y_{ВВ}} |F_{Q^*}(Y_{ВВ}) - F(Y_{ВВ})|$,

$F_Q(Y_{ОВ})$, $F_{Q^*}(Y_{ВВ})$ — эмпирические функции распределения ОВ и ВВ соответственно, $F(Y_{ОВ})$, $F(Y_{ВВ})$ — их гипотетические функции распределения.

По таблице распределения статистики Колмогорова определяют вероятность, которая может изменяться от 0 до 1. При $P(\lambda)=1$ — происходит полное совпадение частот, $P(\lambda)=0$ — полное расхождение. Если величина вероятности P значительна по отношению к найденной величине λ , то можно предположить, что расхождения между теоретическим и эмпирическим распределениями незначительны, то есть носят случайный характер.

Область пересечения будет зависеть от того, какой функции распределения принадлежат данные выходной переменной. В практических случаях наблюдается бимодальность после доформирования обучающей выборки.

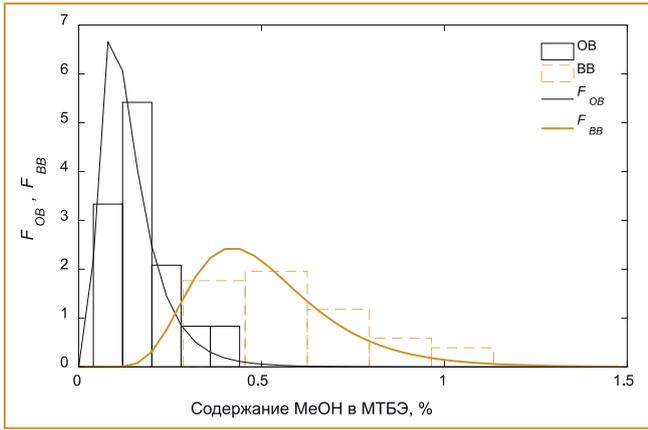
На основе $F_{ДОВ}$ и $G_{ПВ}$ рассчитывается область пересечения выходной переменной ДОВ и ПВ как критерий доформирования выборки по формуле:

$$S = \int_a^c F_{ДОВ} dx + \int_c^b G_{ПВ} dx,$$

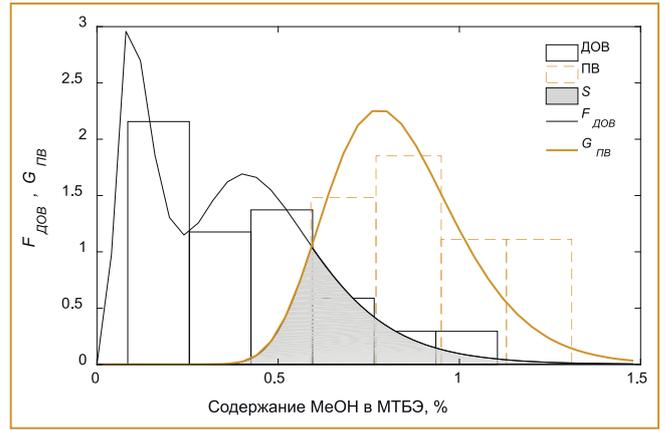
где c — точка пересечения $F_{ДОВ}$ и $G_{ПВ}$. Если выражение для S не может быть найдено аналитически, тогда применяется численное интегрирование.

Иллюстрация предлагаемого подхода к построению ВА на основе доформирования обучающей выборки представлена на рис. 3.

Исходными данными для проведения расчетов на основе аналитической модели являются состав перерабатываемого сырья z_f и технологические параметры процесса, такие как температура, давление и расход F подаваемого сырья, а также давление в колонне



а)



б)

Рис. 4. Область пересечения распределений выходной переменной

и расход нижнего продукта. Использование предлагаемого подхода, представленного на рис. 3, позволит повысить точность оценки показателя качества выходного продукта с учетом априорных знаний об исследуемом процессе по аналогии с принципом «серого ящика». Построенная на таких данных модель ВА будет более корректно отображать свойства объекта.

Определение параметров модели ВА для производства метил-трет-бутилового эфира в условиях ограниченного объема обучающей выборки

Общий размер данных ОВ и ВВ тестируемого объекта составляет $Q=Q^*=30$. Для оценки эффективности предлагаемого алгоритма использовалась проверочная выборка размером $W=15$.

