

**ПРЕДСКАЗАТЕЛЬНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
МАССООБМЕННОГО ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ОБЪЕКТА
С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ АЛГОРИТМА
ЧЕРЕДУЮЩИХСЯ УСЛОВНЫХ МАТЕМАТИЧЕСКИХ ОЖИДАНИЙ**

© 2020 г. *И.С. Можаровский*^{1,2}, *С.А. Самотылова*^{2,3}, *А.Ю. Торгашов*^{2,3}

¹ Владивостокский государственный университет экономики и сервиса

² Институт автоматизации и процессов управления ДВО РАН, Владивосток

³ Дальневосточный федеральный университет, Владивосток

samotylova@dvo.ru

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 17-07-00235 А).

DOI: 10.20948/mm-2020-03-08

Рассматривается задача построения модели для оценки показателя качества выходного продукта нелинейного массообменного технологического объекта (МТО) на основе экспериментальных данных. Для анализа структурной идентифицируемости исследуемого процесса и выявления факторов, влияющих на точность индекса структурной идентифицируемости модели, предлагается методика на основе алгоритма чередующихся условных математических ожиданий (alternating conditional expectation – ACE). Определяется пороговое значение индекса структурной идентифицируемости на основе аналитической модели объекта, т.е. с учетом физико-химических особенностей рассматриваемого МТО. Применение предлагаемого подхода проиллюстрировано на синтетических и экспериментальных данных.

Ключевые слова: алгоритм ACE, индекс структурной идентифицируемости, массообменный технологический объект, предсказательное моделирование.

**PREDICTIVE MODELING OF MASS-TRANSFER TECHNOLOGICAL PLANT
USING AN ALGORITHM
OF ALTERNATING CONDITIONAL EXPECTATIONS**

I.S. Mozharovsky^{1,2}, *S.A. Samotylova*^{2,3}, *A.Yu. Torgashov*^{2,3}

¹Vladivostok State University of Economics and Service, Vladivostok

²Institute of Automation and Control Processes FEB RAS, Vladivostok

³Far Eastern Federal University, Vladivostok

The task of predictive modelling under conditions of nonlinearity of a mass-transfer plant (MTP) on the basis of experimental data is considered. To analyze the structural identifiability of the process under study and identify factors that affect the accuracy of the structural identifiability index with an unknown model structure, a technique based

on an alternating conditional expectation (ACE) algorithm with a threshold value for the structural identifiability index of the MTP model is proposed. The threshold value of the structural identifiability index is determined based on the analytical model of the object. That is taking into account the physico-chemical characteristics of the MTP. The proposed approach is illustrated using synthetic data and experimental data.

Keywords: ACE algorithm, index of structural identifiability, mass-transfer plant, predictive modeling.

1. Введение

В связи с повышающимися требованиями к качеству основных видов нефтепродуктов, предприятия нефтеперерабатывающей и нефтехимической промышленности вынуждены непрерывно повышать экономическую эффективность производства и качество выпускаемой продукции [1]. Эффективность производства может быть улучшена с помощью систем виртуального мониторинга и контроля показателей качества выходных продуктов, таких массообменных процессов, как ректификация и абсорбция [2].

Разработка новых методов предсказательного моделирования, под которым понимается использование статистических методов для создания модели, предназначенной для оценки показателей качества выходной переменной объекта с учетом текущих значений входных переменных [3], обеспечит в реальном времени заметное повышение эффективности производства.

Отбор входных переменных $X=(x_1, \dots, x_p)$, влияющих на значение выхода Y , и выбор структуры модели может осуществляться на основе корреляционного и регрессионного анализа [4]. Однако для нелинейных объектов использование данных методов не позволяет определить структуру модели. Это приводит к неоднозначности получения оценок неизвестных параметров модели $B=(\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_p)$, когда одной и той же выборке экспериментальных данных одинаково хорошо соответствует не одна, а сразу множество моделей $F(X, B)$. Такая ситуация свидетельствует о неидентифицируемости структуры модели. Структурная идентифицируемость имеет место тогда, когда две модели $M(B)$ и $M(B^*)$ с одинаковой структурой $M(\cdot)$ называются неразличимыми по выходу (обозначим это свойство $M(B^*) \approx M(B)$), $B, B^* \in \Omega$, если для любого допустимого входа $x(t)$ модели имеют одинаковые выходы $Y(t, B, x) \equiv Y(t, B^*, x)$ для любого $t \geq 0$ [5-7]. Структурная идентифицируемость обозначает идентифицируемость структуры не отдельно взятой модели, а целого семейства моделей [8].

Для анализа структурной идентификации предлагается множество различных методов и алгоритмов для динамических систем. Для линейных

систем анализ структурной идентифицируемости достаточно хорошо изучен. Для ее анализа существует ряд методов, например, метод передаточной функции [9], преобразование подобия, подходы, основанные на теории дифференциальной алгебры и теории графов [10].

Однако для нелинейных объектов выполнять анализ структурной идентифицируемости гораздо сложнее. Это связано с тем, что число неизвестных параметров модели может оказаться больше, чем число уравнений в системе [11]. Для таких объектов анализ структурной идентифицируемости проводят с использованием таких методов, как разложение функции выхода Y в ряд Тейлора и исследование собственных чисел информационной матрицы Фишера [12].

