

Željka Ujević Andrijić, Nenad Bolf

ISSN 0350-350X
GOMABN 50, 3, 187 -214
Izvorni znanstveni rad / Original scientific paper
UDK 665.622.048.3 : 66-503.56 : 66.012.122

PRIMJENA SOFTVERSKIH SENZORA ZA PROCJENU KVALITETE PRODUKATA ATMOSFERSKE DESTILACIJE

Sažetak

Zbog nemogućnosti kontinuiranog mjerjenja svojstava frakcionacijskih produkata kolone za atmosfersku destilaciju, razvijeni su softverski senzori za procjenu kvalitete produkata. Softverski senzori su razvijeni za procjenu kraja destilacije petroleja kad je 95 % goriva predestiliralo koristeći linearne i nelinearne metode identificiranja. Eksperimentalni podaci su prikupljeni s distribuiranog sustava za vođenje (DCS) i obuhvaćaju kontinuirano mjerene varijable i laboratorijska mjerjenja. U radu je prikazan razvoj ARMAX (engl. AutoRegressive Moving Average with eXogenous inputs) modela, NARX (engl. Nonlinear AutoRegressive model with eXogenous inputs) modela i HW (Hammerstein-Wiener) modela. Kako bi se izbjegao dugotrajan postupak odabira optimalnih parametara modela, metodom pokušaja i pogreške u svrhu optimiranja primijenjeni su genetički algoritmi. Razvijeni modeli softverskih senzora mogu se rabiti za kontinuirano procjenjivanje svojstava goriva te za primjenu metoda inferencijskog vođenja.

Uvod

Procesna industrija je suočena sa sve strožim zahtjevima za praćenje kvalitete produkta. Stoga postoji potreba za kontinuiranim motrenjem velikog broja procesnih varijabli i svojstava. U procesnim postrojenjima postoje procesne varijable koje je teško mjeriti *on-line* (viskoznost, gustoća, vrelište, boja, itd.) ili ih je jedino moguće dobiti laboratorijskim analizama. Navedena svojstva često mogu biti od velike važnosti za proizvodnju jer mogu imati veliki utjecaj na konačnu kvalitetu proizvoda. Laboratorijske analize mogu biti vremenski zahtjevne i ograničene ljudskim faktorom. Rješenje ovom problemu može se naći u primjeni softverskih senzora – estimatora koji procjenjuju neredovito mjerene varijable na osnovi lako mjerenih varijabli, kao što su temperature, tlakovi, protoci, itd. (Dam i Saraf, 2006). S obzirom da su DCS sustavi instalirani u većini kemijskih postrojenja, procesne varijable mogu se kontinuirano mjeriti i spremati (Ma et al., 2009). Baze podataka omogućuju inženjerima razvoj modela softverskih senzora s ciljem procjena nemjerljivih podataka u realnom vremenu.

Uobičajen postupak za razvoj modela softverskih senzora prati sljedeće korake (Fortuna et al., 2007):

1. Odabir mjernih podataka iz baze podataka
2. Predobrada i filtriranje podataka
3. Odabir strukture modela i regresora
4. Razvoj modela
5. Vrednovanje (validiranje) modela

Korak 3, tj. odabir odgovarajuće strukture modela je od velike važnosti za kvalitetu modela softverskog senzora (Kadlec et al., 2009). S obzirom da motreni procesi u pravilu imaju dinamičko vladanje, od velike je važnosti pravilno odabrati red modela, tj. regresora i zadrške ulaza.

Razvoj modela softverskih senzora

Linearni i nelinearni autoregresijski dinamički modeli često se koriste za razvoj i primjenu softverskih senzora u procesnoj industriji. Autoregresijski modeli predviđaju izlaz iz modela $y(t)$ na osnovi prethodnih vrijednosti izlaza $y(t-1), y(t-2), \dots$ i trenutnih i prošlih vrijednosti ulaza $u(t), u(t-1), u(t-2), \dots$. Pri tom postupku mora se procijeniti skup parametara tako da se najbolje ostvari opis dinamičkog modela. Kako bi se riješio problem odabira reda modela i zadrški ulaza te drugih parametara na *ad hoc* način, u ovom radu su korišteni genetički algoritmi. Navedeni postupak je primijenjen i pokazan na primjeru razvoja ARMAX modela, nelinearnog ARX modela i Hammerstein-Wiener modela.