Согласно критерию согласия Колмогорова, было установлено, что данные выходной переменной ПВ принадлежат логнормальному закону распределения:

$$G(Y_{ПВ}) = f(Y_{ПВ} | \mu_{ПВ}, \sigma_{ПВ}) = \frac{1}{\sigma_{ПВ} \sqrt{2\pi} Y_{ПВ}} e^{-\frac{(\ln Y_{ПВ} - \mu_{ПВ})^2}{2\sigma_{ПВ}^2}}$$

где $Y_{ПВ} = [y_1, y_2, \dots, y_W]^T$ — данные выходной переменной (содержание МеОН в МТБЭ, %) ПВ; $\mu_{ПВ}$ — среднее значение; $\sigma_{ПВ}$ — стандартное отклонение.

Функция распределения ДОВ равна сумме распределений выходной переменной ОВ и ВВ, которые также принадлежат логнормальному закону распределения $F(Y_{ОВ})$ и $F(Y_{ВВ})$ соответственно. Тогда

$$F_{ДОВ} = \frac{1}{\sigma_{ОВ} \sqrt{2\pi}} \int_a^b e^{-\frac{(\ln Y_{ОВ} - \mu_{ОВ})^2}{2\sigma_{ОВ}^2}} + \frac{1}{\sigma_{ВВ} \sqrt{2\pi}} \int_a^b e^{-\frac{(\ln Y_{ВВ} - \mu_{ВВ})^2}{2\sigma_{ВВ}^2}} =$$

$$= \frac{1}{2} \left[1 + \operatorname{erf} \left(\frac{\ln b - \mu_{ОВ}}{\sigma_{ОВ} \sqrt{2}} \right) \right] - \left(\frac{1}{2} \left[1 + \operatorname{erf} \left(\frac{\ln a - \mu_{ОВ}}{\sigma_{ОВ} \sqrt{2}} \right) \right] \right) +$$

$$+ \frac{1}{2} \left[1 + \operatorname{erf} \left(\frac{\ln b - \mu_{ВВ}}{\sigma_{ВВ} \sqrt{2}} \right) \right] - \left(\frac{1}{2} \left[1 + \operatorname{erf} \left(\frac{\ln a - \mu_{ВВ}}{\sigma_{ВВ} \sqrt{2}} \right) \right] \right),$$

где erf — функция ошибок [10] имеет следующие значения: $\operatorname{erf}(0) = 0$, $\operatorname{erf}(\infty) = 1$. Область пересечения ДОВ и ПВ будет иметь следующий вид:

$$S = \frac{1}{\sigma_{ПВ} \sqrt{2\pi}} \int_a^c e^{-\frac{(\ln Y_{ПВ} - \mu_{ПВ})^2}{2\sigma_{ПВ}^2}} + \frac{1}{\sigma_{ДОВ} \sqrt{2\pi}} \int_c^b e^{-\frac{(\ln Y_{ДОВ} - \mu_{ДОВ})^2}{2\sigma_{ДОВ}^2}}$$

После преобразований получим:

$$S = \left[1 - \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{k=1}^5 (-1)^{k+1} \frac{c - \mu_{ПВ}^{2k-1}}{2^{k-1} (2k-1) (k-1)!} \right) \right] - \left[1 - \left(\frac{1}{2} - \frac{e^{-\frac{a - \mu_{ПВ}^2}{2}}}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{a - \mu_{ПВ}} + \sum_{k=1}^4 \frac{(-1)^k (2k-1)!}{2^{k-1} (k-1)!} \frac{1}{a - \mu_{ПВ}^{2k+1}} \right) \right) \right] + \left[\frac{1}{2} - \frac{e^{-\frac{b - \mu_{ДОВ}^2}{2}}}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{b - \mu_{ДОВ}} + \sum_{k=1}^4 \frac{(-1)^k (2k-1)!}{2^{k-1} (k-1)!} \frac{1}{b - \mu_{ДОВ}^{2k+1}} \right) \right] - \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{k=1}^5 (-1)^{k+1} \frac{c - \mu_{ДОВ}^{2k-1}}{2^{k-1} (2k-1) (k-1)!} \right]$$

На рис. 4 а представлены данные выходной переменной ОВ и ВВ, и на рис. 4 б продемонстрировано наличие бимодальности у распределения выхода ДОВ.

