Выбор рациональной частоты проведения лабораторных анализов на непрерывном производстве технологического типа[1]

Е.А. Гребенюк, Э.Л. Ицкович (ИПУ РАН)

Предлагается метод определения частоты лабораторных анализов показателей качества материальных потоков, позволяющий с заданной точностью в любой момент времени иметь оценки значения этих показателей. Рассматриваются разные варианты прогноза значений показателей качества на интервале времени между их соседними анализами.

Ключевые слова: частота лабораторных анализов, прогноз качества авторегрессионной моделью, точность непрерывной оценки качества при его дискретных измерениях.

Введение

На любом непрерывном производстве технологического типа (предприятиях химии, нефтехимии, нефтепереработки и т. п.) для точного управления агрегатами требуется знание значений текущих качественных показателей сырьевых компонентов, полуфабрикатов и конечных продуктов. Основными способами измерения значений качественных показателей являются поточные непрерывные анализаторы, встроенные в производственное оборудование, и лабораторные анализаторы, используемые в отдельных лабораториях предприятия и дискретно во времени оценивающие значение качественного показателя по отобранной на производстве пробе.

Применение поточных анализаторов на практике имеет ограниченный характер по ряду причин:

— отсутствие поточных автоматических приборов измерения многих качественных, химических величин;

— слишком большая стоимость ряда поточных анализаторов, что превышает возможности предприятий на их приобретение;

— сложность и высокая стоимость обслуживания многих поточных анализаторов, из-за требуемой частой и дорогой их калибровки в производственных условиях, которую в ряде случаев еще и должна проводить посторонняя организация;

— большое транспортное запаздывание отдельных поточных анализаторов, составляющее десятки минут, что в ряде случаев препятствует их непосредственному применению в системах регулирования режима технологического процесса.

Применение лабораторных анализов качества, напротив, распространено повсеместно на предприятиях любых отраслей и является основным источником оценки текущих значений показателей качества сырьевых компонентов, полуфабрикатов и конечных продуктов, хотя выполняются анализы достаточно редко и используются для периодического информирования технолога и оператора технологического агрегата о том, насколько заданный текущий режим его работы обеспечивает требуемый диапазон значений качественных показателей. Используемая периодичность лабораторных анализов различных качественных показателей обычно находится в диапазоне примерно от четырех часов до нескольких суток. Практически технологи цехов и операторы технологических агрегатов, которые должны корректировать технологический режим агрегата по периодическим значениям соответствующих качественных показателей, считают, что значение каждого показателя в любой момент времени между соседними его анализами равно последнему по времени результату анализа, выданного лабораторией.

Естественно, что имеющаяся при этом погрешность оценки текущего значения показателя качества в диапазоне времени между соседними замерами зависит от частоты анализов. Она определяется ее основной составляющей – погрешностью прогноза значения последнего замера на время интервала между замерами. В интервале наличия статистической связи между соседними замерами чем чаще производится лабораторный анализ показателя, тем меньше погрешность оценки его текущего значения и, следовательно, тем точнее могут поддерживаться заданные нормативы качества продукции.

Однако комплекс существующих ограничивающих факторов:

— технических ограничений на частоту взятия проб,

— финансовых ограничений на число и состав лабораторных анализаторов,

— организационных ограничений на лабораторный персонал — существенно ограничивают максимально возможную частоту лабораторных анализов качества. Реально частота анализов отдельных показателей качества есть компромисс между желанием

[1] Работа выполнена при поддержке Гранта РФФИ 13-08-01309.

технологов и возможностями лаборатории. Разница в периодичности анализов отдельных показателей задается в допустимых для лаборатории пределах технологами, которые ранжируют показатели по важности их влияния на качество и количество выпускаемой продукции, а также ориентируются на имеющуюся опытную оценку возможной скорости изменения во времени значений отдельных показателей, ведущей к нарушению заданного качества продукции.

Ниже предлагается способ расчета частоты проведения анализа показателя качества по заданной технологом необходимой точности его оценки в любой момент времени. Этот способ не только обосновывает требуемую частоту анализов отдельных показателей, но и показывает зависимость частоты их оценки от заданной точности и используемого метода прогнозирования значения показателя на время между соседними по времени анализами.

