

Прогнозирование и управление качеством битумов на основе формальных моделей

С.И. Сташков, А.Г. Шумихин, П.Ю. Сокольчик,

А.С. Ширкунов, Д.А. Юрков

*Пермский национальный исследовательский политехнический
университет, г. Пермь*

Аннотация: Важной функцией АСУ ТП является возможность прогноза и управления качеством продукции. Реализация этих функций может быть выполнена с помощью формальных моделей, которые позволяют производить быструю перенастройку технологического процесса при изменении компонентного состава сырья, смене требований к характеристикам продукции и т.п. Применительно к прогнозу и управлению показателями качества дорожных и строительных битумов рассмотрены методы получения формальных моделей, связывающих показатели качества битумов с технологическими параметрами их производства, как для классических уравнений регрессии, так и для формальных нейронных сетей. Методика получения таких моделей отработана на абстрактных зависимостях с дальнейшей адаптацией к производству битумов. В АСУ ТП, по полученным формальным моделям, может решаться как прямая задача прогноза показателей качества подстановкой входных технологических параметров на вход модели, так и обратная задача с применением методов нелинейного программирования для минимизации функций отклонений значений параметров качества, полученных по модели от целевых значений, заданных оператором-технологом.

Ключевые слова: битумы, показатели качества, прогноз качества, управление качеством, формальные модели.

Введение

Для технологических процессов получения смесевых композиций, являющихся одной из ключевых стадий в нефтепереработке, важнейшими задачами являются подбор рецептуры и значений технологических параметров для получения продукции с требуемыми значениями показателей качества и управление ими при производстве. Для решения этих задач можно использовать формальные аппроксимационные модели, связывающие показатели качества исходного сырья и технологические параметры с показателями качества готовой продукции вида

$$\vec{y} = \vec{f}(\vec{x}), \quad (1)$$

где \vec{y} – вектор показателей качества готовой продукции, \vec{x} – показатели качества сырья и технологические параметры.

В качестве таких формальных моделей для технологического процесса производства битумов можно использовать, например, регрессионные многофакторные или нейросетевые модели [1 – 4].

Технология получения битумов

Схема установки производства битумов с окислительной колонной полного заполнения с выносным сепаратором представлена на рис. 1 [5].

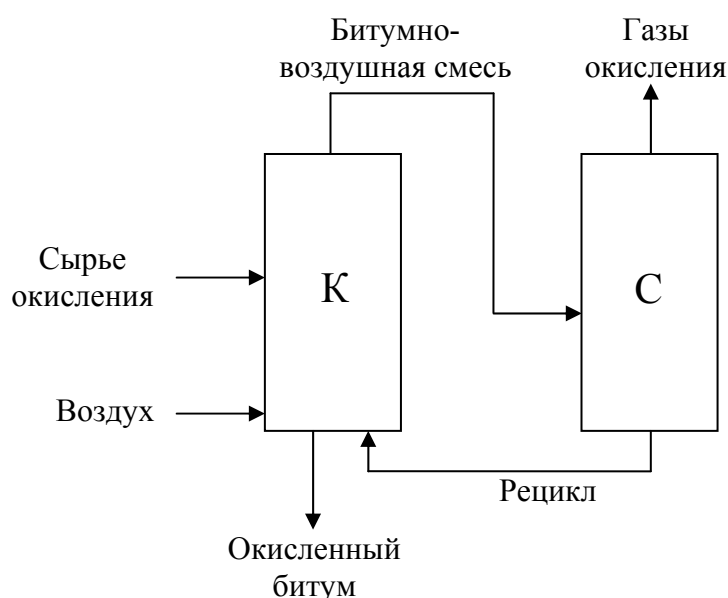


Рис.1. – Схема работы окислительной колонны полного заполнения с выносным сепаратором

Горячее жидкое сырье поступает в среднюю часть колонны К, в нижнюю часть которой компрессором через распределительное устройство подается воздух. Барботирующий через слой жидкой реакционной смеси воздух обеспечивает ее интенсивное перемешивание и окисление. Полученная битумно-воздушная смесь с верхней части колонны перетекает в среднюю часть сепаратора С, где от жидкой части отделяются газы окисления (состоят из азота, непрореагировавшего кислорода и углеводородных продуктов разложения сырья). Жидкий продукт с низа

сепаратора (рецикл) возвращается насосом в нижнюю часть колонны К. Также с низа данной колонны происходит отбор готового жидкого нефтяного битума. Температурный режим в окислительной колонне поддерживается за счет реакций окисления сырья кислородом.