Согласно описанному алгоритму, получена ДОВ, затем методом робастной регрессии определены параметры модели $\hat{b}_0, \hat{b}_1, \hat{b}_2$, а также рассчитаны значения R^2 , RMSE и S для ПВ без алгоритма, с применением бутстреп анализа и после применения алгоритма. Рассчитанные значения приведены в табл. 2.

В сравнении с бутстреп анализом алгоритм доформирования обучающей выборки позволяет повысить точность модели на $((0,1557 - 0,0925) / 0,1557) \cdot 100 \approx 40,5\%$ RMSE на проверочной выборке.

На рис. 5 показана зависимость S и RMSE при $0,3 \leq \hat{E}_1 \leq 0,8$ и $0,75 \leq \hat{E}_2 \leq 1,0$. Видно, что минималь-

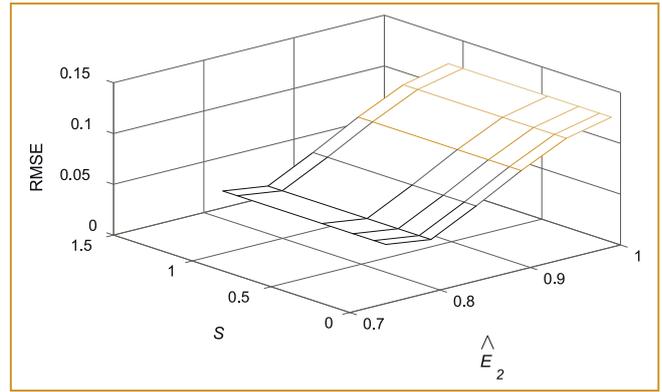
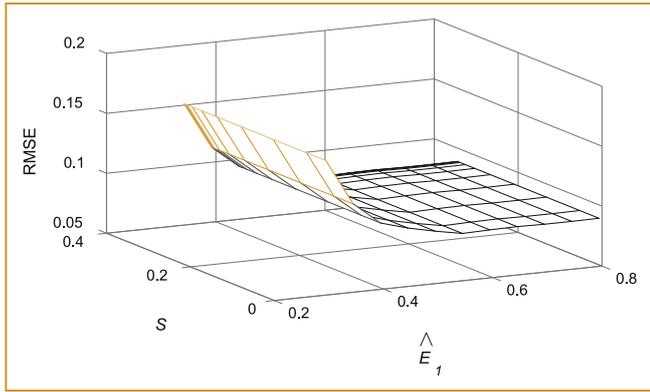


Рис. 5. Зависимость S и $RMSE$ от \hat{E}_1 и \hat{E}_2

Таблица 2. Параметры модели для оценивания $MeOH$ в $MTB\Xi$ и результаты R^2 , $RMSE$ и S на проверочной выборке

| | До доформирования | Бутстреп анализ | После доформирования |
|-------------|-------------------|-----------------|----------------------|
| \hat{b}_0 | 11,3361 | 11,6308 | 13,8750 |
| \hat{b}_1 | -0,1261 | -0,1290 | -0,1501 |
| \hat{b}_2 | 8,4043 | 8,5416 | 9,3853 |
| R^2 | 0,0388 | 0,2725 | 0,7429 |
| $RMSE$ | 0,1789 | 0,1557 | 0,0925 |
| S | 0,0125 | 0,0176 | 0,2661 |

диапазоне \hat{E}_2 . Наилучшие результаты R^2 и $RMSE$ достигаются при $\Delta\hat{E}_2 \leq 0,1$ (рис. 5, рис. 6). Отметим, что при $\hat{E}_2 \ll E_2$ в ДОВ попадают значения, которые не встречаются в реальных условиях.

Таким образом, для достижения наилучших результатов $RMSE$ и соответствия знаков параметров модели $\hat{b}_0, \hat{b}_1, \hat{b}_2$ физическому смыслу процесса целесообразно применять предложенный алгоритм при условии, что $\Delta\hat{E}_1 \leq 0,3$ и $\Delta\hat{E}_2 \leq 0,1$. Достаточной для ДОВ является область пересечения выборок $S=0,2$ при условии $\Delta\hat{E}_1 \leq 0,3$.

ные значения $RMSE$ и максимальные значения S достигаются при $\hat{E}_1 \geq 0,5$ и $\hat{E}_2 \leq 0,9$.

