

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОПТИМАЛЬНЫХ ПАРАМЕТРОВ АДАПТИВНОГО ВИРТУАЛЬНОГО АНАЛИЗАТОРА ДЛЯ МАССООБМЕННОГО ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА

О.Ю. Снегирев

Институт автоматики и процессов управления ДВО РАН
Россия, 690041, Владивосток, ул. Радио, 5
E-mail: 2995oleg@mail.ru

А.Ю. Торгашов

Институт автоматики и процессов управления ДВО РАН
Россия, 690041, Владивосток, ул. Радио, 5
E-mail: torgashov@iacp.dvo.ru

Ключевые слова: адаптивный виртуальный анализатор, ширина окна, массообменный технологический процесс, критерий выбора.

Аннотация: Рассматривается задача выбора оптимального значения ширины окна адаптивного виртуального анализатора, функционирующего по принципу «движущегося окна» на примере массообменного (реакционно-ректификационного) технологического процесса. Рассмотрены различные критерии выбора оптимального значения ширины окна, а также векторный критерий. Приведены результаты сравнительного анализа оптимальных параметров адаптивного виртуального анализатора на основе экспериментальных данных.

1. Введение

В настоящее время при оценке качества выходных продуктов ректификационных установок используются данные аналитического (лабораторного) контроля и результаты с измерительных средств и комплексов (например, поточных анализаторов), входящих в структуру АСУ ТП [1, 2]. Однако результаты анализов, получаемых в заводских лабораториях, не всегда обладают необходимым уровнем полноты и оперативности, поэтому не могут использоваться для управления качеством в реальном времени. Для решения данной проблемы на производстве используют виртуальные анализаторы [3], позволяющие оценить качество выходных продуктов по результатам измерений технологических переменных (расходы потоков, температура, давление и др.). В связи с изменением параметров технологического объекта во времени, для более качественной оценки качества выходного продукта, следует периодически подстраивать параметры виртуального анализатора [4, 5], однако вопросы выбора оптимальных параметров алгоритма подстройки практически не рассматривались. В настоящей работе рассматриваются вопросы оптимального выбора ширины адаптивного виртуального анализатора по различным критериям.

2. Описание технологического процесса и постановка задачи

В качестве объекта исследований рассматривается массообменный (реакционно-ректификационный) технологический процесс (МТП) [6]. Особенность массообменного технологического процесса заключается в совместном протекании обратимой химической реакции с частичным или практически полным разделением образующейся смеси посредством ее ректификации. Продуктом МТП является метил-трет-бутиловый эфир (МТБЭ), который получил широкое применение в производстве высокооктановых бензинов, при этом является нетоксичным компонентом. Для его получения используются метанол и изобутилен, поступающий с бутан-бутиленовой фракции (ББФ). Схема технологической установки получения МТБЭ представлена на рис. 1. 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, для прогнозирования содержания МВБЭ в выходном продукте, в качестве регрессоров использовали измеряемые технологические параметры: $u^{(1)}$ – расход МТБЭ (F_1); $u^{(2)}$ – расход отработанного ББФ (F_2); $u^{(3)}$ – расход ББФ в РФ (F_3); $u^{(4)}$ – расход орошения К-1 (F_4); $u^{(5)}$ – расход метанола на форконтакт (F_5); $u^{(6)}$ – расход реакционной массы, поступающей в К-2 (F_6); $u^{(7)}$ – давление верха К-1 (P_1); $u^{(8)}$ – температура в среднем слое катализатора РС (T_1); $u^{(9)}$ – температура в среднем слое катализатора РС (T_2).

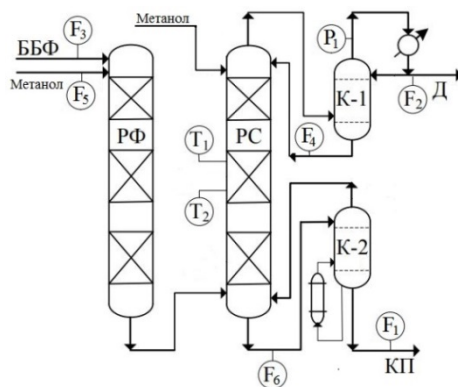


Рис. 1. Технологическая схема массообменного (реакционно-ректификационного) процесса.