Постановка задачи

Разделим ход ТП на два состояния:

— поддержание во времени определенного режима работы агрегата, характеризующегося фиксированными, неизменными требованиями на качество и количество вырабатываемой продукции. При этом отсутствуют резкие скачкообразные внешние возмущения, нет остановок и поломок отдельных единиц основного оборудования агрегата; преобладающие низкочастотные колебания качества сырьевых компонентов находятся в заранее известной отмеченной области;

— перевод агрегата на другой режим работы в случае: изменения требований к качеству и количеству выпускаемой агрегатом продукции; выхода из строя отдельных единиц основного оборудования агрегата; смены состава и качества поступающих сырьевых компонентов.

Функционирование агрегата в первом состоянии может продолжаться неограниченное время, тогда как второе состояние всегда ограничено определенным интервалом времени, зависящим от динамики переходных процессов в агрегате.

Число и частота требуемых лабораторных анализов качественных показателей в переходных режимах носит внеплановый характер, зависит от вида изменения режима и не могут быть заранее просчитаны, поэтому дальнейшее изложение касается работы технологического агрегата в определенном, фиксированном, постоянном режиме работы.

При функционировании агрегата в первом состоянии, то есть при определенном, заданном режиме работы поведение во времени каждого показателя качества близко к поведению случайного стационарного процесса, пока накопленные возмущения не вызовут изменений характеристик этого процесса (свойств его распределения), выражающихся в виде тренда его среднего значения или увеличения амплитуд его колебаний и приводящих к выходу за заданные нормативы значений данного показателя.

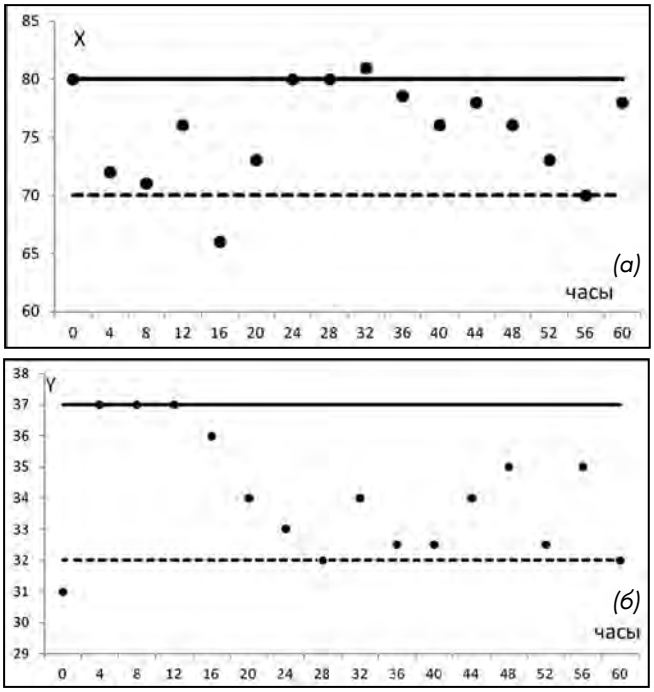

Рис. 1. Последовательность значений лабораторных анализов качественного показателя M (а) и N (б) за 60 ч в условных единицах X и Y соответственно,
где • – оценки лабораторных анализов в условных единицах X (а) или Y (б),
— и – – – – верхняя и нижняя границы заданного норматива значений показателя M (а) или N (б).

В статье [1] рассмотрены методы прогнозирования этих трендов с помощью контрольных карт, которые выделяют моменты времени, когда характеристики показателя качества начинают значительно отличаться от поведения исходного случайного стационарного процесса.

Проанализируем поведение показателя качества в определенном режиме работы агрегата при отсутствии сигнала от контрольных карт, то есть когда его характеристики постоянны и его можно считать случайным стационарным процессом.

На рис. 1 приведены типичные фрагменты промышленных примеров поведения во времени значений качественных показателей при постоянном режиме работы агрегата и отсутствии значимого тренда среднего значения и амплитуды колебаний показателя во времени, которые фиксируются лабораторными анализами с интервалом 4 часа.

Основной задачей оператора и технолога является недопущение выхода качественных показателей процесса за пределы заданного им нормативного диапазона, а для этого они должны знать в любой момент времени (а не только в момент выдачи им очередных результатов анализа) значения качественных показателей с определенной точностью, чтобы предварять ситуации их выхода за нормативный диапазон коррекцией определенных, влияющих на их поведение физических параметров ТП.