Для анализа идентифицируемости моделей больших размерностей применим метод вероятностного алгоритма [13], который вычисляет параметры для системы с неизвестной структурой модели объекта. Алгоритм основан на алгебраическом вычислении ранга определенных степенных рядов выходных функций. Ранг требуется для вычисления степени трансцендентности (степени свободы области расширения, связанного с параметром). Несмотря на то, что данный алгоритм получил широкое распространение, он не позволяет определить источник неидентифицируемости и не группирует параметры в соответствии с их функциональными отношениями, а также не обеспечивает преобразований или репараметризаций, чтобы сделать модель идентифицируемой.

В случае когда требуется построить модель для промышленного массообменного процесса при неизвестной структуре модели, проблема структурной идентифицируемости остается актуальной [14].

Из имеющихся численных непараметрических методов по извлечению зависимостей из данных для массообменных процессов и оценивания идентифицируемости объектов наиболее эффективным является подход на основе алгоритма чередующихся условных математических ожиданий (alternating conditional expectation – ACE) [15].

В связи с этим для анализа структурной идентифицируемости исследуемого объекта предлагается использовать алгоритм ACE и дополнительной входной переменной, которая не коррелирует с откликом. Характерной особенностью данной работы является анализ структурной идентифицируемости модели для оценки показателя качества выходного продукта нелинейного массообменного технологического объекта (МТО) на основе экспериментальных данных. Кроме того, анализ структурной идентифицируемости моделей не исчерпывается лишь выяснением принципиальной возможности однозначного оценивания параметров $F(X, B)$. Значительное внимание уделяется выявлению определяемых преобразований $F(X, B)$, описы-

вающих исследуемый объект и влияющих на точность индекса структурной идентифицируемости. Для этого вводится понятие порогового значения индекса структурной идентифицируемости модели МТО. Он основан на учете физико-химических особенностей рассматриваемого массообменного ТО.

2. Объект исследования и постановка задачи

Рассматривается задача построения модели для оценки содержания реагента (%) в выходном (кубовом) продукте массообменного технологического процесса (МТП) в случае, когда структура модели неизвестна. Исследуемый МТП представлен на рис.1 и представляет собой две ректификационные колонны (К-1 и К-2) и расположенный между ними реактор синтеза.

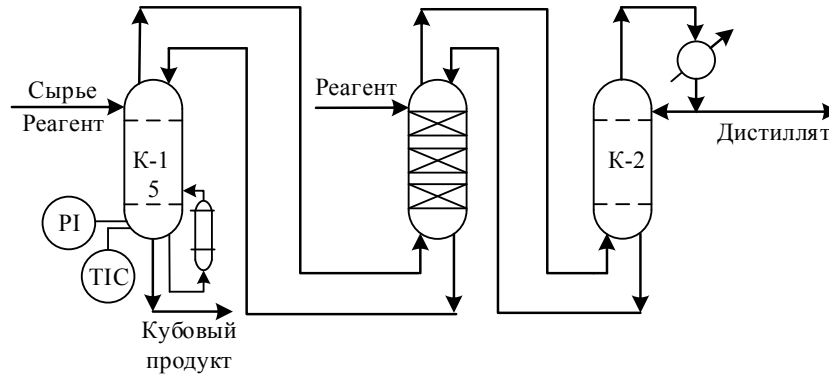


Рис.1. Технологическая схема МТО.

Структура аналитической модели объекта довольно сложна для практического применения. В общем виде ее можно представить в виде системы уравнений на каждой k -й ступени разделения для каждого l -го компонента, включающей уравнения материального баланса, уравнения энергетического баланса и уравнения фазового равновесия [16]:

$$\left\{ \begin{array}{l} L_{k+1}\tilde{x}_{k+1,l} + V_{k-1}\tilde{y}_{k-1,l} + F_k z_{k,l} - L_k\tilde{x}_{k,l} - V_k\tilde{y}_{k,l} = 0, \\ L_{k+1}h_{k+1} + V_{k-1}H_{k-1} + F_k H_{F_k} - L_k h_k - V_k H_k = 0, \\ \tilde{y}_{k,l}^* = \tilde{x}_{k,l} \gamma_{k,l}^L(p_{k,l}^0 / P), \\ E_k = (\tilde{y}_{k,l} - \tilde{y}_{k+1,l}) / (\tilde{y}_{k,l}^* - \tilde{y}_{k+1,l}), \\ \sum_{l=1}^c \tilde{y}_{k,l} - 1 = 0, \\ \sum_{l=1}^c \tilde{x}_{k,l} - 1 = 0, \end{array} \right. \quad \left(\begin{array}{l} l = 1, \dots, c, \\ k = 1, \dots, N \end{array} \right), \quad (1)$$