Среди различных нормируемых качественных характеристик нефтяных битумов разного назначения и марок выделяются два основных параметра, которые регламентированы для любых нефтяных битумов, – температура размягчения и пенетрация при 25°C.

Температура размягчения характеризует стойкость битума к воздействию температуры без перехода в текучее состояние (в частности, для дорожных битумов она определяет стойкость получаемого асфальтобетона к колееобразованию при высоких температурах). Пенетрация при 25°C (глубина проникновения иглы в битум при стандартизированных условиях и температуре 25°C) отвечает за пластичность продукта (применительно к дорожным битумам характеризует стойкость дорожного полотна к деформациям и склонность к трещинообразованию).

Для построения моделей, связывающих технологические параметры с показателями качества битумов, выбраны семь входных параметров: x_1 – расход гудрона, м³/ч; x_2 – расход асфальта, м³/ч; x_3 – расход слопа, м³/ч; x_4 – расход воздуха, м³/ч; x_5 – температура верха колонны, °C; x_6 – уровень в сепараторе, %; x_7 – остаточное содержание кислорода в сепараторе, %.

В качестве выходных параметров использованы два показателя качества битума: y_1 – температура размягчения по КиШ, °C; y_2 – пенетрация при 25°C, 0,1 мм.

Выбор формы модели связи технологических параметров и показателей качества битумов

Для выбора формы модели связи выходных переменных процесса получения битума y_1 и y_2 с входными переменными $x_j, j = \overline{1,7}$ с использованием следующей полиномиальной зависимости вида:

$$y_i = a_{i0} + \sum_{j=1}^7 a_{ij} x_j + \sum_{\substack{j=1 \\ k=j}}^7 a_{ijk} x_j x_k + \sum_{\substack{j=1 \\ k=j \\ m=k}}^7 a_{ijkm} x_j x_k x_m, \quad i = \overline{1,2}, \quad (2)$$

формально имитирующей связи «технологические параметры – показатель качества», искусственно сгенерирована выборка экспериментальных данных. Для генерации значений входных переменных использован закон равномерного распределения случайной величины на интервалах $[x_{j \min}; x_{j \max}]$, представленных в табл. 1.

Таблица №1

Интервалы для генерируемых входных переменных модели

Входная переменная	Минимальное значение	Максимальное значение
x_1	10	30
x_2	0	12
x_3	9	10
x_4	10	30
x_5	15	50
x_6	15	50
x_7	1	3

Для варьируемых случайным образом коэффициентов $\overline{a_i}, (i = 1,2)$ уравнения (2) заданы интервалы, представленные в табл. 2.

Таблица №2

Ограничения для коэффициентов модели

Коэффициент	Минимальное значение	Максимальное значение
a_{i0}	30	60
a_{ij}	-1	1
a_{ijk}	-0,03	0,03
a_{ijkl}	0	0

Таким образом, сформированные массивы переменных содержат семь входных и две выходных переменных. Для имитации промышленных условий на коэффициенты модели и переменные накладывается шум. Так, например, шумы выходных переменных имитируют разброс показателей качества, связанные с дисперсией лабораторных измерений, помехами в измерительных каналах и т.п., шумы входных переменных – разбросы показателей качества исходного сырья, нестабильность технологических параметров и т. п. Для генерации шумов использовалось нормальное Гауссовское распределение.

Для имитационного вычислительного эксперимента производилась генерация выборки входных переменных, содержащих по 100 их значений, имитирующих технологическую ситуацию.

