

## ПРИМЕНЕНИЕ АЛГОРИТМА АСЕ ДЛЯ ПОСТРОЕНИЯ ПРОГНОЗИРУЮЩЕЙ МОДЕЛИ РЕКТИФИКАЦИОННОЙ КОЛОННЫ

И.С. Можаровский<sup>1,2</sup>, С.А. Самотылова<sup>1</sup>, А.Ю. Торгашов<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт автоматизации и процессов управления ДВО РАН, Россия, Владивосток, [torgashov@iacp.dvo.ru](mailto:torgashov@iacp.dvo.ru)

<sup>2</sup>Владивостокский государственный университет экономики и сервиса ВГУЭС, Россия, Владивосток, [studvvsu@gmail.com](mailto:studvvsu@gmail.com)

*Аннотация.* Предложен метод построения непараметрической прогнозирующей модели с использованием алгоритма АСЕ на примере процесса ректификации производства метил-трет-бутилового эфира. Выполнен сравнительный анализ полученных результатов моделирования с известными методами. Применение АСЕ алгоритма для построения прогнозирующей модели позволяет улучшить точность оценки показателя качества выходного продукта до 40 % по критерию СКО на проверочной выборке в сравнении с методом робастной регрессии.

*Ключевые слова:* алгоритм АСЕ, прогнозирующая модель, робастная регрессия, моделирование, метил-трет-бутиловый эфир.

## APPLICATION OF THE ACE ALGORITHM FOR PREDICTIVE MODEL EVALUATION OF THE DESTILLATION COLUMN

I.S. Mozharovsky<sup>1,2</sup>, S.A. Samotylova<sup>1</sup>, A.Yu. Torgashov<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Institute of automation and control process FEB RAS, Vladivostok, Russia, [torgashov@iacp.dvo.ru](mailto:torgashov@iacp.dvo.ru)

<sup>2</sup>Vladivostok State University of Economics and Service, Vladivostok, Russia, [studvvsu@gmail.com](mailto:studvvsu@gmail.com)

*Abstract.* The method for nonparametric predictive model evaluation using the ACE algorithm is proposed. This method has been tested for the distillation process of methyl-tert-butyl ether production. Comparative analysis with regression methods are performed. The ACE algorithm, which is used for predictive model evaluation allows improving the accuracy of the estimate of the characteristic value of output product quality to 40% by the criterion of RMSE on the test sample in comparison with the robust regression.

*Keywords:* ACE algorithm, predictive model, robust regression, modeling, methyl-tert-butyl ether.

Контроль и управление показателей качества выходных продуктов ректификационных колонн в режиме реального времени является одной из важных задач в нефтеперерабатывающей и нефтехимической промышленности. В случае, когда режим работы колонны настроен неверно или изменяются внешние или внутренние возмущения, то возможна вероятность получения брака, что, в свою очередь, приводит к финансовым убыткам и временным затратам перерабатывающего завода. В настоящее время для повышения экономической эффективности предприятия актуальной становится задача управления и контроля свойств продуктов с помощью online мониторинга. Широкое применение получили прогнозирующие показатели качества выходных продуктов модели (виртуальные анализаторы ВА). Они представляют собой программно-алгоритмический комплекс, связывающий оперативно измеряемые технологические параметры (давление, расход, температура и др.) с результатами анализов заводских лабораторий. Для построения моделей (в зависимости от априорной информации возможной их структуры и имеющихся данных) существует большое количество регрессионных методов, таких как методы гребневой и робастной регрессии, проекции на латентные структуры, позволяющие использовать регрессионный анализ в условиях ошибок в наблюдениях и мультиколлинеарности входов [1]. Применение нейронных сетей, которые учитывают нелинейную составляющую в моделируемом процессе, не всегда приводит к положительному результату, так как необходима достаточно обширная обучающая выборка. Нелинейные зависимости между выходом и каждым из входов удается выявить, используя алгоритм АСЕ [2]. В связи с этим в данной работе рассматривается задача построения моделей, для прогнозирования показателей качества выходных продуктов, в условиях нелинейности процесса. Для решения поставленной задачи предлагается использовать АСЕ алго-

ритм [3] на примере построения прогнозирующей модели ВА по содержанию метанола в кубовом продукте метил-трет-бутилового эфира (МТБЭ).