Identificiranje procesa

Jedan od najčešće korištenih linearnih dinamičkih modela koji omogućuje zasebno modeliranje smetnje je ARMAX model:

$$A(q)y(k) = B(q)u(k) + C(q)e(k)$$

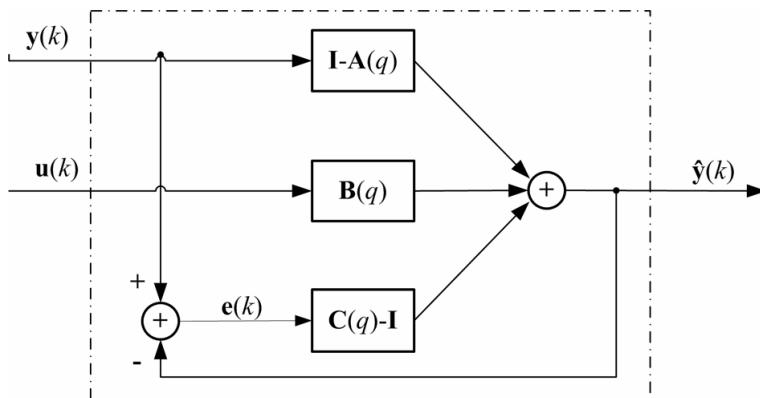
pri čemu je: $y(k)$ izlaz u vremenskom trenutku k , a $u(k)$ je izlaz u vremenu k . q je vremenski operator. e vrijednost mjernog šuma (smetnje).

$$A(q) = 1 + A_1 q^{-1} + A_2 q^{-2} + \dots + A_{na} q^{-na}$$

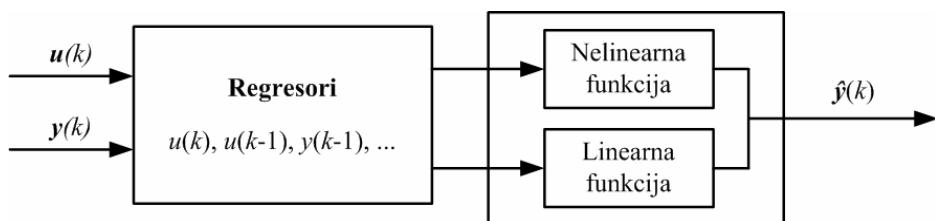
$$B(q) = B_1 q^{-nk} + \dots + B_{nb} q^{-nb-nk+1}$$

$$C(q) = 1 + C_1 q^{-1} + C_2 q^{-2} + \dots + C_{nc} q^{-nc}$$

Parametri na , nb i nk definirani su u tablici 2. Koeficijenti matrica A, B i C određeni su metodom najmanjih kvadrata. Blokovska shema prikazana na slici 1 predstavlja strukturu ARMAX modela. Blokovska shema prikazana na slici 2 predstavlja strukturu NARX modela.



Slika 1. Blokovska shema strukture ARMAX modela



Slika 2. Blokovska shema strukture NARX modela

NARX model se razvija primjenom nelinearne regresije nad prošlim mjernim uzorcima izlaznih i ulaznih signala procesa. Prediktor NARX modela se može prikazati sljedećom jednadžbom:

$$\hat{y}(k) = f_N(y(k-1), \dots, y(k-na), u(k-nk), \dots, u(k-nk-nb+1))$$

Struktura NARX modela omogućuje primjenu statičkih neuronskih mreža za aproksimaciju nelinearne funkcije f_N . U tu svrhu mogu se koristiti sume nizova nelinearnih jedinica, kao što su *tree-partition* mreže, *wavelet* mreže, višeperceptron-ske neuronske mreže ili sigmoidne funkcije. U ovom istraživanju kao nelinearni estimator korištena je sigmoidna mreža. Sigma funkcija je zadana u sljedećem obliku:

$$\kappa(s) = \frac{1}{1 + e^{-s}}$$

Mreža se može predstaviti sljedećom jednadžbom:

$$g(x) = \sum_{k=1}^n \alpha_k \kappa(\beta_k (x - \gamma_k))$$

gdje je β_k vektor redka takav da je $\beta_k (x - \gamma_k)$ skalar, a n je broj nelinearnih jedinica.

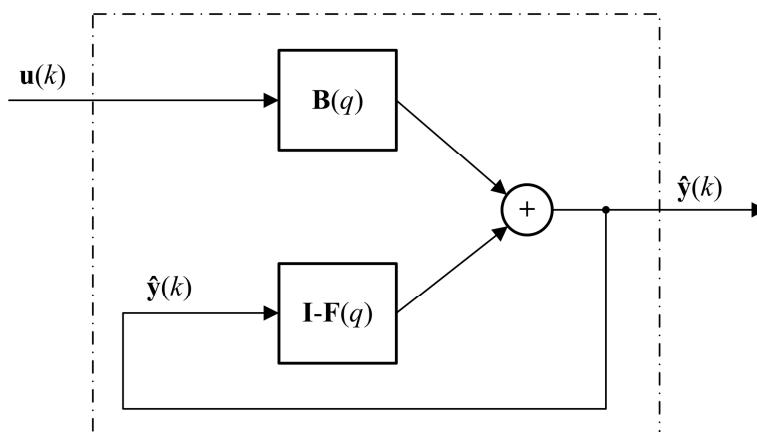


Slika 3. Blokovska shema strukture HW modela, pri čemu je:

- $w(t) = f(u(t))$ nelinearna funkcija koja preslikava ulazne podatke $u(t)$. $w(t)$ ima istu dimenziju kao i $u(t)$.
- $x(t) = (\mathbf{B}/\mathbf{F}) w(t)$ je linearna prijenosna funkcija. $x(t)$ ima istu dimenziju kao $y(t)$, gdje su \mathbf{B} i \mathbf{F} polinomi linearog *Output-Error* modela:

$$\mathbf{B}(q) = \mathbf{B}_1 q^{-nk} + \dots + \mathbf{B}_{nb} q^{-nb-nk+1}$$

$$\mathbf{F}(q) = \mathbf{I} + \mathbf{F}_1 q^{-1} + \mathbf{F}_2 q^{-2} + \dots + \mathbf{F}_{nf} q^{-nf}$$



Slika 4. Blokovska shema strukture *Output Error* modela

Nelinearna funkcija HW modela može se aproksimirati „tree-partition“ mrežama, *wavelet* mrežama, višeslojnim perceptronskim mrežama, linearnim po dijelovima mrežama te sigmoidnim funkcijom. Ovdje je kao nelinearni estimator odabранa po dijelovima linearna funkcija.

Nakon odabira strukture modela, optimalne vrijednosti parametara ARMAX, NARX i HW modela određene su primjenom genetičkog algoritma pomoću programa razvijenog u MATLAB-ovom *Genetic Algorithms and Direct Search Toolbox*.

Genetički algoritam je tehnika optimiranja koja se koristi za pronađenje globalnog minimuma funkcije primjerenosti (funkcije cilja). Postupak evolucije započinje stvaranjem populacije nasumično generiranih jedinki. U svakoj generaciji (iteraciji), izračunava se funkcija primjerenosti, a pojedine jedinke iz trenutne populacije se stohastički odabiru s obzirom na vrijednost funkcije primjerenosti te se modifificiraju (rekombiniraju i mutiraju) kako bi se oformila nova populacija. Nova populacija se zatim koristi u sljedećoj iteraciji algoritma. Općenito, proračun se prekida kada je postignut maksimalni definirani broj generacija ili je postignuta zadovoljavajuća razina primjerenosti.

Opis procesa

Kroz postrojenje CDU prolazi sva sirova nafta koja dođe u rafineriju. S obzirom da je CDU prva jedinica u obradi nafte, od ključne je važnosti praćenje svojstava frakcionacijskih produkata (nestabilizirana nafta, teški benzin, petrolej, lako plinsko ulje i teško plinsko ulje) (Cerić, 2006; Chatterjee i Saraf, 2004).

Teški benzin, petrolej i lako plinsko ulje frakcije su koje se u dalnjem postupku prerade nafte koriste za namješavanje dizelskog goriva. Stoga, važno svojstvo produkta je i 95 %-tina točka destilacije (D95) petroleja. 95 %-tina točka destilacije produkta odnosi se na temperaturu kada je 95 % produkta predestiliralo koristeći postupak prema normi ASTM D-86.