где $\tilde{y}_{k,l}$ – концентрация l -го компонента на k -й тарелке в паровой фазе; L_{k+1} – поток жидкости, поступающий на k -ю тарелку; $\tilde{x}_{k+1,l}$ – концентрация l -го компонента, поступающего на k -ю тарелку в жидкой фазе; V_{k-1} – паровой поток, покидающий k -ю тарелку; $\tilde{y}_{k-1,l}$ – концентрация l -го компонента, покидающего k -ю тарелку в паровой фазе; F_k – расход сырья, поступающего на k -ю тарелку; $z_{k,l}$ – количество l -го компонента в сырье, поступающего на k -ю тарелку; L_k – поток жидкости на k -й тарелке; $\tilde{x}_{k,l}$ – концентрация l -го компонента на k -й тарелке в жидкой фазе; V_k – паровой поток на k -й тарелке; $\gamma_{k,l}^L$ – коэффициент активности l -го компонента в жидкой фазе на k -й тарелке (использована модель UNIQUAC); p_l^0 – парциальное давление l -го компонента; P – общее давление в системе; E_k – эффективность массопереноса по Мерффри на k -й тарелке; h_{k+1} – энтальпия жидкости, поступающей на k -ю тарелку; H_{k-1} – энтальпия пара, покидающего k -ю тарелку; H_{F_k} – энтальпия питания на k -й тарелке; h_k – энтальпия жидкости на k -й тарелке; H_k – энтальпия пара на k -й тарелке; c – общее количество компонентов в системе; N – общее количество тарелок в ректификационной колонне.

Основная проблема, связанная с использованием аналитической модели, заключается в том, что E_k является неизвестной величиной. Также не известен состав сырья, поэтому использовать аналитическую модель напрямую для оценки концентрации реагента в кубовом продукте невозможно. В связи с этим на практике широкое распространение получили линейные регрессионные модели вида

$$\hat{Y} = \hat{\beta}_0 + \sum_{i=1}^p \hat{\beta}_i x_i, \quad (2)$$

где x_i – входные переменные, доступные измерению в каждый период времени; \hat{Y} – оцененное значение выходной переменной объекта Y ; p – количество входных переменных; $\hat{\beta}_0$ – свободный член; $\hat{\beta}_i$ – коэффициенты параметров модели.

В случае использования множественной регрессии структура модели должна быть определена, что сводит проблему к оценке коэффициентов параметров модели. Когда связь между откликом и предикторами неизвестна или неточна, линейная параметрическая регрессия может привести к ошибочным результатам. Наиболее эффективным подходом для анализа структурной идентифицируемости моделей для оценки показателей качества в

выходном продукте нелинейных МТО в условиях структурной неопределенности является непараметрический подход на основе АСЕ алгоритма. Это обосновано тем, что оптимальные преобразования, полученные в результате использования АСЕ, не требуют априорных предположений о виде функций, связывающих выход и входные переменные.

Тогда для p входных переменных x_i , $i = 1, \dots, p$, и выхода Y модель технологического объекта имеет следующий вид:

$$Y = F(X, B) + \varepsilon, \quad (3)$$

где $X = (x_1, \dots, x_p)$ – вектор входных контролируемых технологических переменных; $B = (\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_p)$ – вектор коэффициентов; ε – погрешность измерения выходной переменной.

Задача состоит в том, чтобы выяснить возможность построения адекватной математической модели для оценки концентрации реагента в кубовом продукте исследуемого процесса на обучающей выборке. Анализ структурной идентифицируемости объекта предлагается провести на основе расчета индекса структурной идентифицируемости с использованием алгоритма АСЕ и введением дополнительной некоррелируемой с выходом входной переменной. Под индексом структурной идентифицируемости H_Y понимается степень зависимости выхода от различного набора входных переменных. Для оценивания степени структурной идентифицируемости объекта вычисленные значения H_Y сравниваются с пороговым значением индекса структурной идентифицируемости H_{lv} , который предлагается определить на основе аналитической модели рассматриваемого МТО (1), учитывающей физико-химические особенности процесса.

3. Описание алгоритма условных чередующихся математических ожиданий (АСЕ)

Регрессионная модель АСЕ имеет следующую общую форму:

$$\theta(Y) = \sum_{i=1}^p \phi_i(x_i) + \varepsilon, \quad (4)$$

где θ – функция при переменной отклика Y ; ϕ_i – функции входных переменных (предикторов) x_i , $i = 1, \dots, p$.

Таким образом, модель АСЕ замещает проблему оценки линейной функции p -мерной переменной $X = (x_1, x_2, \dots, x_p)$ оценкой p отдельных одномерных функций ϕ_i и θ , используя итеративный метод. Эти преобра-

зования достигаются минимизацией необъясненного отклонения линейного соотношения трансформированной переменной отклика от суммы трансформированных 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 (ε^2), которое осталось необъясненным регрессией преобразованных зависимых переменных на сумму преобразованных независимых переменных (при условии $E[\theta^2(Y)] = 1$):

$$\varepsilon^2(\theta, \phi_1, \dots, \phi_p) = E \left\{ \left[\theta(Y) - \sum_{i=1}^p \phi_i(x_i) \right]^2 \right\}. \quad (5)$$

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

$$\phi_i(x_i) = E \left[\theta(Y) - \sum_{j \neq i}^p \phi_j(x_j) \mid x_i \right], \quad (6)$$

$$\theta(Y) = E \left[\sum_{i=1}^p \phi_i(x_i) \mid Y \right] / \left\| E \left[\sum_{i=1}^p \phi_i(x_i) \mid Y \right] \right\|. \quad (7)$$

Уравнения (6) и (7) составляют основу алгоритма АСЕ [15]. 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 $\theta^*(Y)$. Отклик и предикторы соотносятся следующим образом:

$$\theta^*(Y) = \sum_{i=1}^p \phi_i^*(x_i) + \varepsilon^*, \quad (8)$$

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

Оптимальные преобразования АСЕ получают численно на основе данных технологического объекта и не требуют априорных предположений о конкретной функциональной форме, связывающей отклик с предикторами [17].