Метил-трет-бутиловый эфир используется в производстве высокооктановых бензинов. Присутствующая в МТБЭ молекула кислорода способствует практически полному сгоранию топлива в двигателе, при этом выброс окиси углерода и оксидов азота на сжигание бензина в значительной степени уменьшается. Реакция получения метил-трет-бутилового эфира из изобутилена и метанола происходит в жидкой фазе в присутствии кислотной ионообменной смолы в качестве катализатора в реакторе с неподвижным слоем. Технологическая схема процесса представлена на рис. 1. Необходимо построить модель для прогнозирования содержания метанола ( $Y$ ) в выходном продукте МТБЭ. В качестве входных переменных модели, были использованы:  $x_1$  – температура низа колонны К-2, °С ( $T$ );  $x_2$  – давление низа колонны К-2, МПа<sub>г</sub> ( $P$ ).

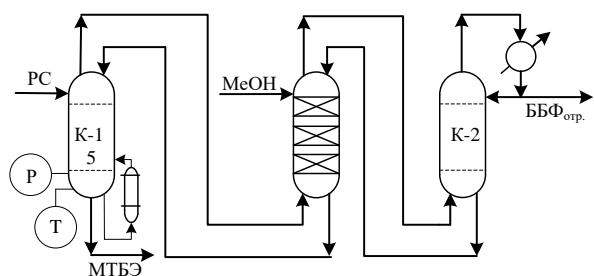


Рис. 1. Технологическая схема производства МТБЭ  
К-1 и К-2 – ректификационные колонны, РС – реакционная смесь, МТБЭ – метил-трет-бутиловый эфир, ББФотр. – отработанная бутил-бутиленовая фракция, MeOH – метанол

следующую общую форму:

$$\theta(Y) = \sum_{i=1}^p \phi_i(x_i) + \varepsilon, \quad (1)$$

где  $\theta$  – функция при переменной отклика  $Y$  и  $\phi_i$  – функции предикторов  $x_i, i = 1, \dots, p$ . Таким образом, алгоритм АСЕ замещает проблему оценки линейной функции  $p$ -мерной переменной  $X = (x_1, x_2, \dots, x_p)$  оценкой  $p$  отдельных одномерных функций  $\phi_i$  и  $\theta$  используя итеративный метод. Эти преобразования достигаются минимизацией необъясненного отклонения линейного соотношения преобразованной переменной отклика от суммы преобразованных переменных предикторов.

Для заданного набора данных, состоящего из переменной отклика  $Y$  и переменных предикторов  $x_1, x_2, \dots, x_p$  алгоритм АСЕ начинается с определения произвольных начальных преобразований  $\theta(Y), \phi_1(x_1), \dots, \phi_p(x_p)$ . Отклонение ошибки ( $\varepsilon^2$ ), которое осталось необъясненным регрессией преобразованных зависимых переменных на сумму преобразованных предикторов (при условии  $E[\theta^2(Y)] = 1$ ) [4]:

$$\varepsilon^2(\theta, \phi_1, \dots, \phi_p) = E \left\{ \left[ \theta(Y) - \sum_{i=1}^p \phi_i(x_i) \right]^2 \right\} \quad (2)$$

Минимизация  $\varepsilon^2$  в отношении  $\phi_1(x_1), \dots, \phi_p(x_p)$  и  $\theta(Y)$  вычисляется через серию минимизаций единичных функций, заданных уравнениями:

$$\phi_i(x_i) = E \left[ \theta(Y) - \sum_{j \neq i}^p \phi_j(x_j) \mid x_i \right]; \quad (3)$$

$$\theta(Y) = E \left[ \sum_{i=1}^p \phi_i(x_i) | Y \right] / \left\| E \left[ \sum_{i=1}^p \phi_i(x_i) | Y \right] \right\| \quad (4)$$