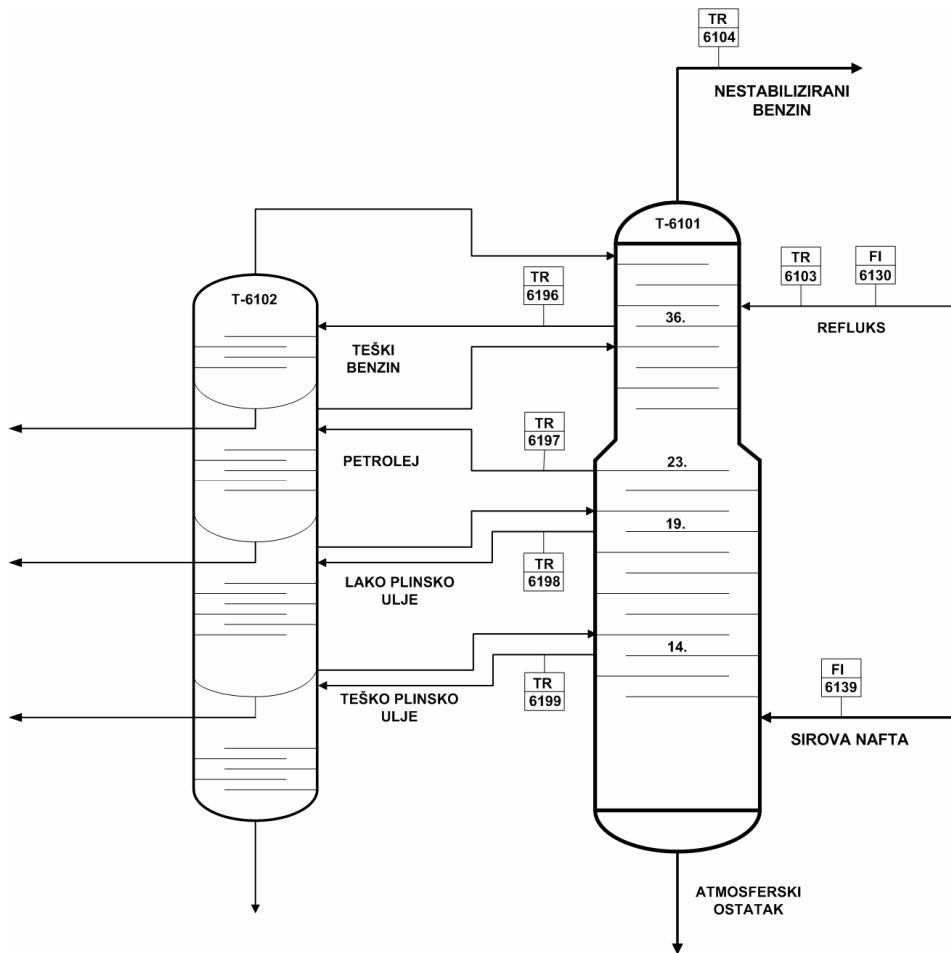
Na slici 5 prikazana je kolona s produktima za proizvodnju dizelskog goriva zajedno s ključnim varijablama korištenim za razvoj softverskog senzora. Kao ključne ulazne varijable modela softverskog senzora potrebnog za procjenu 95 % točke destilacije petroleja, odabrane su:

- temperatura vrha kolone, TR-6104;
- temperatura petroleja – 23. plitica, TR-6197;
- temperatura lakog plinskog ulja – 19. plitica, TR-6198;
- temperatura teškog plinskog ulja – 14. plitica, TR-6199;
- temperatura refluksa, TR-6103 i
- protok refluksa, FI-6130.

Razvoj modela softverskog senzora

Sa DCS sustava prikupljeno je 31898 uzoraka svake ulazne varijable uz vrijeme uzorkovanja od 5 min, slika 6. Laboratorijske analize za određivanje izlaza, tj. 95 % točke destilacije petroleja (T95) provode se četiri puta dnevno.

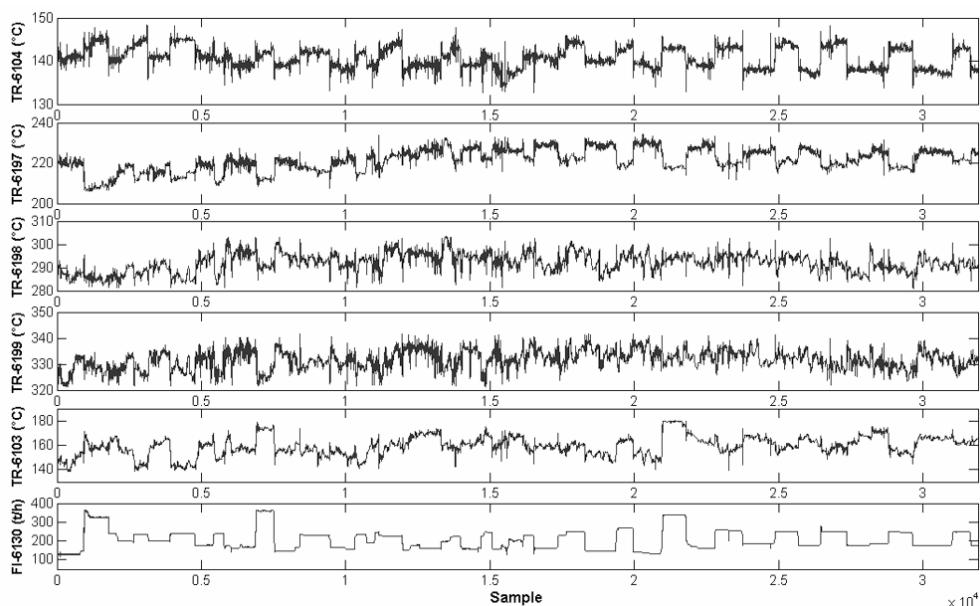
U tablici 1 prikazana je statistička analiza relevantnih ulaznih varijabli i njihovi koeficijenti korelacije (R) sa T95.