Рассмотренные обстоятельства позволяют обосновать формальную процедуру вычисления необходимой

частоты лабораторных анализов каждого показателя качества: эта частота должна позволить определять с заданной технологом точностью оценку значения качества в любой момент времени из интервала между соседними дискретными лабораторными анализами.

Решение задачи

Учитывая, что характер поведения качественных показателей во времени при постоянном режиме работы агрегата близок поведению случайных стационарных процессов, будем определять их характеристики статистическими методами анализа таких процессов.

На первом этапе для каждого анализируемого показателя качества отбирается достаточно представительная выборка его значений, по которой можно определить его основную статистическую характеристику — автоковариационную функцию. В такой выборке должно содержаться порядка 60...100 последовательных значений анализов показателей качества, полученных с интервалом между последовательными анализами значительно меньшим возможного времени спада автоковариационной функции, чтобы по ним можно было бы приближенно оценить данную функцию. Многочисленные наблюдения поведений качественных показателей на ряде технологических агрегатов разных производств показали, что в силу значительной инерционности ТП время спада автоковариационной функции почти всегда превосходит 30 ч, а нередко превосходит и 100 ч. Ввиду этого в подавляющем большинстве случаев для получения представительной выборки надо иметь более чем десятисуточный набор последовательных анализов показателей качества, проводимых с частотой один раз в четыре часа. Если такая выборка отсутствует в БД лаборатории, то следует ее организовать специальными сверхплановыми лабораторными анализами данного показателя качества. На рис. 1 приведены подобные фрагменты представительных выборок отдельных показателей качества *N* и *M*.

На втором этапе по полученной представительной выборке значений показателя качества вычисляются статистические характеристики поведения показателя качества во времени.

Оценка среднего значения показателя качества, которое примерно соответствует заданному в данном технологическом режиме значению показателя качества:

$$m = \frac{\sum_{t=1}^{n} y_t}{n}, \quad (1)$$

где y_t — полученная оценка показателя качества в момент t, n — число анализов показателя качества в используемой выборке.

Оценки автоковариационной функции значений показателя качества, разделенных числом j последовательных анализов $cov(y_t,y_{t-j})$, вычисляются по k формулам:

$$cov(y_t, y_{t-j}) = \frac{1}{n}\sum_{t=j+1}^{n}(y_t - m)(y_{t-j} - m), \text{ при } j = 0,1,...k, \quad (2)$$

где t-j — последовательный номер анализа, отстоящего от текущего анализа, выполняемого в момент t на время $t_ч j$ ($t_ч$ — значения времени между соседними анализами), k — последняя вычисляемая точка автоковариационной функции, лежащая в окрестности ее нуля, то есть определяющая время, при котором связь между значениями анализов становится незначительной.

Поскольку поведение во времени показателя качества считаем стационарным случайным процессом, то его автоковариации между двумя анализами зависят только от интервала времени между ними, то есть от величины сдвига j между этими анализами.

Автоковариация при нулевом интервале времени между точками: $cov(y_t, y_t) = \frac{1}{n}\sum_{t=j+1}^{n}(y_t - m)^2$ представляет собой дисперсию отклонений показателя качества от его среднего значения, то есть $cov(y_t, y_t) = \sigma_y^2$.

Таким образом, поведение во времени качественного показателя в определенном заданном технологическом режиме работы агрегата определяется средним значением показателя, среднеквадратичным отклонением от него и автоковариационной функцией.

Рассчитанное время спада автоковариационной функции определяет значение интервала между соседними анализами, превышение которого указывает на отсутствие взаимосвязи между ними, то есть при интервале между анализами, превышающем время спада автоковариационной функции, прогноз значения будущего анализа по его прошлым значениям невозможен и можно лишь считать, что его значение с вероятностью 95% будет находиться примерно в пределах трех среднеквадратичных отклонений σ_y от его среднего значения.

На рис. 2 показаны вычисленные дискретные значения точек автоковариационных функций для показателей *M* и *N*, поведение которых во времени показано на рис. 1. Временной интервал между показателями X_t и X_{t-j} (Y_t и Y_{t-j}) составляет 4*j* часов.