На рис. 6 приведены зависимости R^2 и S от $0,3 \leq \hat{E}_1 \leq 0,8$ и $0,75 \leq \hat{E}_2 \leq 1,0$.

Для оценки целесообразности алгоритма сравнивались полученные значения S доформированных обучающих и проверочных выборок в условиях различных эффективностей массопереноса по Мерффи. Для этого введено в рассмотрение отклонение эффективности ступеней разделения по Мерффи объекта и модели $\Delta\hat{E}_1 = |E_1 - \hat{E}_1|$; $\Delta\hat{E}_2 = |E_2 - \hat{E}_2|$.

Отметим, что достаточной для доформирования обучающей выборки является область пересечения выборок $S=0,2$ при условии, что $\Delta\hat{E}_1 \leq 0,3$. При $0,75 \leq \hat{E}_2 \leq 1,0$ наблюдается изменчивость S на всем

Заключение

Предложен алгоритм доформирования обучающего набора данных для разработки модели ВА в условиях ограниченного объема обучающей выборки. Доформирование происходит посредством добавления в исходную ОВ данных вспомогательной выборки, полученных на откалиброванной аналитической модели ТО. Использование доформированной обучающей выборки позволяет учитывать данные технологического режима на всем диапазоне изменения качества продукта. На примере построения модели ВА по содержанию $MeOH$ в $MTB\Xi$, показано, что применение предложенного алгоритма доформирования ОВ целесообразно при $\Delta\hat{E}_1 \leq 0,3$ и $\Delta\hat{E}_2 \leq 0,1$. Достаточной для доформирования обучающей выборки является область пересечения вы-

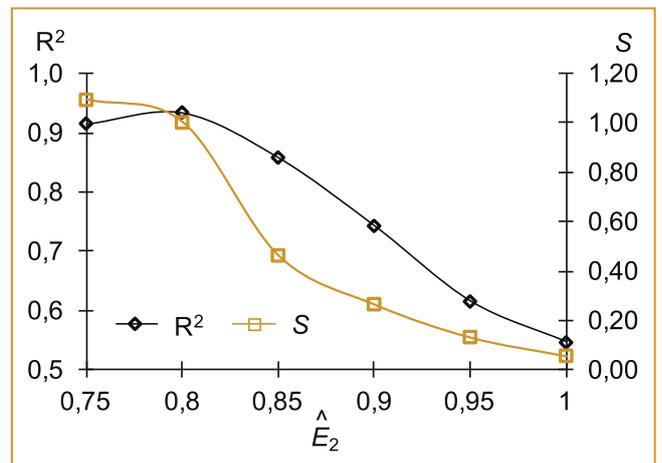
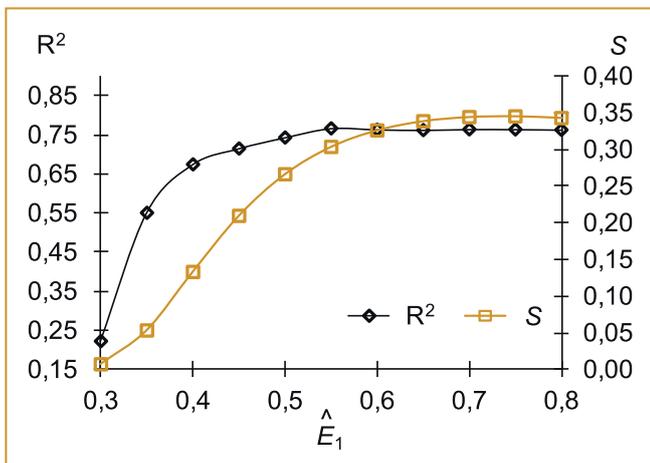


Рис. 6. Зависимость R^2 и S от \hat{E}_1 и \hat{E}_2

Математика может быть занимательной, математические фокусы – впечатляющими, отношения, в которые вступают между собой цифры, – причудливыми. Числа не управляют миром, но показывают, как управляется мир.

Иоганн Вольфганг Гёте

брок $S=0,2$ при условии, что $\Delta \widehat{E}_1 \leq 0,3$. При $\Delta \widehat{E}_2 \leq 0,1$ наблюдается увеличение S до 1. Это связано с тем, что в ДОВ попадают значения, которые не встречаются в реальных условиях. В сравнении с бутстреп анализом предложенный алгоритм позволяет повысить точность модели до 40% RMSE на проверочной выборке.