Известны несколько подходов к построению адаптивных виртуальных анализаторов [7]. В данной работе используется метод «движущегося окна». В большинстве случаев движущееся окно состоит из фиксированного количества последних наблюдений, поскольку они считаются наиболее актуальными. В зависимости от количества наблюдений в наборе данных для адаптации (ширина окна адаптивного виртуального анализатора) может изменяться качество адаптированной модели, следовательно, будет изменяться и качество оценки качества выходного продукта.

Интервал наблюдений по времени от 1 до N разбивается на интервалы инициализации и работы виртуального анализатора. Длина интервала инициализации равна значению ширины окна виртуального анализатора.

На k -ом шаге ($k \in \{h+1, \dots, N\}$) на основе обучающей выборки, содержащей с $k-h+1$ по k наблюдение входных и выходной переменных, строится регрессионная модель методом робастной регрессии, с параметрами:

$$\hat{B}_k^h = \{\hat{a}_k, \hat{b}_k^{(1)}, \dots, \hat{b}_k^{(m)}\}.$$

Затем полученная модель используется для прогнозирования значения выходной переменной на $k+1$ шаге по полученным значениям входных переменных $\{u_{k+1}^{(1)}, \dots, u_{k+1}^{(m)}\}$:

$$\hat{y}_{k+1|\hat{B}_k^h} = \hat{a}_k + \sum_{i=1}^m \hat{b}_k^{(i)} u_{k+1}^{(i)}.$$

При получении нового измеренного значения выходной переменной, в обучающую выборку виртуального анализатора включают $(k+1)$ наблюдение и исключают $(k+1-h)$ наблюдение выходной и входных переменных, рассчитываются параметры регрессионной модели для новой обучающей выборки \hat{B}_{k+1}^h , и выполняется последовательность действий описанная выше.

Решается задача выбора оптимального значения ширины окна h в смысле различных критериев.

3. Критерии и выбор оптимальной ширины движущегося окна

В реальных условиях часто используют простое правило для определения следующее ширины окна (h_0)

$$h_0 = m \cdot 10,$$

где m – количество входных переменных модели.

Для выбора оптимального значения ширины окна виртуального анализатора можно использовать критерий отражающий качество адаптивного виртуального анализатора через *ошибку прогнозирования значения выходной переменной на один такт* (средне-квадратичная ошибка – $RMSE$):

$$J_{RMSE} = \frac{1}{N-M} \sqrt{\sum_{k=M+1}^N (y_k - \hat{y}_{k|\hat{B}_{k-1}^h})^2},$$

где y_k – значение выходной переменной в k момент времени; $\hat{y}_{k|\hat{B}_{k-1}^h}$ – прогноз значения выходной переменной в k -ый момент времени на основе модели с вектором параметров \hat{B}_{k-1}^h . Оптимальной ширине окна виртуального анализатора будет соответствовать ширина окна, при которой значение критерия ошибки прогнозирования будет минимальным.

При выборе оптимального значения ширины окна виртуального анализатора можно использовать критерий в виде разности 1 и коэффициента детерминации:

$$J_{R^2} = 1 - R^2 = \frac{\sum_{k=M+1}^N (y_k - \hat{y}_{k|\hat{B}_{k-1}^h})^2}{\sum_{k=M+1}^N (y_k - \bar{y})^2},$$

где \bar{y} – среднее арифметическое значений выходной переменной.

Оптимальной ширине окна виртуального анализатора будет соответствовать ширина окна, при которой значение критерия J_{R^2} будет минимальным.

Для выбора оптимальной ширины окна адаптивного виртуального анализатора можно использовать критерий отражающий изменчивость параметров регрессионной модели в течение передвижения обучающей выборки по ряду данных. Для определения изменчивости параметров регрессионной модели используется среднеквадратическое отклонение оценок параметров модели:

$$S_{\hat{b}_h^{(i)}} = \sqrt{\frac{1}{N-M} \sum_{k=M+1}^N (\hat{b}_{k,h}^{(i)} - \bar{b}_h^{(i)})^2},$$

где $\hat{b}_{k,h}^{(i)}$ – i -ый параметр регрессионной модели в k -ый момент времени при ширине окна виртуального анализатора h , $\bar{b}_h^{(i)}$ – среднее арифметическое значений i -ого параметра регрессионной модели при передвижении виртуального анализатора с шириной окна h .