Экспериментальные выборки построены для случаев:

- 1) отсутствия «промышленных» шумов;
- 2) наложения нормально распределенных шумов на значения выходных параметров \vec{y} с максимальной величиной отклонения 3% от значения y ;
- 3) наложения нормально распределенных шумов на коэффициенты \vec{a} с максимальной величиной отклонения 1% от значения a ;

4) наложения нормально распределенных шумов на коэффициенты \vec{a} с максимальной величиной отклонения 1% от значения a и наложения нормально распределенных шумов на значения выходных параметров \vec{y} с максимальной величиной отклонения 3% от значения y ;

5) наложения нормально распределенных шумов на значения входных параметров \vec{x} с максимальной величиной отклонения 5% от значения x , наложения нормально распределенных шумов на коэффициенты \vec{a} с максимальной величиной отклонения 1% от значения a и наложения нормально распределенных шумов на значения выходных параметров \vec{y} с максимальной величиной отклонения 3% от значения y .

Для полученной выборки 80% ее представителей использовалось для параметризации модели, 20% представителей – в качестве тестовых для проверки адекватности модельных зависимостей.

Произведено нормирование полученных по формуле (2) данных, имитирующих значения технологических параметров и показателей качества, двумя способами. Первый способ нормирования – линейное нормирование, проводимое по диапазону в соответствии с выражением:

$$\hat{x}_j = \frac{x_j - x_{j\min}}{x_{j\max} - x_{j\min}}, j = \overline{1,7}, \quad (3)$$

где $x_{j\min}$ – минимальное значение j -й переменной; $x_{j\max}$ – максимальное значение j -й переменной.

Второй способ – статистическое нормирование, проводимое согласно выражению:

$$\hat{x}_j = \frac{x_j - m_{x_j}}{\sigma_{x_j}}, j = \overline{1,7}, \quad (4)$$

где m_{x_j} – оценка математического ожидания, σ_{x_j} – оценки средне-квадратического отклонения.

Построение формальной регрессионной модели методом наименьших квадратов

Метод получения формальных моделей в матричной форме описан в [6], где методом наименьших квадратов определяются коэффициенты уравнений регрессии вида:

$$y_n = b_0x_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + \dots + b_kx_k, \quad (5)$$

где x_0 – фиктивная переменная, равная 1.

Зависимости вида (5) получены для формальных данных с наложением шумов, как было описано выше.

Проверка адекватности уравнений по данным вычислительного эксперимента их генерации проведена по критерию Фишера. Результаты проверки представлены в таблице 3. При этом табличное значение критерия Фишера $F_{\text{табл}} = 2,66$.

Таблица 3

Значения критерия Фишера для y_1, y_2

Величины, на которые наложен шум	Без нормирования	Линейное нормирование	Статистическое нормирование
Без шумов	17.5858 71.1870	17.5858 71.1870	17.5858 71.1870
y_i	15.6393; 34.2483	15.6393; 34.2483	15.6393; 34.2483
a_{ijkm}	17.5174; 71.8702	17.5174; 71.8702	17.5174; 71.8702
a_{ijkm}, y_i	15.4438; 36.2412	15.4438; 36.2412	15.4438; 36.2412
x_j, a_{ijkm}, y_i	16.7377; 34.8969	16.7377; 34.8969	16.7377; 34.8969

Обработка результатов показала высокую сходимость результатов, полученных при нормирования исходных данных двумя способами. Следовательно, оба способа нормирования данных можно считать применимыми для построения регрессионных моделей.

Построение модели на основе формальных нейронных сетей

Для построения формальной зависимости «технологические параметры – показатели качества продукции» использованы классические формальные слоистые нейронные сети прямого распространения сигнала [7 – 10]. Модель каждого нейрона такой сети имеет вид:

$$\begin{cases} S_{jk} = \sum_{i=1}^n x_i w_{ijk}; \\ N_{jk} = f(S_{jk}), \end{cases} \quad (6)$$