Две базовых математических операции, задействованные здесь – это условное ожидание и итеративная минимизация. Окончательные  $\phi_i(x_i), i = 1, \dots, p$  и  $\theta(Y)$  после минимизации являются оценками оптимального преобразования  $\phi_i^*(x_i), i = 1, \dots, p$  и  $\theta^*(Y)$ . В пространстве преобразования отклик и переменные предиктора соотносятся следующим образом:

$$\theta^*(Y) = \sum_{i=1}^p \phi_i^*(x_i) + \varepsilon^* \quad (5)$$

где  $\varepsilon^*$  – неустранимая ошибка с использованием АСЕ преобразований в предположении нормального распределения. Минимум ошибки регрессии  $\varepsilon^*$  и максимум коэффициента многомерной корреляции  $\rho^*$  связаны соотношением  $\varepsilon^{*2} = 1 - \rho^{*2}$ .

Для построения прогнозирующей модели предложен метод с применением АСЕ алгоритма:

*шаг 1:* на основе обучающей выборки построить непараметрическую модель с помощью описанного выше алгоритма АСЕ;

*шаг 2:* на основе полученных, на шаге 1 результатов построить кривые, связывающие каждый выбранный вход с выходом;

*шаг 3:* для проверочной строки выборки рассчитать значение выхода  $\hat{Y}$  на основе интерполированных кривых из шага 2 и значений входов данной строки выборки;

*шаг 4:* сравнить рассчитанное значение  $\hat{Y}$  с известным  $Y$  из измерений проверочной строки выборки и рассчитать критерии адекватности построенной модели.

*шаг 5* повтор шаг 3 – шаг 4.

Критериями адекватности построенных моделей выбраны коэффициент детерминации (доля объяснённой дисперсии отклонений зависимой переменной от её среднего значения)  $R^2 = 1 - \sum_i (Y_i - \hat{Y}_i)^2 / \sum_i (Y_i - \bar{Y})^2$  и среднеквадратичная ошибка  $CKO = \sqrt{\sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{Y}_i)^2 / n}$ , где  $y_i, Y_i$  – наблюдаемое значение выходной переменной,  $\hat{Y}_i$  – значение выходной переменной, предсказанное по модели,  $\bar{Y}$  – среднее значение наблюдаемой выходной переменной.

Предложенный метод был применен для промышленного технологического процесса производства метил-трет-бутилового эфира (МТБЭ). Использовали обучающую и проверочную выборки размером (1183x3) и (44x3), соответственно.

Для получения  $\hat{Y}$  из непараметрической модели, построенной на основе алгоритма АСЕ, проведем следующие преобразования:  $\theta^*(Y) = \hat{Y}$ ,  $\phi_1^*(x_1) = \phi_1^*(T)$ ,  $\phi_2^*(x_2) = \phi_2^*(P)$ . Восстановление значения  $\hat{Y}$  представлено на рис. 2.

На основе измеренных значений входов  $X$  определяем значения  $\phi_i^*(x_i), i = 1, \dots, p$ , где  $p$  – количество предикторов, и затем суммируем их. Полученная сумма даёт величину  $\theta^*(Y)$ , где  $\theta^*(Y) = \sum_{i=1}^p \phi_i^*(x_i)$ . Интерполируем сплайном две соседние точки, так как искомое значение может лежать в любом месте отрезка между

ними. Зная  $\theta^*(Y)$  делаем восстановление функции в обратную сторону (от ординаты к абсциссе), и, таким образом, находим искомую величину  $\hat{Y}$ .

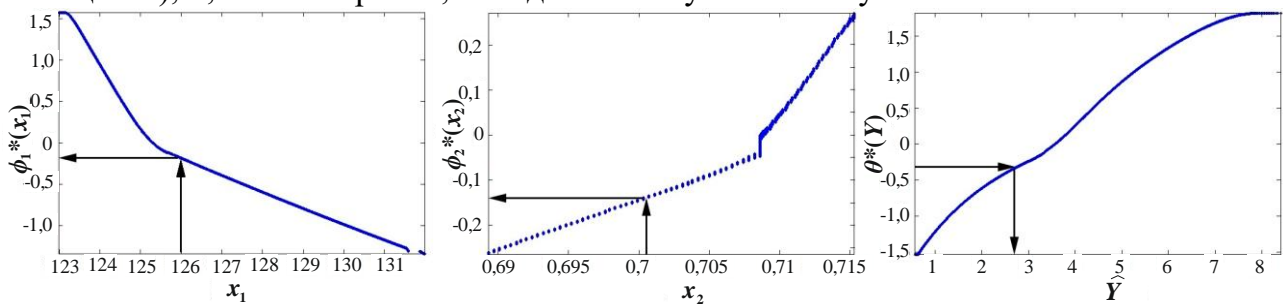


Рис. 2. Восстановление  $\hat{Y}$  из непараметрической модели, построенной на основе алгоритма ACE