На третьем, заключительном этапе рассматриваются и сопоставляются по точности два способа прогнозирования оценки значения качественного показателя на интервале времени между соседними анализами.

Первый способ — это обычно применяемый повсеместно прогноз качественного показателя на момент времени t+1, сделанный в любой момент времени от t до t+1, который равен значению показателя качества в момент времени t:

$$\hat{y}_{1,t+1|t} = y_t. \quad (3)$$

Второй способ — это прогноз по авторегрессионной модели наблюдаемого изменения во времени качественного показателя, отражающий связь между последовательными наблюдениями. Этот способ может быть применен, если интервал между анализами такой, что результаты нескольких последовательных анализов коррелированны между собой. Тогда по ряду последовательных анализов $y_1,...,y_t$ может быть построена авторегрессионная модель процесса:

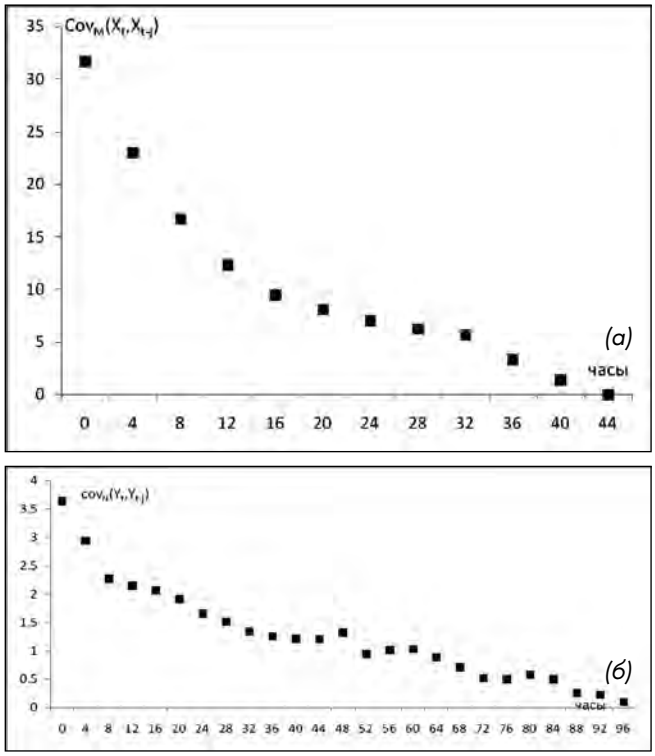

Рис. 2. Оценки дискретных точек автоковариационной функции показателя качества M (а), N (б)

$$y_t = \alpha_0 + \sum_{j=1}^{l} \alpha_j y_{t-j} + \xi_t, \qquad (4)$$

где y_t — измеренное значение качественного показателя в момент времени t, $\alpha_0, \alpha_1, \ldots, \alpha_l$ коэффициенты модели, l — порядок модели, ξ_t случайная погрешность авторегрессионной модели, имеющая дисперсию σ_ε^2.

Алгоритм построения авторегрессионной модели (4), включающий выбор порядка l, вычисление коэффициентов и проверку качества построенной модели, подробно описан в [2] и реализован практически во всех известных пакетах как общего назначения (Matlab, Matcad, Maple), так и статистических («Статистика», «Мезозавр», GPSS и др.).

Прогноз по авторегрессионной модели (4) на момент времени t+1, сделанный в момент времени t, вычисляется по формуле:

$$\hat{y}_{2,t+1|t} = \alpha_0 + \sum_{j=1}^{l} \alpha_j y_{t-j+1}. \qquad (5)$$

Вычислим точность прогноза поведения показателя качества до его следующего по времени анализа двумя приведенными способами прогноза при условии, что известны дисперсия отклонений показателя качества от его среднего значения σ_y^2 — и выборочные значения автоковариационной функции показателя качества, вычисленные по фомуле (2) (рис. 2).

Ошибка первого способа прогноза (3) на момент следующего анализа:

$$e_{1,t} = y_t - \hat{y}_{1,t|t-1} = y_t - y_{t-1}. \qquad (6)$$

Дисперсия ошибки прогноза (6) равна дисперсии выражения $(y_t - y_{t-1})(y_t - y_{t-1})$, откуда по свойствам дисперсии получаем:

$$\left(\sigma_{e_1}\right)^2 = 2\sigma_y^2 \left(1 - \frac{\operatorname{cov}(y_t, y_{t-1})}{\sigma_y^2}\right).$$

Величина $\dfrac{cov(y_t, y_{t-1})}{\sigma_y^2}$ представляет собой коэффициент корреляции со сдвигом 1 (то есть коэффициент корреляции между двумя последовательными анализами) и обозначается $\rho_y(1)$.