где x_i – входы формального нейрона, $i = \overline{1, n}$; w_{ijk} – весовой коэффициент i -го входа k -го нейрона в слое, $k = \overline{1, n_l}$ (n_l – количество слоев нейронной сети); f – функция активации нейрона; N_{jk} – выход j -го нейрона k -го слоя. В качестве функции активации использовались логистическая функция (сигмоид) вида:

$$f(x) = \frac{1}{(1 + e^{-ax})} \quad (7)$$

или гиперболический тангенс (сигмоидальная) вида:

$$f(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}}. \quad (8)$$

Для описания связей переменных по генерируемой моделью (2) данным произведен подбор парадигмы нейросети и метода ее обучения. Проверялась адекватность аппроксимации нейронной сетью значений модели (2) по критерию Фишера. При этом для нейронной сети изменялось количество скрытых слоев $N_{сл}$ от 1 до 5, количество нейронов в скрытых N_n слоях принималось одинаковым и изменялось от 7 до 11, используемые функция активации – логистическая (L) и тангенциальная (T) для всех

скрытых нейронов сети. Методы обучения – на основе метода Левенберга-Марквардта (lm) и на основе метода обратного распространения ошибки с использованием Байесовской регуляризации (br).

Для формальных данных, генерируемых моделью (2), проведен подбор парадигмы нейронной сети, выбор метода обучения и уровня погрешности как критерия останова обучения. Результаты обучения нейронных сетей оценивались по значению критерия Фишера, рассчитанному для тестовой выборки. Результаты подбора парадигмы нейросети представлены в табл. 4.

Таблица №4

Результаты подбора парадигмы нейросети

Количество скрытых слоев $N_{сл}$	Количество нейронов в скрытом слое N_n	Функция активации	Метод обучения	Значение критерия Фишера для $(y_1; y_2)$ при различных значениях ошибки обучения		
				0,001	0,0001	0,00001
1	7	L	lm	-	(92.37;23.96); (54.04;154.66); (99.54;87)	-
3	7	L	lm	-	(45.63;104); (93.89;45.4); (44.09;37.21)	-
5	7	L	lm	-	(20.91;14.73); (39.56;27.23); (17.04;27.63)	-
1	9	L	lm	-	(118.06;138.67); (73.92;152.89); (90.79;117.76)	-
1	11	L	lm	-	(26.74;23.14); (72.72;34.27); (7.79;31.09)	-
1	9	T	lm	-	(134.24;227.89); (117.78;87.51); (153.97;97.79)	-

1	9	L	br	-	(209.14;199.57); (185.89;181.11); (167.69;183.47)	-
1	9	T	br	(101.04;133.6); (43.83;88.46); (49.2;91.37)	(205.75;187.81); (216.88;211.64); (305.29;237.34)	(134.83;232.67); (204.25;250.52); (226.19;226.6)

Из табл. 4 следует, что наилучшие результаты продемонстрировала нейросеть с одним скрытым слоем, содержащим девять формальных нейронов, тангенциальной функцией активации и методом обучения на основе обратного распространения ошибки с использованием Байесовской регуляризации. Данная нейронная сеть проверена на выборке с наложенными помехами и показала следующий результат оценки ее адекватности: модель имеет значения F -отношения для y_1 и y_2 , равные 112,28 и 35,19, соответственно, при табличном значении критерия Фишера $F_{\text{табл}} = 1,4$.

Нейронная сеть с такой парадигмой и была принята для обучения на данных технологического процесса производства битума в качестве моделей связи технологических параметров и показателей качества битумов.

Построение моделей связи технологических параметров и показателей качества битумов

Произведено нормирование экспериментальных статистических данных, полученных на производстве битумов, глубиной (числом наблюдений) 118 точек по формулам (3) и (4) для регрессионных моделей и по формуле (3) – для нейросетевой.

По методике [6] построены регрессионные модели. Проверена значимость коэффициентов уравнений регрессии по критерию Стьюдента для доверительной вероятности $p = 0,95$ с отсеиванием незначимых. С нормированием входных переменных по (3) уравнения регрессии имеют вид:

$$\begin{cases} y_1 = 0,4135 - 0,12989x_3 + 0,74127x_5; \\ y_2 = 0,25318 + 0,24153x_1 + 0,19735x_3 - 0,253234x_4 - 0,35447x_5, \end{cases} \quad (9)$$

с нормированием по (4) – вид:

$$\begin{cases} y_1 = 0,14835x_3 + 0,80918x_5; \\ y_2 = 0,29635x_1 + 0,30373x_3 - 0,2811x_4 - 0,52142x_5, \end{cases} \quad (10)$$

Проверка адекватности дала для моделей (9) и (10) значения критерия Фишера равные 7,7 и 2,85 при $F_{\text{табл}} = 2,0299$.