Полученные результаты приведены в табл. 1 и сравнены с результатами, полученными методом наименьших квадратов (МНК), методом робастной регрессии (РР), методом гребневой регрессии (ГР), проекций на латентные (скрытые) структуры (ПЛС). Параметрическая модель, полученная методом РР, имеет вид:  $\hat{Y} = -202,6692 - 0,4312 \cdot x_1 + 368,2854 \cdot x_2$ .

Таблица 1. Сравнительный анализ методов

Метод	$R^2_{обуч}$	$R^2_{пр}$	$CKO_{обуч}$	$CKO_{пр}$
Метод наименьших квадратов	0,9310	0,3969	0,5239	0,6188
Робастная регрессия	0,7159	0,5711	1,0627	0,5219
Гребневая регрессия	0,9310	0,3974	0,5239	0,6186
Проекция на латентные структуры	0,8926	0,1372	0,6533	0,7402
Предложенный на основе алгоритма ACE	0,7633	0,8366	0,6053	0,3160

Результаты функционирования прогнозирующей модели, полученной с помощью предлагаемого алгоритма, приведены на рис. 3.

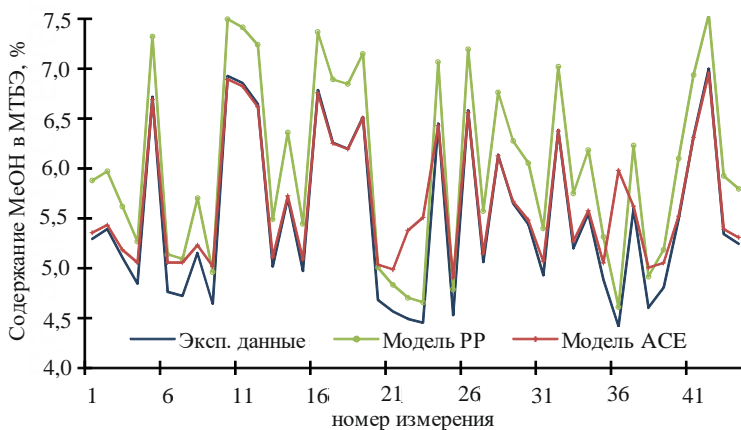


Рис. 3. Результаты функционирования прогнозирующей модели

Применение ACE алгоритма для построения прогнозирующей модели позволяет улучшить точность оценки показателя качества продукта до  $((0,5219 - 0,3160)/0,5219) \cdot 100 \approx 39,5\%$  по критерию SKO на проверочной выборке в сравнении с методом робастной регрессии, соответственно.

Работа осуществлялась при частичной финансовой под-

держке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 17-07-00235 А).

#### Библиографический список

1. Диго Г.Б., Диго Н.Б., Козлов А.В., Самотылова С.А., Торгашов А.Ю. Структурно-параметрическая идентификация моделей виртуальных анализаторов технологических объектов управления на основе робастной регрессии и информационных критериев // Автоматизация в промышленности. – 2015. №10. С. 58-62.
2. Диго Г.Б., Диго Н.Б., Можаровский И.С., Торгашов А.Ю. Анализ идентифицируемости нелинейных объектов управления слабо формализованной структуры // Информатика и системы управления. – 2012. №3(33). С. 34-46.
3. Breiman L., Friedman J. Estimating optimal transformations for multiple regression and correlation // Journal of the American Statistical Association. 1985. Vol. 80. P. 580-598.
4. Wang D., Murphy M. Estimating optimal transformations for multiple regression using the ACE algorithm // Journal of Data Science. 2004. Vol. 2. P. 329-346.