4. Алгоритм анализа структурной идентифицируемости нелинейного процесса

Для анализа структурной идентифицируемости в качестве исходной информации служат базовая матрица (матрица данных, сформированная из выборки, содержащей значения входных и выходной переменных), число возмущенных матриц данных M , получаемых из базовой матрицы путем добавления к ее элементам малых случайных чисел.

Шаг 1. Базовую матрицу преобразуем в расширенную матрицу данных размера $K \times (p+2)$, где K – количество наблюдений, p – количество предикторов, $p+1$ – не коррелируемый с выходом дополнительный нормально распределенный вход ξ с математическим ожиданием $\mu=0$ и дисперсией $\sigma^2=2.5$ ($\xi \in N(-2.5; 2.5)$) и $p+2$ – переменная отклика Y .

Шаг 2. Получаем базовый набор векторов оптимальных преобразований по каждому входу исследуемого объекта $\Phi_i = \phi_i^*(X_i)$, применяя алгоритм АСЕ к расширенной матрице данных:

$$\begin{aligned} \Phi_i^{basic}(x_i) &= (\Phi_i^{basic,1}, \dots, \Phi_i^{basic,j}, \dots, \Phi_i^{basic,K})^T, \\ i &= 1, \dots, p+2, \quad x_{p+1} = \xi, \quad x_{p+2} = Y \end{aligned} \quad (9)$$

и вектор разностей (базовая матрица оптимальных преобразований)

$$\Delta\Phi_i^{basic} = (\Delta\Phi_i^{basic,1}, \dots, \Delta\Phi_i^{basic,k}, \dots, \Delta\Phi_i^{basic,K-1})^T, \quad (10)$$

в котором

$$\Delta\Phi_i^{basic,k} = \Phi_i^{basic,k+1} - \Phi_i^{basic,k}, \quad k = 1, \dots, K-1. \quad (11)$$

Шаг 3. Из базовой матрицы формируем набор матриц размера $K \times (p+2)$ для получения векторов оптимальных преобразований, используя возмущающие воздействия. Для этого к переменным x_i , $i = 1, 2, \dots, p, p+1, p+2$, добавляем малые случайные числа $\alpha_k^q = \varepsilon_k^q \in N(-2.5; 2.5)$ и уменьшаем полученные числа на 0.02% от среднего по y $\left(\alpha_k^q = \varepsilon_k^q \cdot 0.0002 \cdot \frac{\sum_{k=1}^K y_k}{y} \right)$, $k = 1, \dots, K$, $q = 1, \dots, M$ (преобразованная матрица с добавлением малых случайных чисел α_k^q).

Шаг 4. Находим множество векторов оптимальных преобразований и разностей:

$$\Phi_i^q(x_{\alpha,i}) = (\Phi_{\alpha,i}^{q,1}, \dots, \Phi_{\alpha,i}^{q,j}, \dots, \Phi_{\alpha,i}^{q,K})^T, \quad i = 1, \dots, p+2, \quad q = 1, \dots, M, \quad (12)$$

$$\Delta\Phi_{\alpha,i}^q = (\Delta\Phi_{\alpha,i}^{q,1}, \dots, \Delta\Phi_{\alpha,i}^{q,k}, \dots, \Delta\Phi_{\alpha,i}^{q,K-1})^T, \quad (13)$$

где $x_{\alpha,i} = x_i^k + \alpha_k^q$, $\Delta\Phi_{\alpha,i}^{q,k} = \Phi_{\alpha,i}^{q,k+1} - \Phi_{\alpha,i}^{q,k}$, $k = 1, \dots, K-1$, T – знак транспонирования.

Шаг 5. Нормализация векторов $\Delta\Phi_i^b$, $\Delta\Phi_i^q$ и преобразование полученных векторов разностей (10) и (13) к следующему виду:

$$\Delta\Phi_{m,i}^{basic} = (\Delta\Phi_{m,i}^{basic,1}, \dots, \Delta\Phi_{m,i}^{basic,k}, \dots, \Delta\Phi_{m,i}^{basic,K-1})^T, \quad (14)$$

$$\Delta\Phi_{m,i}^q = (\Delta\Phi_{m,i}^{q,1}, \dots, \Delta\Phi_{m,i}^{q,k}, \dots, \Delta\Phi_{m,i}^{q,K-1})^T, \quad q = 1, \dots, M, \quad (15)$$

где $\Delta\Phi_{m,i}^{basic,k} = \Delta\Phi_{\alpha,i}^{basic,k} / S_i^{basic}$, $\Delta\Phi_{m,i}^{q,k} = \Delta\Phi_{\alpha,i}^{q,k} / S_i^q$, индекс m – признак усреднения разностей

$$\Delta\Phi_{\alpha,i}^{basic,k}, \Delta\Phi_{\alpha,i}^{q,k}, S_i^{basic} = ((\Delta\Phi_{\alpha,i}^{basic} - \overline{\Delta\Phi_{\alpha,i}^{basic}})^2 / (K-2))^{1/2},$$

$$S_i^q = ((\Delta\Phi_{\alpha,i}^q - \overline{\Delta\Phi_{\alpha,i}^q})^2 / (K-2))^{1/2}, \quad \overline{\Delta\Phi_{\alpha,i}^{basic}} = \sum_{k=1}^{K-1} (\Delta\Phi_{\alpha,i}^{basic,k}) / (K-1),$$

$$\overline{\Delta\Phi_{\alpha,i}^q} = \sum_{k=1}^{K-1} (\Delta\Phi_{\alpha,i}^{q,k}) / (K-1).$$

