

Прогноз сорта выпускаемой продукции в малотоннажных нестационарных многоассортиментных производствах полимерной продукции

Е.Р. Русских, П.Ю. Сокльчик

Пермский национальный исследовательский институт

Аннотация: Современные вычислительные системы управления химико-технологическими процессами позволяют программно реализовывать сложные алгоритмы управления, в том числе с использованием методов машинного обучения и элементов искусственного интеллекта. Такие алгоритмы могут быть применимы в том числе для сложных нестационарных многоассортиментных и гибких дискретных производств, к которым относятся и такие процессы малотоннажной химии, как производства полимерных материалов. В статье рассматривается производство фторопласта в реакторах периодического действия. Этот процесс протекает при постоянно изменяемых параметрах, таких как давление и температура. Одной из важных задач системы управления является стабилизация качества выпускаемого полимера, и для этих целей важно прогнозировать это качество в процессе производства до выпуска фторопласта. Качество продукции в свою очередь сильно зависит как от качества исходных реагентов, так и от действий оператора. В условиях нестационарного процесса типовые виртуальные анализаторы качества, основанные на регрессионных зависимостях, показывают плохие результаты, и, как правило, неприменимы. В статье предложена архитектура виртуального анализатора качества, основанного на методах математического прогноза с использованием таких алгоритмов как: метод случайного леса, градиентный бустинг и пр.

Ключевые слова: полимеризация, многоассортиментные производства, малотоннажная химия, прогноз качества, машинное обучение.

Технологические процессы малотоннажной химии часто относятся к малотоннажным, многоассортиментным, периодическим или непрерывно-периодическим производствам. Эти производства содержат как правило подготовительные стадии стадию реакции и заключительные стадии по доведению продукта реакции до требуемого качества. К таким производствам относится и получение фторопласта.

В производстве фторопласта в основе лежит реакция полимеризации. Производство малотоннажное, многоассортиментное, периодическое. Основные стадии производства - прием и выдача мономера, полимеризация, измельчение, сушка и выдача фторопласта. На входе производства – мономер, на выходе – фторопласт. Сама реакция происходит внутри реактора

идеального смещения с рубашкой. Начинается добавлением инициатора, заканчивается добавлением ингибитора.

Особенностью производства можно считать нестационарность процесса, то, что две стадии полимеризации происходят в одном реакторе, и то, что технологические операции характеризуются как временем, так и значением технологического параметра.

Качество полимерной продукции определяется совокупностью показателей, которые согласно ГОСТ 10007-80 определяют сорт фторопласта. Среди этих показателей – внешний вид, массовая доля влаги, плотность, прочность при разрыве, относительное удлинение при разрыве, термостабильность, электрическая прочность, внешний вид строганной пленки, относительное удлинение при разрыве в поперечном направлении. Всего ГОСТом регламентируется 5 марок фторопласта: «С», «П», «ПН», «О», «Т». Целевым показателем процесса обычно рассматривают стабильность качества фторопласта по всем указанным показателям.

В малотоннажных производствах цена выпуска продукции более низкого сорта или брака очень высока. Важно не только стабилизировать выпуск продукции по качеству, но и по возможности вывести продукцию в более высокий класс.

Среди задач управления технологическим процессом наиболее важной является – стабилизация качества готовой продукции и получение фторопласта заданного сорта. Для этого имеет смысл определять сорт фторопласта заранее, в ходе изготовления, и возможной коррекции хода процесса. Во-первых, это уменьшит потери от неустранимого брака, во-вторых, уменьшит потери от производства более низкого сорта. На практике ухудшение качества конечной продукции может произойти на любой стадии реакции.

Среди факторов, влияющих на качество продукции, можно выделить технические, технологические и организационные [1].

Анализ качества фторопласта, как правило, проводят после окончания реакции, что связано с требованиями к безопасности процесса, т.е. лабораторный анализ возможно провести уже после окончания реакции. Показатели качества сырья, напротив известны до начала технологического процесса, что позволяет использовать виртуальный анализ основанный на математической обработке технологических данных. В основе виртуального анализа используются модельные зависимости связывающие технологические параметры и показатели качества продукции: в простейшем случае регрессионные модели, или более сложные – математические модели учитывающие физико-химические факторы реакции. Существует большое количество опубликованных моделей полимеризации, которые в основном исследуют, как правило, материальный и тепловой баланс реакции, и не учитывают основные и дополнительные показатели качества конечного продукта. Например, в работах [2-5] рассматриваются модели реактора полимеризации полиметилакрила; в работе [6] модель полимеризации стирола; в работе [7] показаны статические и кинетические модели полимеризации. В работах [8-9] рассматриваются модель реактора-полимеризатора этилена, в работе [10] модель полимеризации поли-9-винилкарбазола.