Тогда среднеквадратичная погрешность (СКП) первого способа прогноза равна:

$$\sigma_{1,e} = \sigma_y \sqrt{2(1 - \rho_y(1))}, \qquad (7)$$

где σ_y – среднее квадратичное отклонение показателя качества от его среднего значения.

Дисперсия ошибки второго способа прогноза (5) на момент следующего анализа:

$$e_{2,t} = y_t - \hat{y}_{2,t|t-1} = y_t - \alpha_0 - \sum_{j=1}^{l} \alpha_j y_{t-j} = \xi_t. \qquad (8)$$

СКП этого способа прогноза равна корню квадратному из дисперсии шибки прогноза по авторегрессионной модели (4) и вычисляется по известной формуле (например, [2]):

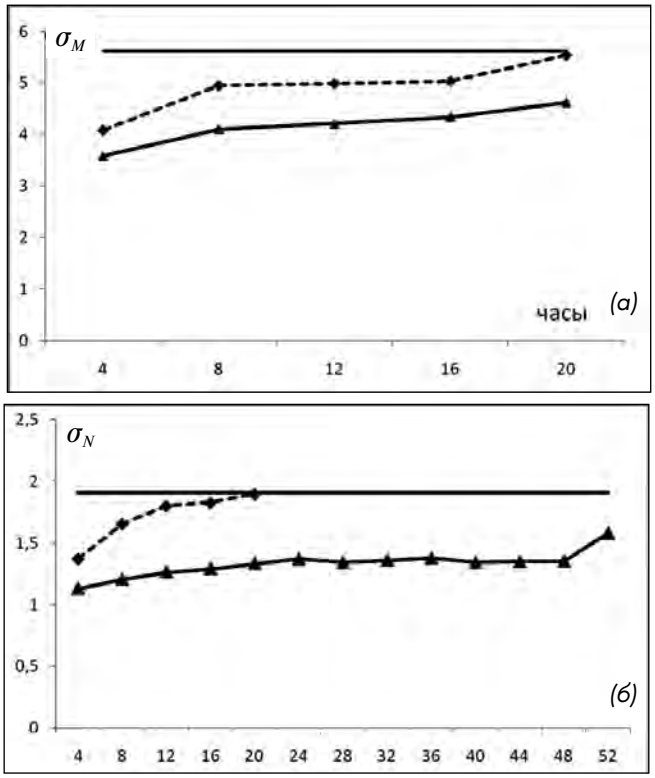

Рис. 3. СКП прогноза показателя качества M (а) и N (б) на различный временной интервал,
где —— – уровень среднеквадратичного отклонения показателя качества M или N от его среднего значения,
♦-- и ▲—— – СКП первого и второго прогноза показателя качества M и N

$$\sigma_{2,e} = \sigma_{\xi} = \sigma_y \sqrt{\left(1 - \sum_{j=1}^{l} \alpha_j \rho_y(j)\right)}, \quad (9)$$

где $\rho_y(j)$ коэффициент корреляции со сдвигом $j = 1,....l$.

Применение полученных решений на практике

Рассмотрим конкретные результаты решений на примерах качественных показателей *M* и *N*, поведение которых во времени показано на рис. 1.

Качественный показатель M

Дисперсия отклонений качественного показателя *M* от среднего значения, вычисленная на основе результатов лабораторных анализов (значение ординаты при нулевом значении абсциссы на рис. 2а) равна 31,63; соответственно его среднеквадратичное отклонение от среднего (заданного) значения равно 5,62.

На рис. 3а представлен график изменения СКП прогноза, в зависимости от частоты проведения анализов: через 4, 8, 12 и т. д. часов. Горизонтальная линия вверху графика обозначает уровень дисперсии отклонений показателя качества *M* от его среднего значения, то есть $\sigma_M = \sqrt{cov(X_t, X_t)}$. Точки, отмечающие СКП первого способа прогноза (по формуле (7)) обозначены ромбом, точки СКП второго способа прогноза по авторегрессионной модели (по формуле (9)) — треугольником. По вертикальной оси отложены значения СКП ошибки прогноза, по горизонтальной — интервалы времени между анализами в часах.

