

## 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].

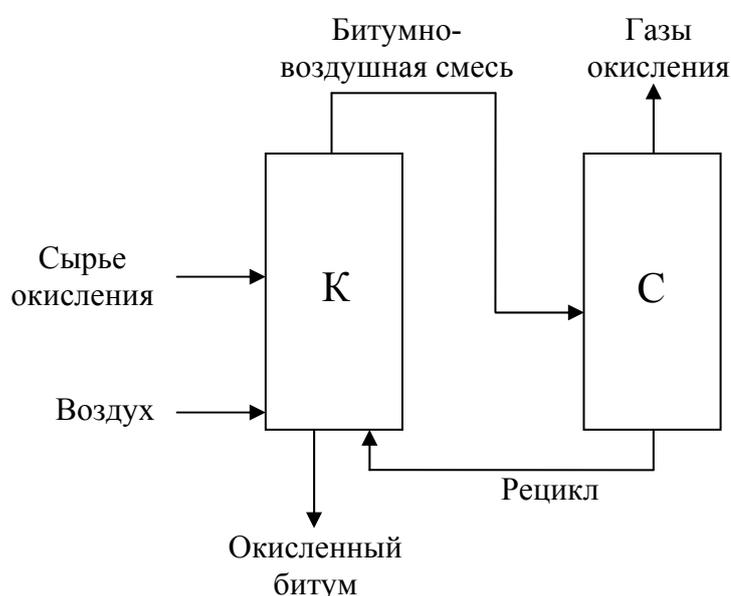


Рис.1. – Схема работы окислительной колонны полного заполнения с выносным сепаратором

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, м<sup>3</sup>/ч;  $x_2$  – расход асфальта, м<sup>3</sup>/ч;  $x_3$  – расход слопа, м<sup>3</sup>/ч;  $x_4$  – расход воздуха, м<sup>3</sup>/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,  $\sigma_{x_j}$  – 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:

$$y_n = b_0 x_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \dots + b_k x_k, \quad (5)$$

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  $25^{\circ}\text{C}$  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](http://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-tehnologicheskimi 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](http://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.