Slika 5. Kolona za atmosfersku destilaciju

Predobrada podataka obuhvatila je detekciju i uklanjanje ekstremnih vrijednosti pomoću 3 sigma metode. Podaci su detrendirani (offset ili trend je uklonjen iz ulaznih signala). S obzirom da dinamički modeli zahtijevaju jednak broj podataka za izlaznu veličinu iz modela, potrebeni podaci za izlaz iz modela generirani su algoritmom *Multivariate Adaptive Regression Splines* (Salvatore i dr., 2009).

Pri istraživanju su korišteni MATLAB-ovi *System Identification Toolbox* i *Genetic Algorithm and Direct Search Toolbox* rutine. Prikupljeni podaci su podijeljeni u dva skupa: 60 % za razvoj modela te 40 % za neovisni skup podataka za vrednovanje modela.



Slika 6. Ulazne varijable

Tablica 1: Statistički parametri ulaznih varijabli

Ulazne varijable	Aritmetička sredina	Median	Min	Max	R sa T95
Temperatura vrha kolone (TR-6104), °C	140,72	140,61	132,64	148,42	-0,70
Temperatura petroleja (TR-6197), °C	221,48	221,41	206,33	234,38	0,77
Temperatura lakog plinskog ulja (TR-6198), °C	292,08	292,37	281,19	303,34	0,56
Temperatura teškog plinskog ulja (TR-6199), °C	331,64	331,87	321,42	341,72	0,74
Temperatura refluksa (TR-6103), °C	159,37	159,48	138,91	180,15	0,35
Protok refluksa (FI-6130), t/h	206,56	190,25	116,70	365,06	-0,71

Nakon što je odabrana struktura modela, potrebno je procijeniti optimalne parametre modela. Ugodivi parametri i područje parametara za ARMAX, NARX i HW model navedeni su u tablici 2.

Tablica 2: Ugodivi parametri ARMAX, NARX i HW modela

Oznaka parametra	Značenje parametra	Minimalna vrijednost	Maksimalna vrijednost
na	Broj uzoraka prošlih izlaza korištenih za predviđanje trenutne vrijednosti izlaza.	1	8
nb	Broj uzoraka prošlih ulaza korištenih za predviđanje trenutne vrijednosti izlaza (ima šest različitih nb u ovom modelu zbog šest ulaza).	1	8
nk	Zadrška ulaza izražena preko broja uzoraka (ima šest različitih nk u ovom modelu zbog šest ulaza).	0	5
nc	Broj prošlih vrijednosti predikcijske pogreške (samo za ARMAX model).	1	8
nf	Broj uzoraka prošlih procijenjenih izlaza potrebnih za predviđanje trenutne vrijednosti izlaza (samo za HW model).	1	5
n	Broj nelinearnih jedinica sigmoidne mreže (samo za nelinearni ARX model).	1	12
np	Broj piecewise jedinica (samo za HW model). Ima sedam np u ovom modelu zbog šest ulaza i jednog izlaza.	1	12

Minimalne i maksimalne vrijednosti ugodivih parametara odabrane su na osnovi racionalne složenosti strukture modela i prihvatljivog vremena proračuna. Parametri genetičkog algoritma odabrani su na osnovi preliminarnog istraživanja i iskustva.

U predloženom genetičkom algoritmu, u svakoj generaciji 16 jedinki je stvoreno postupkom križanja, 8 jedinki je stvoreno mutacijom, a preostala 1 jedinka je elitna jedinka (jedinka s najnižom vrijednosti funkcije primjerenosti iz prethodne generacije). Prostor pretraživanja ugodivih parametara za ARMAX model iznosi: $8^*8^*6^*6^*8 = 7,83*10^{11}$. Prostor pretraživanja ugodivih parametra za NARX model iznosi: $8^*8^*6^*6^*12 = 1,17*10^{12}$. HW model kao nasloženiji od predloženih modela, sadrži 25 parametara koje treba odrediti. Prostor pretraživanja parametra za HW model iznosi čak: $8^*6^*6^*6^*5^*12^*7 = 3,41 *10^{21}$.

Modeli su primarno evaluirani na osnovi *FIT* i *FPE* vrijednosti. *FIT* se računa, kako slijedi:

$$FIT = \left(1 - \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - y_i)^2}}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}} \right) \cdot 100$$

y je mjereni izlaz, \hat{y} je simulirani ili predviđeni izlaz modela, a \bar{y} je srednja vrijednost od y . FIT treba biti što veći, a 100 % označava maksimalni FIT .

