

УДК 681.5:622.276+622.279

ПЕРСПЕКТИВНОЕ РАСШИРЕНИЕ ФУНКЦИЙ ЛИМС ЛАБОРАТОРИЙ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРЕДПРИЯТИЙ

Е.А. Гребенюк

Институт проблем управления им. В.А. Трапезникова РАН
Россия, 117997, Москва, Профсоюзная ул., 65
E-mail: lgreben@ipu.ru

Ицкович Э.Л

Институт проблем управления им. В.А. Трапезникова РАН
Россия, 117997, Москва, Профсоюзная ул., 65
E-mail: itskov@ipu.ru

Ключевые слова: автоматизация производственных лабораторий, математическая обработка результатов лабораторных анализов, контрольные карты для автокоррелированных лабораторных анализов.

Аннотация: предлагаются алгоритмы обработки дискретных во времени лабораторных анализов качественных показателей, позволяющие получать уточненные оценки текущих значений этих показателей и прогнозов их нахождения в заданных технологическом диапазоне.

1. Введение

Производственные лаборатории, выполняющие дискретную во времени оценку качественных показателей материальных производственных потоков сырьевых компонентов, полуфабрикатов и готовой продукции повсеместно оснащены системами автоматизации, которые получили наименование ЛИМС (LIMS – Laboratory Information Management System). ЛИМС выпускаются несколькими десятками фирм в мире, а их внедрение на российских предприятиях технологических отраслей носит достаточно массовый характер. Типовой набор реализуемых в ЛИМС функций по обработке лабораторных анализов, практически, ограничивается получением от лабораторных приборов результирующих данных и их необходимой расшифровкой для оценки измеренного значения качественного показателя. ЛИМС любых производителей не производят такую математическую обработку результатов последовательных анализов каждого качественного показателя, которая позволила бы получать более точные оценки как текущих значений этого показателя в интервалах времени между лабораторными анализами, так и прогноза выхода его значений за заданный технологический диапазон.

Ниже предлагаются и анализируются математические методы обработки результатов лабораторных анализов, введение которых в ЛИМС повысит точность оценки как текущих значений качественных показателей, так и прогноза их поведения до следующего по времени лабораторного анализа.

2. Типовые свойства качественных показателей материальных потоков

Для рассматриваемого класса непрерывных технологических производств ход технологического процесса в любом агрегате может быть подразделен на два состояния.

1-ое состояние: поддержание во времени заданного режима работы агрегата, который характеризуется фиксированными, неизменными требованиями на качество вырабатываемой агрегатом продукции. Необходимая стабильность заданного технологическим режимом процесса в любом технологическом агрегате определяется следующими свойствами качественных показателей вырабатываемых им продуктов:

1) значения качественных показателей процесса, находятся в заданном технологическом диапазоне;

2) прогнозы значений качественных показателей до следующих по времени лабораторных анализов не выходят за границы заданных им технологическим диапазонов;

3) амплитуды разностей между соседними по времени лабораторными анализами качественных показателей (их волатильность) не превосходят заданные им величины.

2-ое состояние: перевод агрегата на другой режим работы, что может быть вызвано одним из следующих обстоятельств: изменением требований к качеству выпускаемой агрегатом продукции или сменой состава и качества поступающего сырья.

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 носят внеплановый характер и не могут быть заранее просчитаны.

В постоянном режиме работы агрегата среднее значение каждого качественного показателя может иметь два варианта поведения во времени:

– может быть постоянным во все время работы агрегата в заданном режиме (стационарный случайный процесс);

– может медленно меняться время от времени в определенных пределах, не нарушающих заданных технологическим границ диапазона или время от времени скачкообразно переходить на другой, задаваемый оператором процесса средний уровень, но при том, что текущие значения качественного показателя остаются в границах заданного технологическим диапазона (разностно-стационарный случайный процесс т. е. процесс, для которого разности соседних значений являются стационарными [1]).

Важным свойством временной последовательности лабораторных анализов качественных показателей, определяемой существенной инерционностью технологических процессов, является автокоррелированность соседних по времени лабораторных анализов качественного показателя при их дискретности 4, 6, 8 и более часов.

При работе технологического агрегата в заданном режиме обычно отсутствуют резкие, кратковременные выбросы значений качественного показателя, но возможен, вызванный изменениями не контролируемых свойств возмущений, такой постепенный тренд отдельных характеристик технологического процесса, а с ним и значений качественных показателей, который приводит к их выходу за заданный диапазон, что необходимо своевременно обнаружить и дать сигнал оператору о необходимости корректировки технологического процесса.