Шаг 6. Находим отклонения разностей (14) базовых оптимальных преобразований от разностей (15) для каждого $q = 1, \dots, M$:

$$\Delta V_i^{q,k} = \Delta\Phi_{m,i}^{basic,k} - \Delta\Phi_{m,i}^{q,k}, \quad i = 1, \dots, p+2, \quad k = 1, \dots, K-1, \quad (16)$$

из которых формируем последовательность векторов:

$$\Delta V_i^q = (\Delta V_i^{q,1}, \dots, \Delta V_i^{q,k}, \dots, \Delta V_i^{q,K-1})^T, \quad i = 1, \dots, p+2. \quad (17)$$

Шаг 7. Получаем количественную оценку отклонений ΔV_i^q из (17):

$$\Delta E_i^q = \sum_{k=1}^{K-1} |\Delta V_i^{q,k}|, \quad i = 1, \dots, p+2, \quad q = 1, \dots, M. \quad (18)$$

Шаг 8. Определяем индекс структурной идентифицируемости по i -й переменной:

$$H_i = \Delta E_{m,p+1} / \Delta E_{m,i}, \quad i = 1, \dots, p+2, \quad (19)$$

где $\Delta E_{m,i} = \sum_{q=1}^M \Delta E_i^q / M$, а ΔE_i^q вычисляется по (18), $H_{p+2} = H_Y$.

Шаг 9. Полученные индексы структурной идентифицируемости H_Y из (19) сравниваем с соответствующим пороговым значением H_{lv} . Если $H_Y > H_{lv}$, то объект идентифицируем, в противном случае он неидентифицируем на основе предоставленных данных.

5. Анализ структурной идентифицируемости на синтетическом примере

Чтобы продемонстрировать работу ACE алгоритма, при определении функциональной зависимости между зависимыми и независимыми переменными использовали синтетический пример, в котором известны функциональные зависимости.

Пусть объект задается функциональной зависимостью следующего вида:

$$y = \sin(x_1) + \sin(1.7 \cdot x_2) + \sin(3.4 \cdot x_3) + \cos(2.4 \cdot x_4) + \varepsilon. \quad (20)$$

По уравнению (20) и входным переменным $x_i, i = 1, \dots, 4$, на которые наложены ограничения $-2.5 \leq x_1, \dots, x_4 \leq 2.5$, формируется выборка объема $K = 1000$, представляющая собой матрицу размера $(K \times 5)$. Расширенную выборку получаем путем включения в исходную выборку дополнительного некоррелированного с выходом Y входа x_{err} , $x_{err} \in N(-2.5; 2.5)$, $x_5 = x_{err} \cdot 0.0002$, где x_5 – дополнительный вход, некоррелируемый с выходом, $-0.0025 \leq \varepsilon \leq 0.0025$.

Анализ коэффициентов парной корреляции и корреляционных отношений, полученных на исходной выборке (табл. 1), не позволяет сделать вывод о возможной структуре модели.

Таблица 1. Коэффициенты корреляционных связей.

Переменные	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	Y
Корреляционные связи						
Коэффициенты парной корреляции	0.5178	0.1161	0.1339	0.0207	0.0536	1.0000
Корреляционные отношения	0.5586	0.4111	0.4314	0.3991	0.0780	1.0000

Применяя алгоритм ACE к расширенной выборке, формируем базовый набор векторов оптимальных преобразований $\Phi_i^{basic}(x_{\alpha,i})$, графически представленный на рис.2 и свидетельствующий о достаточно точно найденной структуре модели.

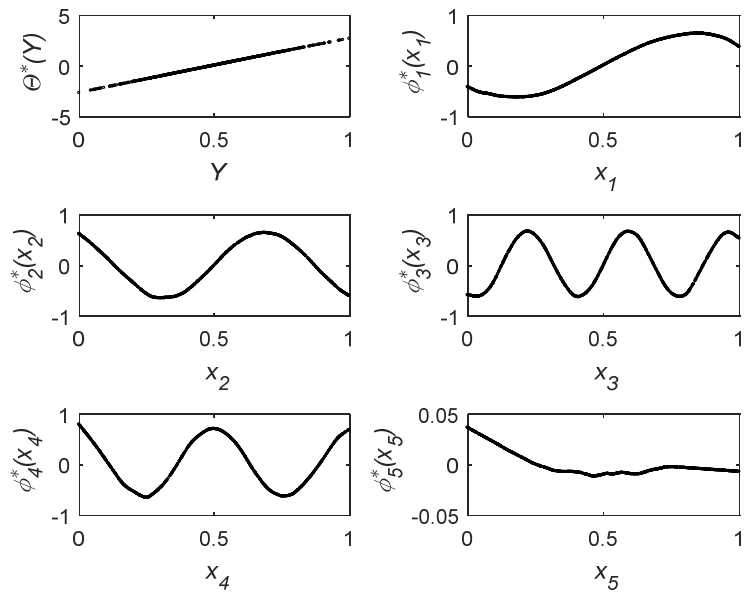


Рис.2. Результат применения алгоритма ACE к элементам базовой матрицы.