Качественный показатель N

Автоковариационная функция этого показателя спадает существенно медленнее, чем у показателя *M* (рис. 2). Дисперсия отклонений качественного показателя *N* от среднего значения, вычисленная на основе результатов лабораторных анализов (значение ординаты при нулевом значении абсциссы на рис. 2б) равна 3,63; соответственно его среднеквадратичное отклонение от среднего (заданного) значения равно 1,9.

На рис. 3б представлен график изменения СКП прогноза в зависимости от частоты проведения анализов: через 4, 8, 12 и т. д. часов. Горизонтальная линия вверху графика обозначает уровень СКП отклонений показателя качества *N* от его среднего значения, то есть $\sigma_N = \sqrt{cov(Y_t, Y_t)}$. Точки, отмечающие СКП первого способа прогноза (по формуле (7)) обозначены ромбом, точки СКП прогноза второго способа по авторегрессионной модели (по формуле (9)) — треугольником. По вертикальной оси отложены значения СКП прогноза, по горизонтальной — интервалы времени между анализами в часах. В табл. 1 и 2 приведены значения СКП, представленные на рис. 3 (а, б).

Таблица 1. СКП прогноза показателя M, (среднеквадратичное отклонение показателя качества от среднего значения равно 5,62)

Интервал между анализами	Прогноз_1	Прогноз_2
4	4,1	3,58
8	4,95	4,1
12	4,98	4,21
16	5,03	4,34
20	5,54	4,62

Таблица 2 СКП прогноза показателя N, (среднеквадратичное отклонение показателя качества от среднего значения равно 1,9)

Интервал между анализами	Прогноз_1	Прогноз_2
4	1,37	1,13
8	1,66	1,2
12	1,8	1,26
16	1,83	1,3
20	1,9	1,33
24		1,37
28		1,34
32		1,36
36		1,38
40		1,34
44		1,35
48		1,35
52		1,58

Заключение

Таким образом, проведен анализ точности оценки значений показателей качества в любой момент времени при их дискретном измерении анализаторами лаборатории предприятия и при различных способах прогноза значений показателей между их соседними анализами. Результатом анализа можно считать обоснованный выбор частоты лабораторных анализов каждого показателя по требуемой точности его оценки в каждый момент времени.

Показано, что определение рациональной частоты лабораторных анализов может быть реализовано, когда:

— технолог, курирующий работу соответствующего технологического агрегата, указывает примерное значение среднеквадратичной погрешности или максимальной погрешности (последняя легко переводится в среднеквадратичную погрешность), с которой ему в любой момент времени надо знать значения каждого показателя качества, анализируемого лабораторией;

— специалисты ИТ и служб автоматики выбирают необходимую выборку анализов каждого показателя из архива лаборатории или договариваются с руководством лаборатории о проведении необходимой выборки, а затем проводят описанный в статье статистический анализ выборки анализов каждого показателя;

— совместным решением специалисты ИТ, служб автоматики и руководства лаборатории (руководствуясь желанием технолога, результатом статистического анализа выборки, возможностями лаборатории) решают вопрос о способе прогноза каждого показателя между соседними анализами и фиксируют рациональную частоту его анализов.

Естественно, данная процедура должна быть повторена заново при любых модификациях режима работы технологического агрегата, существенно изменяющих статистические характеристики поведения качественных показателей агрегата во времени.

Список литературы

1. *Гребенюк Е.А.* Особенности применения контрольных карт для слежения за изменениями качественных показателей процессов непрерывных производств //Автоматизация в промышленности. 2014. № 10. С. 37-42.
2. *Бокс Дж., Дженкинс Г.* Анализ временных рядов. Прогноз и управление. Пер. с англ. Вып.1.1974. Вып.1. Мир. С. 72-73.

Гребенюк Елена Алексеевна *– д-р техн. наук, главный научный сотрудник,*
Ицкович Эммануил Львович *– д-р техн. наук, проф. зав. лабораторией ИПУ им. В.А. Трапезникова РАН.*
Контактный телефон (495) 334-90-21.
E-mail:lgreben@ipu.ru