Основной задачей оператора и технолога является недопущение выхода качественных показателей процесса за пределы заданных им диапазонов. Для этого они должны знать в любой момент времени, а не только в момент выдачи им очередных результатов лабораторного анализа, значения качественных показателей и прогноз их дальнейшего

поведения до следующего лабораторного анализа с точностью, достаточной для предупреждения их выхода за заданные им диапазоны.

Контроль стабильности режима процесса по проводимым дискретным лабораторным анализам значений качественных показателей может быть значительно улучшен, если использовать описанные ниже варианты математической обработки последовательности полученных анализов.

3. Методы прогнозирования значений лабораторных анализов качественных показателей

3.1. Метод статистической экстраполяции

Статистическая экстраполяция использует для прогнозного значения на момент времени получения результата следующего лабораторного анализа алгоритм, основанный на учете статистической взаимосвязи ряда последовательных лабораторных анализов.

Построение алгоритма статистической экстраполяции выполняется для стационарного процесса по последовательности значений лабораторных анализов, полученных до текущего момента времени t , которые описываются временным рядом:

$$(1) \quad x_1, x_2, \dots, x_{t-1},$$

где x_i , $i = 1, 2, \dots$ – результаты лабораторного анализа, отобранного в момент времени $t = i$.

Если поведение во времени лабораторных анализов качественного показателя при заданном режиме работы агрегата описывается разностно-стационарным случайным процессом, то для построения алгоритма статистической экстраполяции выполняется операция взятия разностей последовательности результатов лабораторных анализов, полученных до текущего момента времени t :

$$(2) \quad x_1, x_2, \dots, x_{t-1},$$

где $\Delta x_i = x_i - x_{i-1}$, $i = 2, 3, \dots$. Процесс (2) становится стационарным, и для него строится алгоритм статистической экстраполяции.

Статистическая экстраполяция вычисляет оценку значения ряда на момент времени t , которая является алгебраической суммой двух линейных комбинаций:

– прошлых значений лабораторных анализов, $x_{t-1}, x_{t-2}, \dots, x_{t-k}$ ряда (1) в случае стационарного процесса или их разностей $\Delta x_{t-k+1}, \dots, \Delta x_{t-1}$ в случае разностно-стационарного процесса;

– ошибок прогнозов на один шаг $x_{t-1} - \hat{x}_{t-1|t-2, \dots}, \dots, x_{t-q} - \hat{x}_{t-q|t-q-1, \dots}$, где $\hat{x}_{t-i|t-i-1, \dots}$ прогноз значения x_{t-i} , выполненный по наблюдениям $x_{t-i-1}, x_{t-i-2}, \dots, x_{t-i-m}$.

При построении алгоритма статистической экстраполяции коэффициенты линейных комбинаций выбираются таким образом, чтобы среднеквадратичная ошибка прогноза была минимальной [2].

Если построен алгоритм статистического прогноза, то для каждого вновь получаемого значения прогноза можно сформировать его доверительный интервал. Выход фактического значения прогнозируемого показателя за границы его доверительного интервала возможен с определенной заданной вероятностью. Построенные границы доверительных интервалов могут служить индикатором тех временных интервалов процесса,

в которых возможен выход качественного показателя за границы заданного ему по технологическим условиям диапазона.

3.2. Метод контрольных карт

Контрольные карты выдают временной график значений определенной функции от измеряемой последовательности лабораторных анализов качественного показателя. Вид функции определяется типом контрольной карты. Указанные выше свойства качественных показателей материальных потоков технологического производства накладывают ниже приведенные требования к выбору и использованию контрольных карт в ЛИМС.

1) Для текущего контроля по лабораторным анализам следует использовать только контрольные карты индивидуальных, а не групповых наблюдений.

2) В силу существенной инерционности технологических процессов результаты последовательно выполненных анализов автокоррелированы, что необходимо учитывать при выборе контрольных карт и настройке их параметров.

3) Для предупреждения выхода как значения качественного показателя, так и его волатильности за заданные контрольные границы целесообразно совместное использование пары контрольных карт: одна для предупреждения выхода процесса за допустимые границы, другая - для предупреждения сверхнормативной волатильности.