В качестве еще одного критерия выбора оптимального значения ширины окна рассмотрим сумму среднеквадратических отклонений оценок параметров модели (критерий изменчивости параметров модели):

$$J_{\hat{B}} = \sum_{i=0}^m S_{\hat{b}_h^{(i)}}.$$

Предложен также векторный критерий (свертка критериев):

$$J = \tilde{J}_{RMSE} + \tilde{J}_{R^2} + \tilde{J}_{\hat{B}},$$

где $\tilde{J}_{()}$ – нормированное значение соответствующего критерия.

На рис. 2 представлены график изменения значений вышеописанных критериев от ширины окна адаптивного виртуального анализатора по концентрации МВБЭ и отмечены значения ширины окна, для которых значения критериев минимальны (Таблица 1).

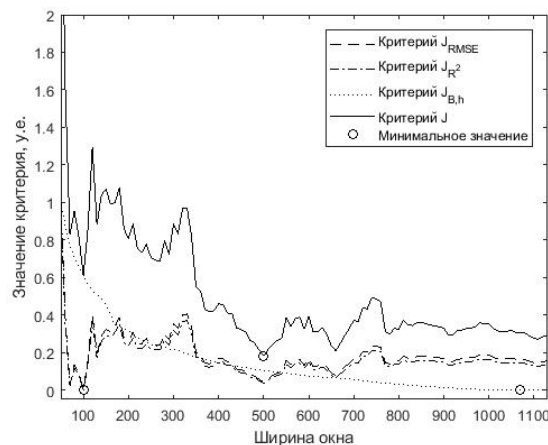


Рис. 2. Значения критериев для выбора оптимальной ширины окна адаптивного виртуального анализатора.

При расчете векторного критерия выполнена нормировка входящих в него критериев.

Таблица 1. Оптимальная ширина окна, среднеквадратичная ошибка и коэффициент детерминации для различных критериев функционирования адаптивного виртуального анализатора

Критерий	J_{RMSE}	J_{R^2}	$J_{\hat{B}}$	J
Оптимальная ширина окна	100	100	1070	500
Среднеквадратичная ошибка $RMSE$	0.09787	0.09787	0.16121	0.09924
Коэффициент детерминации R^2	0.60191	0.60191	0.55751	0.59063

4. Заключение

При исследовании различных критериев выбора оптимальной ширины окна адаптивного виртуального анализатора, было установлено, что критерии J_{RMSE} и J_{R^2} имеют схожее поведение, их оптимальные значения совпадают при одном и том же значении ширины движущегося окна. Критерий изменчивости параметров является убывающей функцией, его оптимальное значение наблюдается при ширине окна близкой к верхней границе интервала. Векторный критерий выражает компромисс между критериями и может быть использован, если при выборе оптимального значения ширины окна ставится условие учета изменчивости параметров во время функционирования адаптивного виртуального анализатора.

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

Список литературы

1. Мусаев А.А. Виртуальные анализаторы: концепция построения и применения в задачах управления непрерывными ТП // Автоматизация в промышленности. 2003. № 8. С. 28-44.
2. Бахтадзе Н.Н. Виртуальные анализаторы (идентификационный подход) // Автоматика и телемеханика. 2004. № 11. С. 3-24.
3. Дозорцев В.М., Ицкович Э.П., Кнеллер Д.В. Усовершенствованное управление технологическими процессами (АРС): 10 лет в России // Автоматизация в промышленности. 2013. № 1. С. 12-19.
4. Shao W., Tian X. Adaptive soft sensor for quality prediction of chemical processes based on selective ensemble of local partial least squares models // Chemical Engineering Research and Design. 2015. Vol. 95. P. 113-132.
5. Kaneko H., Funatsu K. Moving window and just-in-time soft sensor model based on time differences considering a small number of measurements // Industrial & Engineering Chemistry Research. 2015. Vol. 54 (2). P. 700-704.
6. Климченко В.В., Торгашов А.Ю., Самогылова С.А. Модель с обратной связью для прогнозирования качества продукта совмещенного массообменного технологического процесса // Информатика и системы управления. 2017. № 4 (54). С. 55-61.
7. Kadlec P., Grbic R., Gabrys B. Review of adaptation mechanisms for data-driven soft sensors // Computers and Chemical Engineering. 2011. Vol. 35. P. 1-24.