В силу большого количества скрытых связей технологического процесса, имеет смысл перейти к формальным моделям связи связей «качество-сырье». Для из построения использованы данные о реакции и последующего лабораторного анализа (анализ проводился по данным более 300 реакций).

Для задачи прогноза качества рассмотрена возможность использования регрессионных зависимостей, как наиболее просто реализуемых в

микропроцессорных технологических контроллерах. Исходные данные прошли предварительную обработку, а именно: проверка данных на наличие пропусков, обработка пропусков, очистка от ошибок, сортировка, группировка, нормирование данных, кодирование переменных.

Для построения регрессионных моделей выбраны методы линейной, полиномиальной регрессии, полученной методом наименьших квадратов, и метод случайного леса.

Проведена оценка регрессионных моделей, ее результаты отражены в таблице №1. В качестве критериев оценки выбраны среднее квадратичное отклонение (СКО) и коэффициент детерминации (R^2) [11]:

$$\text{СКО} = \sqrt{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 / n},$$
$$R^2 = 1 - \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 / \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2,$$

где n – количество наблюдений, y_i – фактическое значение, $\hat{y}_i$ – модельное значение, $\bar{y}$ – среднее значение фактических данных.

Таблица №1

Оценка качества регрессионных моделей

Тип модели	СКО	R^2
Линейная регрессия	0,0593	-0,1898
Полиномиальная регрессия 2 порядка	81,1874	-1421,1198
Полиномиальная регрессия 3 порядка	154696,7062	-2351372,1871
Метод случайного леса	0,0378	0,2877

Регрессионные модели показали неудовлетворительные результаты, что связано со следующими причинами:

- 1) качество продукта зависит не только от технологических параметров, но и от их предыдущего состояния, скорости изменения во времени, отношения этих параметров;
- 2) существенное влияние оказывают действия оператора и изменение технологических параметров в ходе реакции.

Исходя из того, что для практического применения важно не прогноз значения каждого из показателей качества конечной продукции, а возможность предсказать её сорт. В связи с этим, возможно для прогноза задействовать алгоритмы машинного обучения, использующих опыт оператора.

Для формализации опыта оператора для нестационарных параметров (температуры, давления) вводится понятие ключевых точек, которые отражают протекание технологического процесса. К ключевым точкам относятся: средние значения технологических параметров, максимумы температур, продолжительность этапов реакции, производные температур.

Для задач формального прогноза выпускаемой марки выбраны следующие алгоритмы классификации: случайный лес, логистическая регрессия, градиентный бустинг и его разновидность – «CatBoost». В будущем есть возможность применить алгоритмы нейросетевой классификации [12].

Таблица №2

Входные данные для моделей

Набор входных данных	Данные о сырье ($x_1, \dots, x_{12}$)	Набор ключевых точек №1 ($x_{13}, \dots, x_{26}$)	Набор ключевых точек №2 ($x_{27}, \dots, x_{40}$)	Набор ключевых точек №3 ($x_{41}, \dots, x_{54}$)
Этап прогноза	До начала реакции 0-й этап прогноза	1-й этап прогноза	2-й этап прогноза	3-й этап прогноза

Система прогноза строится из ансамбля моделей (1), каждая из которых вводится последовательно. На вход каждой модели поступают данные о сырье и ключевые точки, характерные для предыдущего этапа реакции. Таким образом набор входных данных каждой следующей модели расширяется, а точность прогноза растет.

Предсказанную марку после каждого этапа реакции можно определить системой уравнений:

$$y = \begin{cases} y^0 = F_1(x_1, \dots, x_{12}) \\ y^1 = F_2(x_1, \dots, x_{12}, x_{13}, \dots, x_{26}) \\ y^2 = F_3(x_1, \dots, x_{12}, x_{13}, \dots, x_{26}, x_{27}, \dots, x_{40}) \\ y^3 = F_4(x_1, \dots, x_{12}, x_{13}, \dots, x_{26}, x_{27}, \dots, x_{40}, x_{41}, \dots, x_{54}) \end{cases} \quad (1)$$

где y – предсказанная марка фторопласта, F_i – модель прогноза, x_i набор входных данных, $i=1..4$.

На рис. 1 визуальнo представлен алгоритм работы системы прогноза.