Konačna pogreška predviđanja prema Akaikeu (FPE) se također koristila za ocjenu valjanosti modela. Prema Akaikeovoj teoriji najtočniji model ima najmanju vrijednost FPE (Ljung, 1999; Matlab, 2009). FPE se definira sljedećom jednadžbom:

$$FPE = V \left(1 + \frac{2d}{N} \right)$$

gdje je V funkcija gubitka, d je broj procijenjenih parametara, a N je broj podataka u skupu podataka za razvoj modela. Funkcija gubitka V je definirana sljedećom jednadžbom:

$$V = \det \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \varepsilon(t, \theta_N) (\varepsilon(t, \theta_N))^T \right)$$

gdje θ_N predstavlja procijenjene parametre, a ε je pogreška modela.

S obzirom da je preliminarno istraživanje pokazalo da su FIT i FPE nekorelirani, a oba kriterija se često koriste za vrednovanje modela, cilj je bio procijeniti optimalne parametre modela koristeći višekriterijsku funkciju cilja gdje se istovremeno traži model koji daje maksimalni FIT i minimalni FPE . U ovom radu je korištena metoda težinskih sumi kao klasična metoda integracije više kriterija. Svakom kriteriju se dodjeljuje određena težinska vrijednost, a funkcija cilja je linearna kombinacija svih težinskih kriterija. Funkcija primjerenosti (y) je, prema tome, definirana kao:

$$y = (100 - FIT) + 10 \cdot FPE$$

Kvadratna srednja pogreška (RMS) i apsolutna srednja pogreška (e_{MAE}), kao često korišteni kriteriji za vrednovanje modela, također su predstavljeni u rezultatima.

$$RMS = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - y_{\text{exp},i})^2}{n}}$$

e_{MAE} je apsolutna srednja pogreška:

$$e_{MAE} = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n \left| \hat{y}_i - y_{\text{exp},i} \right|$$

Rezultati i rasprava

Svojstva dobivenog ARMAX modela su prikazana u tablici 3. Svi rezultati su izračunati na skupu podataka za vrednovanje modela. Parametri najboljeg ARMAX modela koji upućuju na zadrške i red modela dani su u sljedećom matričnom obliku:

$$\text{na} = [7]$$

$$\text{nb} = [6 \ 1 \ 7 \ 7 \ 7 \ 8]$$

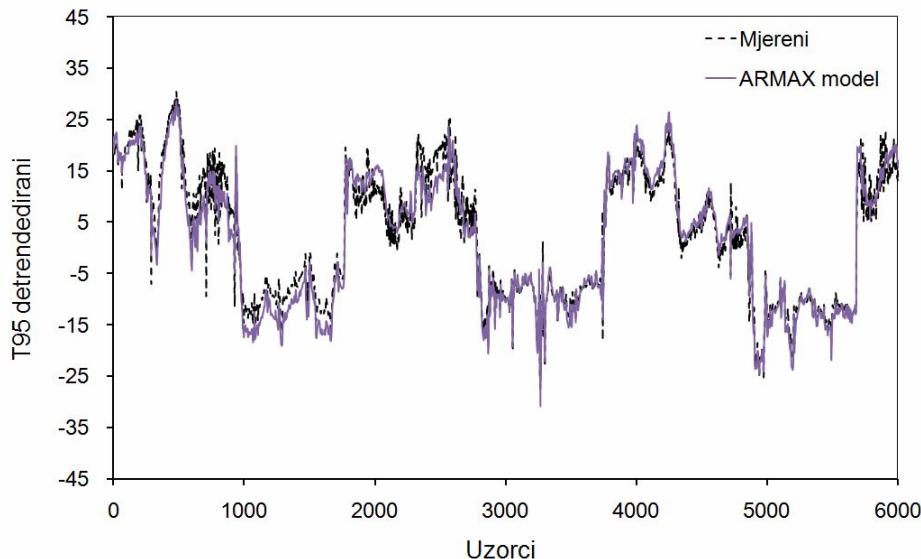
$$\text{nk} = [0 \ 1 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0]$$

$$\text{nc} = [8]$$

Slika 7 pokazuje usporedbu između mjerjenih izlaza i izlaza izračunatim ARMAX modelom na skupu podataka za vrednovanje. Može se uočiti da izlaz modela vrlo dobro prati trend promjene mjerenih rezultata.

Tablica 3: Svojstva dobivenog ARMAX modela

ARMAX GA	
FPE	1,574
FIT	82,893
RMS	2,405
EMAE	1,860
funkcija primjerenosti, y	32,843