4) Поскольку в условиях стабильного режима работы технологических агрегатов возможны незначительные, но возрастающие во времени отклонения от заданного режима, целесообразно использование контрольных карт способных обнаруживать и небольшие отклонения от заданного режима.

Под указанные требования к контрольным картам, как показал их анализ, одной из лучших при обработке лабораторных анализов для предупреждения выхода качественного показателя за допустимые границы показала себя карта экспоненциально взвешенного скользящего среднего (Exponentially Weighted Moving Average – EWMA) [3] и разработанная на ее основе карта для предупреждения сверхнормативной волатильности показателя: EWMV (Exponentially Weighted Moving Variance) [4].

Коррелированность между собой последовательно выполняемых лабораторных анализов качественного показателя резко снижает качество работы любых контрольных карт. Известно два основных подхода к устранению эффекта автокорреляций:

1) построение контрольных карт по исходным значениям качественных показателей с контрольными границами, при расчете которых учитывается наличие автокорреляций [5];

2) путем формирования контрольной карты не по исходным лабораторным анализам, а по ошибкам получаемых прогнозов анализов в моменты получения результатов прогноза [6].

4. Целесообразность совместного применения приведенных алгоритмов в математическом обеспечении ЛИМС

Совместная система применения приведенных алгоритмов за процессом поведения качественного показателя во времени по его дискретным лабораторным анализам заключается в построении двух графиков, сигнализирующих оператору о текущем и прогнозном соблюдении качественным показателем границ заданного ему диапазона.

1) На первый график наносятся значения лабораторных анализов наблюдаемого качественного показателя; заданные для него границы диапазона, из которых его значе-

ния не должны выходить; значения статистического прогноза до следующего анализа; доверительный интервал прогноза.

2) На втором графике отображаются значения используемой в ЛИМС контрольной карты, построенной по ошибкам получаемых статистических прогнозов.

В результате оператору представляется следующая информация:

- выход доверительных интервалов прогноза значения качественного показателя за границы заданного технологом диапазона, указывающий на увеличение вероятности выхода фактических значений показателя за эти границы;

- выход фактического значения показателя за доверительные интервалы прогноза;

- прогноз значения следующего лабораторного анализа показателя по контрольной карте.

Отметим следующие особенности применения рассмотренных алгоритмов:

- контрольная карта, построенная по вычисленным ошибкам прогноза следующего анализа, может не реагировать на выход доверительных интервалов прогноза за технологические границы, если на этом участке прогноз наблюдаемого процесса имеет высокую точность;

- выход фактического значения показателя за доверительные интервалы прогноза может служить сигналом о возникшем нарушении стабилизации заданного режима, только, если он подтверждается сигналом контрольной карты, но служит предупреждением о том, что увеличилась вероятность такого выхода.

5. Заключение

Рассмотренное, перспективное расширение функций ЛИМС, за счет включения в его программное обеспечение алгоритма статистической экстраполяции, а также необходимых контрольных карт, существенно повысит информативность оператора технологического агрегата и технолога о текущих и прогнозных значениях качественных показателей производимых агрегатом продуктов, что позволит им своевременно проводить необходимую коррекцию заданий на физические показатели режима работы агрегата и не допускать выхода значений качественных показателей за заданный технологический диапазон. Естественно, это будет стабилизировать качество выпускаемой предприятием продукции и, тем самым, повышать его конкурентность.

Список литературы

1. Вербик М. Путеводитель по современной эконометрике. М.: Научная книга, 2008.
2. Гребенюк Е.А., Ицкович Э.Л. Повышение точности оценки значений текущих качественных показателей по их дискретным лабораторным анализам использованием алгоритмов экстраполяции // Автоматизация в промышленности. 2016. № 8. С. 4-9.
3. Предварительный национальный стандарт Российской Федерации (ПНСТ 146 2016). Контрольные карты. Часть 6. EWMA-карты.
4. MacGregor J.F., Harris T.J. The exponentially weighted moving variance // Journal of Quality Technology. 1993. Vol. 25, No. 2. P. 106-118.
5. Vasilopoulos, A. V. and Stamboulis, A. P. Modification of control chart limits in the presence of data correlation. // Journal of Quality Technology. 1978, 10 (1), pp. 20-30.
6. Harris T.J., Ross W.H. Statistical process control procedures for correlated observations. // Canadian Journal of Chemical Engineering. 1991. Vol. 69, No. 1. P. 48-57.