Для анализа структурной идентифицируемости при $M=25$ (где M – количество итераций повторения цикла) получено 25 векторов оптимальных преобразований, которые были сравнены с базовыми оценками модели.

В табл.2 приведены результаты применения предложенного подхода.

Таблица 2. Параметры структурной идентифицируемости для H_i .

Параметр	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	Y
$\Delta E_{m,i}$	0.0009	0.0007	0.0023	0.0037	0.0394	0.0002
H_i	45.67	76.69	20.92	16.39	1.00	224.58

Значение $\Delta E_{m,5} = 0.0394$ означает, что параметр при входе x_5 неидентифицируем. Остальные значения $\Delta E_{m,i}$ (средние суммы расстояний между точками базовой оценки модели от текущей оценки модели для выхода и каждого входа) полностью подтверждают существование нелинейной модели для исследуемого объекта и могут служить признаком его идентифицируемости. Величины H_i отражают вклад каждой переменной относительно неидентифицируемого дополнительного входа. Полученные результаты соответствуют описанию (20). Таким образом, объект идентифицируем, поскольку значение показателя идентифицируемости для выхода $H_Y = 224.58$, что значительно больше заданного порогового значения $H_{lv} = 35.16$ при ошибке 15%, когда $R^2 < 0.7$.

Пороговое значение H_Y определяется экспериментальным путем варьированием H_Y в интервале ошибки (%) [0; 35] от среднего значения каждой входной переменной. Результаты приведены на рис.3.

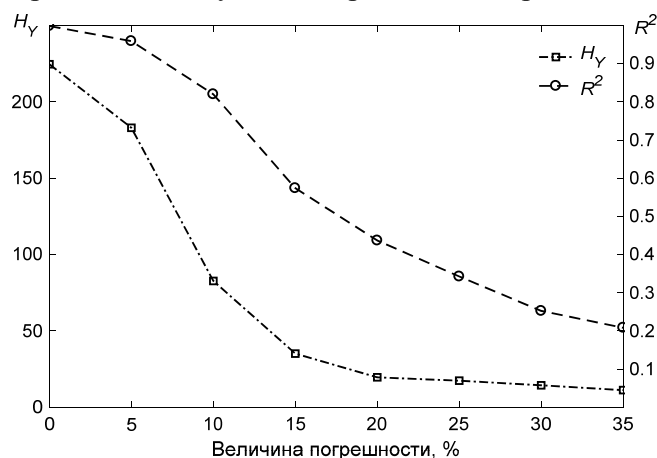


Рис.3. Зависимость H_Y и R^2 от зашумленности синтетических данных.

Если $H_Y < 35.16$, то модель неидентифицируема. При $H_Y > 35.16$ чем выше H_Y , тем точнее будет модель.

6. Анализ структурной идентифицируемости на примере МТО

При построении модели для оценки концентрации реагента в кубовом продукте ректификационной колонны К-1 использовались данные с реального ТО. В качестве входных переменных модели были выбраны температура (x_1 – ТГС, °С) и давление (x_2 – РИ, МПа) куба ректификационной колонны К-1.

Анализ коэффициентов парной корреляции и корреляционных отношений, полученных на исходной выборке (табл.3), не позволяет сделать вывод о возможной структуре модели.

Таблица 3. Коэффициенты корреляционных связей.

Переменные	x_1	x_2	x_3	Y
Корреляционные связи				
Коэффициенты парной корреляции	-0.7822	-0.0800	-0.0330	1.0000
Корреляционные отношения	0.8496	0.2076	0.0969	1.0000

Для оценки идентифицируемости при $M=125$, получено 125 векторов оптимальных преобразований, проведено их сравнение с базовыми оценками модели (рис.4).

В табл.4 представлены результаты применения предложенного подхода.

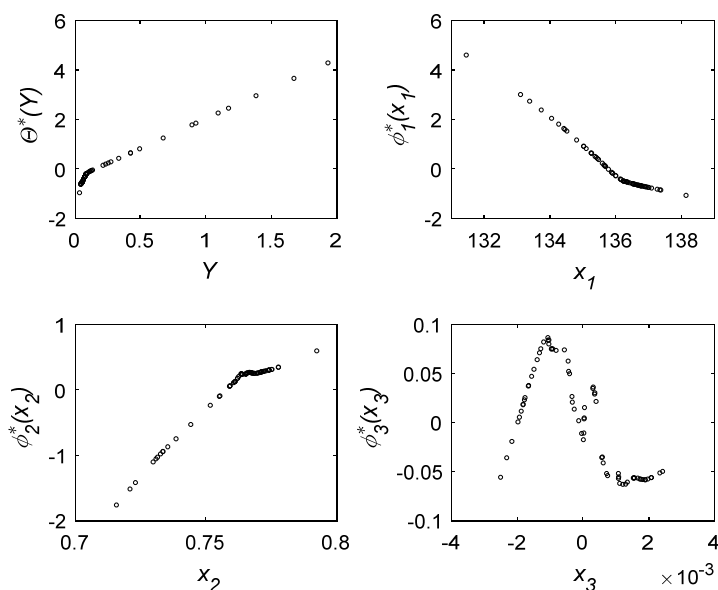


Рис.4. Результат применения алгоритма ACE к элементам базовой матрицы промышленных данных.