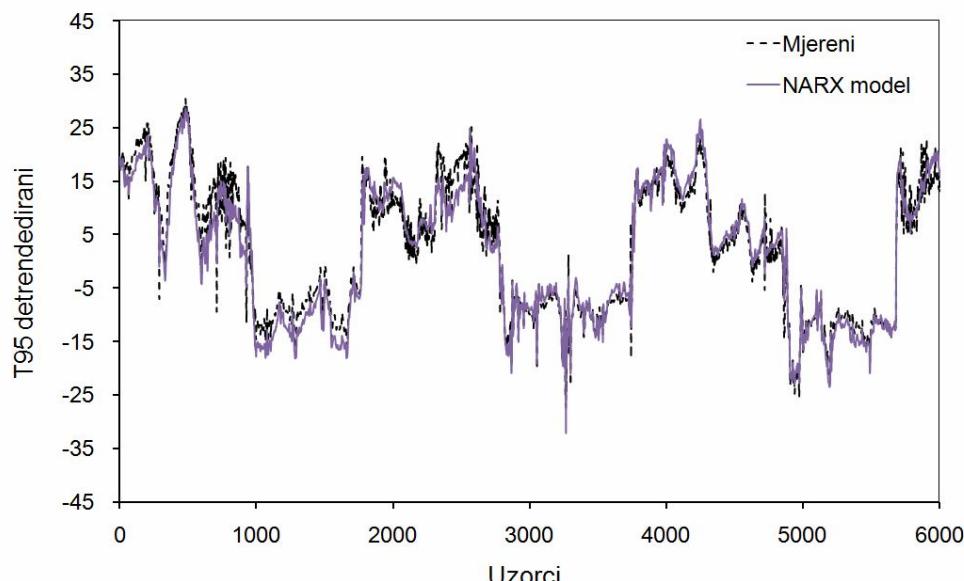
Slika 7: Usporedba mjerjenih izlaza i izlaza ARMAX modela.

Zbog složenosti i nelinearnosti destilacijskog procesa, razvijen je nelinearni ARX model. Iz preliminarnog istraživanja, između sigmoidne i wave mreže NARX modela, bolji rezultati su postignuti s sigmoidnim mrežama. U ovom radu su prikazani rezultati sa sigmoidnim mrežama. Svojstva dobivenog NARX modela su dana u tablici 4. Slika 8 prikazuje usporedbu simuliranog i mjerенog izlaza na podacima za vrednovanje. Parametri najboljeg NARX modela dani su u sljedećem matričnom obliku:

```
na = [ 6 ]
nb = [ 4 5 4 4 7 5 ]
nk = [ 1 0 0 0 0 0 ]
n = [ 6 ]
```

Tablica 4: Svojstva dobivenog NARX modela

NARX model	
FPE	1,010
FIT	83,888
RMS	2,265
e _{MAE}	1,514
funkcija primjerenosti, y	26,207



Slika 8: Usporedba mjerenih izlaza i izlaza NARX modela.

Iz grafičke usporedbe, dobivenih vrijednosti FIT , FPE i RMS vrijednosti može se zaključiti kako eksperimentalni podaci i podaci modela daju zadovoljavajuće slaganje. U usporedbi s linearnim ARMAX modelom, NARX model pokazuje nešto bolje slaganje s mjerenim izlazom i to sa nižim redom modela.

Tablica 5: Svojstva HW modela

HW model	
FPE	1,351
FIT	94,991
RMS	0,684
ϵ_{MAE}	0,265
funkcija primjerenosti, y	18,518

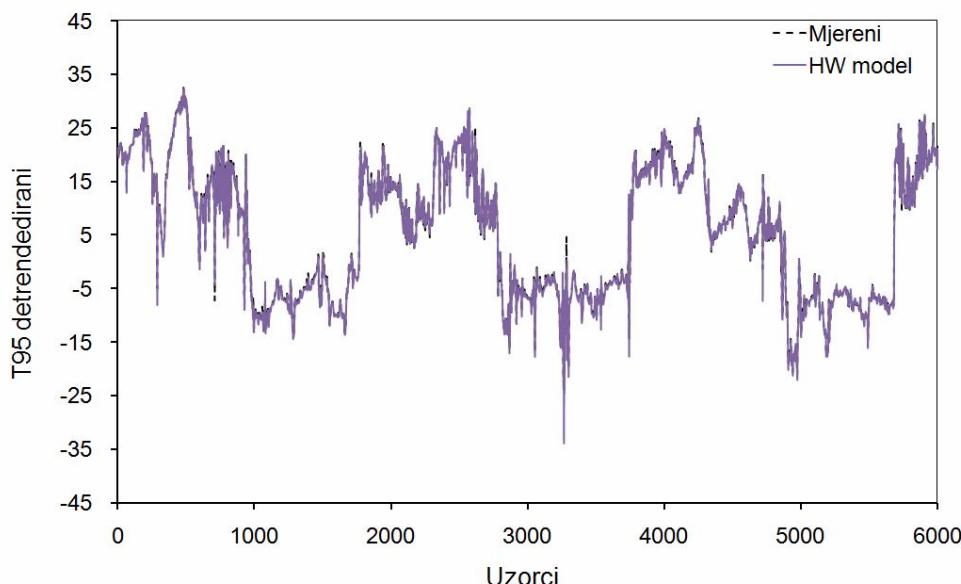
Parametri najboljeg HW modela dani su u sljedećem matričnom obliku:

$$nb = [1 \ 1 \ 2 \ 2 \ 2]$$

$$nf = [1 \ 1 \ 2 \ 1 \ 2 \ 2]$$

$$nk = [0 \ 0 \ 1 \ 0 \ 0 \ 0]$$

$$np = [9 \ 8 \ 9 \ 11 \ 9 \ 10 \ 11]$$



Slika. 9: Usporedba mjerenih izlaza i izlaza HW modela.