Описание работы алгоритма прогноза

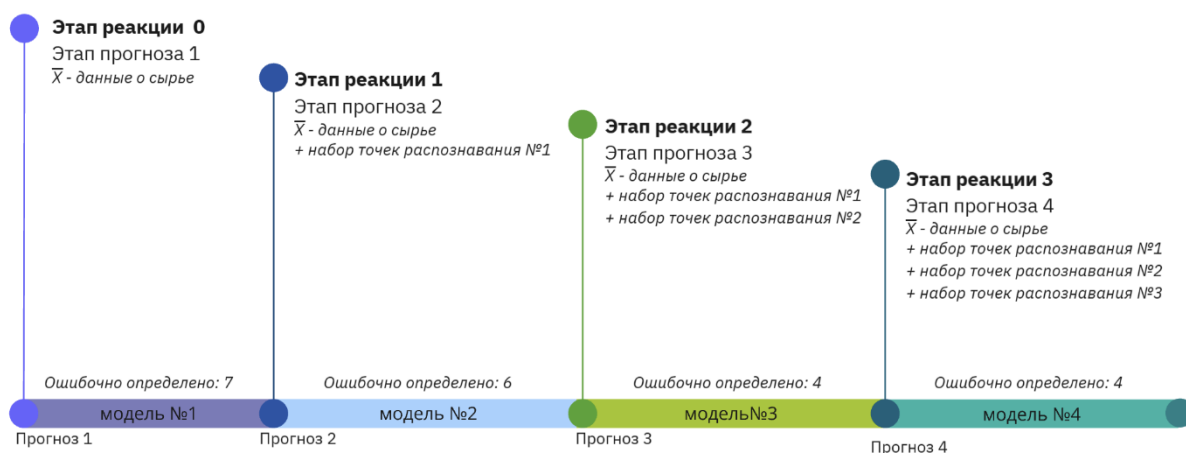


Рис. 1 – Описание алгоритма работы прогноза

Набор ключевых точек был подобран удачно, и все модели связи, полученные разными методами, показали хорошие результаты по прогнозу. Наилучшие результаты показал метод случайного леса и «CatBoost». В связи с тем, что осуществлен переход от задач прогнозирования показателей качества к прогнозированию сорта продукции (то есть к задачам классификации), оценка проводилась по F1-критерию, % [13]:

$$F_1 = (2 \cdot TP) / (2 \cdot TP + FP + FN) \cdot 100\%$$

где TP – количество истинно положительных образцов, FP – количество ложно положительных образцов, FN – количество ложно отрицательных образцов.

Результаты оценки отображены в таблице №3.

Таблица №3

Оценка качества моделей прогноза

Этап прогноза	Исходные данные для прогноза	Случайный лес	Логистическая регрессия	Градиентный бустинг	Градиентный бустинг (CatBoost)
1	Данные о сырье	97,66	76,64	96,73	98,14
2	С использованием набора точек №1	97,21	81,63	95,35	95,82
3	С использованием наборов точек №1 и №2	95,33	79,92	94,39	95,82
4	С использованием наборов точек №1, №2, №3	98,6	86,94	95,34	98,14

Полученное качество прогноза сорта фторопласта до его выпуска в процессе его производства на основе исходных данных о сырье и текущих значений технологических параметров достаточно для практического применения в задачах управления процессом полимеризации.

Литература

1. Паштова Л. Г. Актуальные вопросы организации и управления производством на предприятии // Инженерный вестник Дона. – 2014. – № 2. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n2y2014/2442.
2. Вент Д. П., Лопатин А. Г., Брыков Б. А. Исследование математической модели промышленного реактора-полимеризатора // Вестник Международной академии системных исследований. Информатика, экология, экономика. – 2018. – Т. 20, № 1. – С. 9–23. – EDN YUMZZJ.
3. Лопатин А. Г., Брыков Б. А., Вент Д. П. Исследование динамических свойств промышленного реактора синтеза полиметилметакрилата // Вестник

Иркутского государственного технического университета. – 2018. – Т. 22, № 9. – С. 91–100. – DOI: 10.21285/1814-3520-2018-9-91-1003.

4. Лопатин А. Г., Брыков Б. А., Вент Д. П., Мурашев П. М., Богатиков В. Н. Разработка нейро-нечеткой модели реактора-полимеризатора // Вестник экономической безопасности. – 2020. – № 5. – С. 236–246.

5. Вент Д. П., Лопатин А. Г., Лопатин К. Г., Лопатина С. В. Сравнительный анализ кинетических моделей суспензионной полимеризации метилметакрилата // Вестник Международной академии системных исследований. Информатика, экология, экономика. – 2014. – Т. 16, № 1. – С. 59–63.