Для статистической экспериментальной выборки, полученной на производстве битумов одного из предприятий нефтепереработки, построена нейросетевая модель с выбранной выше парадигмой. При этом производилось линейное нормирование входных переменных согласно (3). Адекватность обученной нейронной сети проверена по критерию Фишера и дала результат 4,51 и 4,76 при $F_{\text{табл}} = 2,06$.

Для диапазона значений входных параметров, используемых на производстве, лучший результат показала формальная нейросетевая модель.

Использование формальной модели для подбора технологических параметров

Полученные модельные зависимости (9), (10), а также нейросетевая модель могут быть использованы как для задач прогноза, так и управления показателями качества.

Задача управления реализуется с использованием поисковых методов нелинейного программирования. При этом минимизируется квадратичная функция ошибки в следующей оптимизационной задаче:

$$\left\{ R(\vec{x}) = \sqrt{\sum_{i=1}^2 (y_{zi} - y_i(\vec{x}))^2} \rightarrow \min_{\vec{x}} \left| \vec{x}_{\min} \leq \vec{x} \leq \vec{x}_{\max} \right. \right\} \rightarrow \vec{x}^{opt}, \quad (11)$$

где y_{zi} - целевое заданное значение i -го показателя качества; $y_i(\vec{x})$ - рассчитанное по модели значение показателя качества при текущей комбинации входных параметров \vec{x} .

Проверка работоспособности поискового алгоритма решения задачи (11), реализующего метод наискорейшего спуска, осуществлялась на формальных данных, полученных по (5). Для целевых значений $\vec{y}_{zi} = (32; 75)$, $i = 1;2$ при ограничениях

$$\left\{ \begin{array}{l} 10 \leq x_1 \leq 30 \\ 0 \leq x_2 \leq 12 \\ 9 \leq x_3 \leq 10 \\ 10 \leq x_4 \leq 30 \\ 15 \leq x_5 \leq 50 \\ 15 \leq x_6 \leq 50 \\ 1 \leq x_7 \leq 3 \end{array} \right. \quad (12)$$

получены значения входных переменных

$$\vec{x}^{opt} = col(20,94; 8,41; 9,5; 17,07; 21,495; 21,84; 2,0346). \quad (13)$$

Рассмотренная методика разработки последовательности подбора значений технологических параметров для реализации в технологическом режиме процесса апробирована для данных производства битумов.

Технологам задаются значения показателей качества битума. Так, например, значения температуры размягчения по КиШ и пенетрация при 25°C для дорожных битумов составляет $y_1 = 45$, $y_2 = 110$, соответственно, а для строительных битумов $y_1 = 57$, $y_2 = 30$, соответственно, при ограничениях:

$$\left\{ \begin{array}{l} 4 \leq x_1 \leq 24 \\ 2 \leq x_2 \leq 10 \\ 1 \leq x_3 \leq 8 \\ 1200 \leq x_4 \leq 3500 \\ 219 \leq x_5 \leq 280 \\ 21 \leq x_6 \leq 57 \\ 0 \leq x_7 \leq 3 \end{array} \right. \quad (14)$$

Получены значения входных технологических параметров для дорожных битумов

$$\vec{x}^{opt} = col(10; 3; 4,41; 1417,65; 226,84; 50; 2,2) \quad (15)$$

и для строительных битумов

$$\vec{x}^{opt} = col(10; 3; 3,89; 2364,23; 278,6; 50; 2,2). \quad (16)$$

Результаты апробации методики разработки алгоритмов прогноза и управления показателями качества битумов свидетельствуют о ее работоспособности. Методика может быть применена и для других производств нефтепереработки.