Slika 9 prikazuje usporedbu između izlaza HW modela i mjerenoj izlazu na podacima za vrednovanje. Kao što se može vidjeti iz tablice 5 i slike 9, HW model nesumnjivo pokazuje najbolje vladanje (najviši *FIT* i najmanje pogreške) od svih razvijenih modela. Iz grafičke usporedbe i dobivenih *FIT*, *FPE* i *RMS* vrijednosti može se zaključiti kako se podaci modela slažu jako dobro s eksperimentalnim podacima. Prosječna apsolutna pogreška HW modela ($0,3^{\circ}\text{C}$) je i više nego zadovoljavajuća za *on-line* primjenu modela softverskog senzora.

Razvijeni algoritam za projektiranje softverskih senzora općeg je oblika i uz malo modifikacija lako se može prilagoditi i za razvoj drugih autoregresijskih modela. *FIT* i *FPE* su uključeni u funkciju primjerenosti s obzirom da su to najčešće korištene mjere za ocjenu valjanosti modela i usporedbu kvalitete s ostalim modelima. Funkcija primjerenosti, dakako, može biti i neka druga mjera koja se često koristi za vrednovanje modela kao što je *RMS*.

Zaključak

Metodama identificiranja razvijeni su linearne i nelinearne dinamički modeli za procjenu 95 % točke destilacije petroleja. Odabrani linearne i nelinearne modeli pokazali su zadovoljavajuće slaganje s eksperimentalnim modelima te se mogu primijeniti kao softverski senzori za *on-line* procjenu ključnih svojstava produkata atmosferske destilacije. Predloženi postupak je pokazao kako se evolucijski algoritmi mogu uspješno primijeniti za pronalaženje optimalnih parametara autoregresijskih modela.

HW model je pokazao najbolje vladanje i može se uspješno primijeniti kao softverski senzor za *on-line* procjenu 95 % točke destilacije petroleja. Rezultati su pokazali da se evolucijski algoritmi mogu uspješno primijeniti za ugađanje parametara NARX, ARMAX i HW modela.

Literatura

1. T. Chatterjee, D. N. Saraf, On-line estimation of product properties for crude distillation units, *Journal of Process Control*, 14, 2004, 61-77.
2. M. Dam, D. N. Saraf, Design of neural networks using genetic algorithm for on-line property estimation of crude fractionators' products, *Computers & Chemical Engineering*, 30, 2006, 722-729.
3. B. Kadlec, B. Gabrys, S. Strandt, Data-driven soft sensors in the process industry, *Computers and Chemical Engineering*, 33, 2009, 795-814.
4. M. Ma, J. Ko, S. S. Wang, M. Wu, S. Jang, S. Shieh, D. S. Wong, Development of adaptive soft sensor based on statistical identification of key variables, *Control Engineering Practice*, 17, 2009, 1026-1034.
5. L. Fortuna, S. Graziani, A. Rizzo, M. G. Xibilia, *Soft sensors for monitoring and control of industrial processes (Advances in industrial control)*, Springer, London, 2007.

6. L. Ljung, System identification: Theory for the user, 2nd ed., Prentice Hall, New Jersey, 1999.
7. L. Salvatore, M. Bezerra de Souza, M. C. M. M. Campos, Design and implementation of a neural network based soft sensor to infer sulfur content in a brazilian diesel hydrotreating unit, Chemical Engineering Transaction, 17, 2009, 1389-1394.
8. Matlab, The Language of Technical Computing, www.mathworks.com, 2009.
9. E. Cerić, Petroleum – processes and products, INA & Kigen, Zagreb, 2006.

UDK	kjučne riječi	key words
665.622.048.3	atmosferska destilacija	topping
66-503.56	optimalno vođenje i regulacija procesa	optimal process control and regulation
66.012.122	softwarski senzori za selekciju modela upravljanja procesom	software sensors for process modeling system selection

Autori

Željka Ujević Andrijić, dipl. ing.,
dr. sc. Nenad Bolf;
e-pošta: zujevic@fkit.hr, bolf@fkit.hr
Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Sveučilište u Zagrebu

Primljeno

04.05.2011.

Prihvaćeno

06.06.2011.