6. Полицына В. В., Тушакова З. Р. Математическое моделирование процесса полимеризации стирола // Научное обозрение. Педагогические науки. – 2019. – № 2–3. – С. 57–60. – EDN ZSZYMH.

7. Янбеков М. С., Гиззатова Э. Р., Спивак С. И. Моделирование различных режимов поведения конверсии мономера в процессах радикальной полимеризации диенов // Журнал СВМО. – 2016. – № 18:4. – С. 159–167.

8. Истомин А. Л., Ступина А. А., Кривов М. В., Истомина А. А., Головкова Е. А. Исследование устойчивости химического реактора полимеризации этилена // Вестник АГТУ. Управление, вычислительная техника и информатика. – 2023. – № 4. – С. 17–25.

9. Истомин А. Л., Кривов М. В., Истомина А. А., Головкова Е. А. Математическое моделирование процесса полимеризации этилена в автоклавном реакторе с мешалкой // Вестник АГТУ. Управление, вычислительная техника и информатика. – 2023. – № 2. – С. 7–16.

10. Русина Л. Г., Грибкова Ю. В. Математическая модель процесса полимеризации // Вестник Череповецкого государственного университета. – 2016. – № 4 (73). – С. 33–39.

11. Bickel P. J., Doksum K. A. Mathematical Statistics: Basic Ideas and Selected Topics. Vol. I. – 2nd ed. – Boca Raton: CRC Press, 2015 pp. 17–24.
12. Алёшин С. П., Бородина Е. А. Нейросетевое распознавание классов в режиме реального времени // Инженерный вестник Дона. – 2013. – № 1. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n1y2013/1494.
13. Stehman S. V. Selecting and interpreting measures of thematic classification accuracy // Remote Sensing of Environment. – 1997. – Vol. 62. – P. 77–89.

References

1. Pashtova L. G. Inzhenernyy vestnik Dona, 2014, № 2. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n2y2014/2442.
2. Vent D. P., Lopatin A. G., Brykov B. A. Vestnik Mezhdunarodnoy akademii sistemnykh issledovaniy. Informatika, ekologiya, ekonomika, 2018. T. 20, № 1. pp. 9–23. EDN YUMZZJ.
3. Lopatin A. G., Brykov B. A., Vent D. P. Vestnik Irkutskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta 2018. T. 22, № 9. pp. 91–100. DOI: 10.21285/1814-3520-2018-9-91-100.
4. Lopatin A. G., Brykov B. A., Vent D. P., Murashev P. M., Bogatikov V. N. Vestnik ekonomicheskoy bezopasnosti. 2020. № 5. pp. 236–246.
5. Vent D. P., Lopatin A. G., Lopatin K. G., Lopatina S. V. Vestnik Mezhdunarodnoy akademii sistemnykh issledovaniy. Informatika, ekologiya, ekonomika. 2014. T. 16, № 1. pp. 59–63.
6. Palitsyna V. V., Tushakova Z. R. Nauchnoye obozrenie. Pedagogicheskiye nauki. 2019. № 2–3. pp. 57–60. EDN ZSZYMH.
7. Yanbekov M. S., Gizzatova E. R., Spivak S. I. Zhurnal SVMO. 2016. T. 18, № 4. pp. 159–167.

8. Istomin A. L., Stupina A. A., Krivov M. V., Istomina A. A., Golovkova E. A. Vestnik AGTU. Seriya: Upravlenie, vychislitel'naya tekhnika i informatika. 2023. № 4. pp. 17–25.

9. Istomin A. L., Krivov M. V., Istomina A. A., Golovkova E. A. Vestnik AGTU. Seriya: Upravlenie, vychislitel'naya tekhnika i informatika. 2023. № 2. pp. 7–16.

10. Rusina L. G., Gribkova Yu. V. Vestnik Cherepovetskogo gosudarstvennogo universiteta. 2016. № 4 (73). pp. 33–39.

11. Bickel P. J., Doksum K. A. Mathematical Statistics: Basic Ideas and Selected Topics. Vol. I. 2nd ed. Boca Raton: CRC Press, 2015 pp. 17–24.

12. Alyoshin S. P., Borodina E. A. Inzhenernyj vestnik Dona. 2013. № 1. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n1y2013/1494.

13. Stehman S. V. Selecting and interpreting measures of thematic classification accuracy Remote Sensing of Environment. 1997. Vol. 62. pp. 77–89.

Дата поступления: 8.07.2025

Дата публикации: 25.08.2025