Список литературы

1. Дозорцев В.М., Ицкович Э.Л., Кнеллер Д.В. Усовершенствованное управление технологическими процессами (APC): 10 лет в России // Автоматизация в промышленности. 2013. № 1. С. 12-19.
2. Бахтадзе Н.Н. Виртуальные анализаторы (идентификационный подход) // Автоматика и телемеханика. 2004. № 11. С. 3-24.
3. Kadlec P., Gabrys B., Strandt S. Data-driven soft sensors in the process industry // Computers and Chemical Engineering. – 2009. V. 33. Is. 4. P. 795-814.
4. Andrijić Ž.U., Cvetnić M., Bolf N. Soft sensor models for a fractionation reformate plant using small and bootstrapped data sets // Brazilian journal of chemical engineering. – 2018. V. 35. No 2. P. 745-756.
5. Fortuna L., Graziani S., Xibilia M.G. Comparison of soft-sensor design methods for industrial plants using small data sets // IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement. – 2009. V. 58. Is. 8. P. 2444-2451.
6. Napolia G., Xibilia M.G. Soft sensor design for a topping process in the case of small datasets // Computers and chemical engineering. – 2011. V. 35. P. 2447-2456.
7. Chen Z.-S., Zhu B., He Y.-L., Yu L.-A. A PSO based virtual sample generation method for small sample sets: Applications to regression datasets // Engineering applications of artificial intelligence. – 2017. V. 59. P. 236-243.
8. Shang C., Yang F., Huang D., Lyu W. Data-driven soft sensor development based on deep learning technique // Journal of Process Control. – 2014. No. 24. P. 223-233.
9. Abrams D.S., Prausnitz J.M. Statistical thermodynamics of liquid mixtures: a new expression for the excess Gibbs energy of partly or completely miscible systems // AIChE Journal. – 1975. V. 21. No 1. P. 116-128.
10. Корн Г.А., Корн Т.М. Справочник по математике для научных работников и инженеров. - М.: «Наука», 1974.

Самотылова Светлана Александровна – младший научный сотрудник, Торгашов Андрей Юрьевич – д-р техн. наук, зав. лабораторией систем управления технологическими процессами Института автоматизации и процессов управления Дальневосточного отделения РАН.

Контактный телефон (4232) 31-02-02.

E-mail: torgashov@iacp.dvo.ru

АЛЬТЕРНАТИВНЫЕ ПОДХОДЫ К УПРАВЛЕНИЮ НЕПРЕРЫВНЫМИ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИМИ ПРОЦЕССАМИ

Л.М. Яковис (СПбПУ Петра Великого)

Работа посвящена анализу и сравнению двух направлений в решении задач динамической оптимизации непрерывных технологических процессов: новой идеологии «усовершенствованного управления процессами» и идеологии традиционного двухуровневого управления с применением типовых регуляторов. Для сравнения альтернативных подходов рассмотрен инерционный объект с запаздыванием – модель, удовлетворительно описывающая поведение многих процессов непрерывной технологии.

Ключевые слова: непрерывный технологический процесс, двухуровневое управление, APC, типовой регулятор, оптимизация.

*Крошка сын к отцу пришел,
и спросила кроха:
— Что такое хорошо
и что такое плохо?
(В. Маяковский)*

Стремительный прогресс в области управляющей вычислительной техники и, в частности, снятие многих ограничений по памяти и быстродействию позволяет существенно усложнить алгоритмы управления технологическими процессами (ТП). Указанные тенденции привели к распространению идеологии «усовершенствованного управления процессами» (Advanced process control или коротко APC) [1]. Центральная идея этого подхода — управление на базе прогнозирующих моделей управляемого объекта (Model Predictive Control: MPC), то есть построение

математического представления управляемого процесса и встраивание этой модели в контур управления в режиме реального времени [2].

Практические разработки систем класса APC осуществляются, главным образом, на крупных объектах нефтепереработки и энергетики [3]. В близкой перспективе можно ожидать продвижения APC в менее «денежные» отрасли производств непрерывного типа.

Вместе с тем, на практике широко используется традиционная идеология двухуровневого управления с применением типовых регуляторов. Идея данного