Литература

1. Гельфанд Я.Е., Яковис Л.М., Дороганич С.К. Управление химико-технологическими процессами приготовления многокомпонентных смесей / Под ред. Гельфанда Я.Е. – Л.: Химия, 1988. – 288 с.
2. Леонтьев С.В., Курзанов А.Д., Радыгин Р.В. Комплексный подход при обосновании факторов управления качеством процесса структурообразования неавтоклавнога газобетона // Инженерный вестник Дона, 2018, №1 URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n1y2018/4685.
3. Abhinav G., Prashant M. Utilizing big data for batch process modeling and control // Computers & Electrical Engineering, Volume 72, November 2018, PP. 237-247.
4. Process Modelling and Univariate Analysis of Comminution Circuits / T. Song, T. H. Yang, J. W. Zhou, Q. K. Wang // IFAC-PapersOnLine, Volume 51, Issue 21, 2018, PP. 19-23.
5. Колбановская А.С., Михайлов В.В. Дорожные битумы. – М.: Транспорт, 1973. – 264 с.



6. Ахназарова С.Л., Кафаров В.В. Методы оптимизации эксперимента в химической технологии. Учеб. пособие. 2-е изд., перераб. и доп. – М.: Высш. шк, 1985. – 327 с.

7. Полевщиков И.С., Файзрахманов Р.А. Автоматизированное управление тестированием программных систем с применением нейронных сетей // Инженерный вестник Дона, 2018, №4 URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n4y2018/5283

8. Круглов В.В., Дли М.И., Голунов Р.Ю. Нечёткая логика и искусственные нейронные сети. – М.: Физматлит, 2001. – 221с.

9. Круглов В.В., Борисов В. В. Искусственные нейронные сети. Теория и практика. – 2-е изд., стереотип. – М.: Горячая линия-Телеком, 2002. – 382 с.

10. Хайкин С. Нейронные сети: полный курс, 2-е издание: Пер. с англ. – М.: Издательский дом «Вильямс», 2006. – 1104 с.

References

1. Gel'fand YA.E., YAkovis L.M., Doroganich S.K. Upravlenie khimiko-tekhnologicheskimi protsessami prigotovleniya mnogokomponentnykh smesey [Management of chemical-technological processes for the preparation of multicomponent mixtures]. Ed. Ya.E.Gel'fanda. Leningrad: Khimiya, 1988, 288 p.

2. Leont'ev S.V., Kurzanov A.D., Radygin R.V. Inženernyj vestnik Dona (Rus), 2018, №1 URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n1y2018/4685.

3. Abhinav G., Prashant M. Computers & Electrical Engineering, Volume 72, November 2018, pp. 237-247.

4. Song T., Yang T. H., Zhou J. W., Wang Q. K. IFAC-PapersOnLine, Volume 51, Issue 21, 2018, pp. 19-23.

5. Kolbanovskaya A.S., Mikhaylov V.V. Dorozhnye bitумы [Road bitumens]. Moscow: Transport, 1973, 264 p.



6. Akhnazarova S.L., Kafarov V.V. Metody optimizatsii eksperimenta v khimicheskoy tekhnologii [Methods of experiment optimization in chemical technology]. 2nd ed. Moscow: Vysshaya shkola, 1985, 327 p.
7. Polevshchikov I.S., Fayzrakhmanov R.A. Inženernyj vestnik Dona (Rus), 2018, № 4. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n4y2018/5283.
8. Kruglov V.V., Dli M.I., Golunov R.Yu. Nechetkaya logika i iskusstvennye neyronnye seti [Fuzzy logic and artificial neural networks]. Moscow: Fizmatlit, 2001, 221 p.
9. Kruglov V.V., Borisov V. V. Iskusstvennye neyronnye seti. Teoriya i praktika [Artificial neural networks. Theory and practice]. 2nd ed. Moscow: Goryachaya liniya-Telekom, 2002, 382 p.
10. Khaykin S. Neyronnye seti: polnyy kurs [Neural networks: a full course]. 2nd ed. Moscow: Izdatel'skiy dom «Vil'yams», 2006, 1104 p.