Таблица 4. Параметры структурной идентифицируемости для реального объекта.

Параметр	x_1	x_2	x_3	Y
$\Delta E_{m,i}$	0.0012	0.0029	0.0236	0.0004
H_i	9.3378	11.4167	1.0000	68.1348

Значение $\Delta E_{m,3} = 0.0236$ для входа x_3 позволяет сделать вывод о том, что его соответствующее преобразование $\phi_3(x_3)$ (4) неидентифицируемо. Остальные значения $\Delta E_{m,i}$ подтверждают существование нелинейной модели для исследуемого объекта. По представленным в табл.4 величинам индекса H_i можно сделать вывод о том, что объект структурно-идентифицируем, поскольку значение показателя индекса идентифицируемости для выхода проверочной выборки $H_Y = 68.1348$, что значительно больше заданного порогового значения $H_{lv} = 22.65$.

Пороговое значение H_{lv} определялось на сформированной выборке данных откалиброванной аналитической модели процесса в интервале ошибки (%) $[0; 25]$ от среднего значения каждой входной переменной (рис.5).

В данном случае $R^2 < 0.7$ тогда, когда зашумленность данных составляет 10 %, что соответствует пороговому значению $H_{lv} = 22.65$.

На основе экспериментальных данных технологического процесса с использованием различных методов аппроксимации (линейной, логариф-

мической, экспоненциальной, квадратичной) переменных, преобразованных алгоритмом ACE, для выходной переменной Y и входов x_1, x_2 [17] была получена модель вида

$$\hat{Y} = 551.78 - 9.95 \cdot x_1 + 0.05 \cdot x_1^2 + 369.01 \cdot x_2 + 77.24 \cdot x_2^2 - 3.51 \cdot x_1 x_2. \quad (21)$$

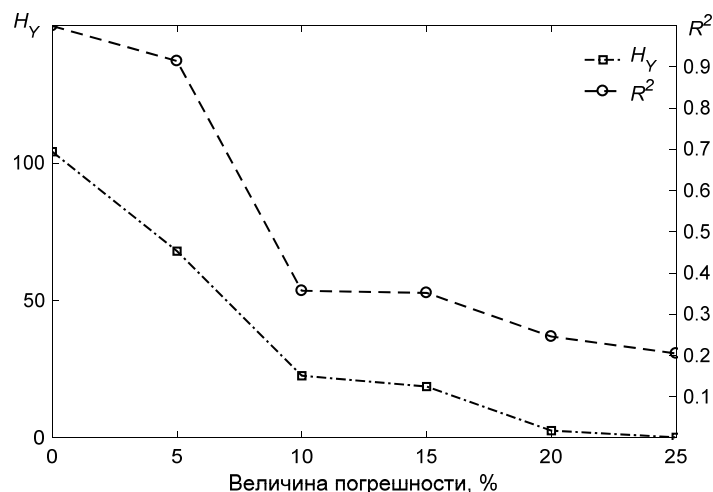


Рис.5. Зависимость H_Y и R^2 от зашумленности данных аналитической модели.

В табл.5 представлены коэффициенты детерминации (R^2) и квадратного корня средней квадратической ошибки (RMSE) параметрических моделей, полученных методом наименьших квадратов (МНК), робастной регрессией (РР), модели (21) и непараметрической модели, построенной на основе алгоритма ACE [18] для обучающей ($обуч$) и проверочной ($пров$) выборок.

Таблица 5. Значения R^2 и RMSE для представленных моделей.

Модель		$R^2_{обуч}$	$R^2_{пров}$	RMSE $_{обуч}$	RMSE $_{пров}$
Параметрическая	МНК	0.7988	0.0508	0.1728	0.2820
	РР	0.7949	0.2286	0.1745	0.2542
	Аппроксимация	0.8309	0.4111	0.1584	0.2221
Непараметрическая модель, построенная на основе алгоритма ACE		0.9967	0.9482	0.0129	0.0659

По результатам, представленным в табл.5, видно, что наиболее точно описывает исследуемый МТП непараметрическая модель, построенная на основе алгоритма ACE, в сравнении с другими методами. Результаты функционирования непараметрической модели, построенной на основе алгоритма ACE, и экспериментальные данные приведены на рис.6.

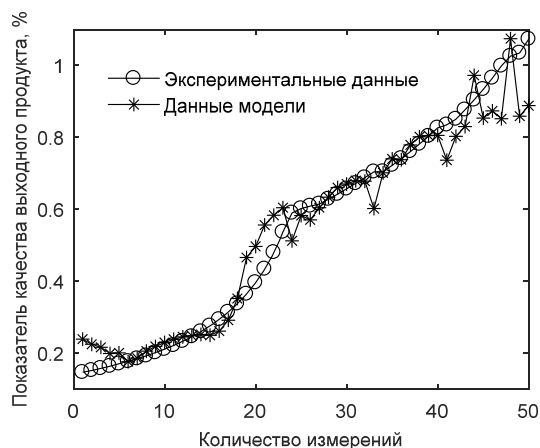


Рис.6. Результаты функционирования непараметрической модели, построенной на основе алгоритма ACE, для оценки показателя качества выходного продукта на проверочной выборке.

7. Заключение

В статье представлен метод анализа структурной идентифицируемости на основе алгоритма ACE с добавлением дополнительной некоррелируемой с выходом входной переменной в условиях неизвестной структуры модели МТП. Рассчитанное значение индекса структурной идентифицируемости H_Y на экспериментальных данных должно быть не менее ее порогового значения H_{lv} , которое может быть найдено заранее с использованием аналитической (учитывающей физико-химические закономерности) модели МТО. Проведение анализа структурной идентифицируемости с применением предложенного подхода на основе ACE позволяет избежать бесконечного перебора структур моделей и позволяет выяснить предел по максимальной точности модели, что продемонстрировано на синтетическом примере и реальных экспериментальных данных технологического процесса.

На примере построения моделей для оценки концентрации реагента в кубовом продукте в условиях нелинейности массообменного технологического объекта показано, что применение непараметрической модели, построенной на основе алгоритма ACE, позволяет повысить точность модели до $(0.2221 - 0.0659 / 0.2221) \cdot 100\% \approx 70.3\%$ RMSE в сравнении с нелинейной параметрической моделью (21) на проверочной выборке.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *M.J. Olanrewaju, B. Huang, A. Afacan.* Online composition estimation and experiment validation of distillation processes with switching dynamics // *Chemical engineering science*, 2010, v.65, №5, p.1597–1608.

2. *T. Chatterjee, D.N. Saraf*. On-line estimation of product properties for crude distillation units // *Journal of Process Control*, 2004, v.14, p.61-77.
3. *M. Kuhn, K. Johnson*. Applied predictive modeling. – New York: Springer, 2013, 600 p.
4. *G.B. Digo, N.B. Digo, A.V. Kozlov, S.A. Samotylova, A.Yu. Torgashov*. Structural and parametric identification of soft sensors models for process plants based on robust regression and information criteria // *Automation and remote control*, 2017, v.78, №4, p.724–731.
5. *E. Walter, L. Pronzato*. On the identifiability and distinguishability of nonlinear parametric models // *Mathematics and Computers in Simulation*, 1996, v.42, p.125–134.
6. *C. Cobelli, J.J. Distefano*. Parameter and structural identifiability concepts and ambiguities: a critical review and analysis // *American Physiological Society*, 1980, v.239, №1, p.7–24.
7. *M.J. Chappell, K.R. Godfrey*. Structural identifiability of the parameters of a nonlinear batch reactor model // *Mathematical Biosciences*, 1992, v.108, p.241–251.
8. *R. Bellman, K.J. Astrom*. On structural identifiability // *Mathematical Biosciences*, 1970, v.7, №3/4 p.329–339.
9. *N. Meshkat*. Identifiable reparametrizations of linear compartment models // *Symbolic Computation*, 2014, v.63, p.46–67.
10. *С.И. Кабанихин, Д.А. Воронов, А.А. Гродзь, О.И. Криворот'ко*. Идентифицируемость математических моделей медицинской биологии // *Вавиловский журнал генетики и селекции*, 2015, №19(6), с.738–744.
S.I. Kabanihin, D.A. Voronov, A.A. Grodz', O.I. Krivorot'ko. Identificiruemost' matematicheskikh modelej medicinskoj biologii // *Vavilovskij zhurnal genetiki i selekcii*, 2015, №19(6), s.738–744.
11. *M.J. Chappell, K.R. Godfrey, S. Vajda*. Global identifiability of the parameters of nonlinear systems with specified inputs: A comparison of methods // *Mathematical Biosciences*, 1990, v.102, №1, p.41–73.
12. *S. Vajda, H. Rabitz, E. Walter, Y. Lecourtier*. Qualitative and quantitative identifiability analysis of nonlinear chemical kinetic models // *Chemical Engineering Communications*, 1989, v.83, p.191–219.
13. *A. Sedoglavic*. A probabilistic algorithm to test local algebraic observability in polynomial time // *Symbolic Computation*, 2002, v.33, p.735–755.
14. *R. Brown*. Compartmental system analysis: state of the Art // *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*, 1980, №27(1), p.1–38.
15. *L. Breiman, J. Friedman*. Estimating optional transformations for multiple regression and correlation // *Journal of the American Statistical Association*, 1985, v.80, p.580–598.
16. *C.D. Holland*. Fundamentals of multicomponent distillation. – New York: McGraw-Hill Book Company, 1981, 633 p.
17. *D. Wang, M. Murphy*. Estimating optimal transformations for multiple regression using the ACE algorithm // *Journal of Data Science*, 2004, v.2, p. 329–346.
18. *И.С. Можаровский*. Способ построения непараметрической модели на основе алгоритма ACE // *XXXII Международная научная конференция «Математические методы в технике и технологиях ММТТ-32»*, 2019, т.9, с.39–43.
I.S. Mozharovskii. Sposob postroeniya neparametricheskoi modeli na osnove algoritma ACE // *XXXII Mezhdunarodnaya nauchnaya konferenciya «Matematicheskie metody v tekhnike i tekhnologiyah ММТТ-32»*, 2019, t.9, s.39–43.

Поступила в редакцию 10.09.2019

После доработки 10.09.2019

Принята к публикации 21.10.2019