

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ НЕПАРАМЕТРИЧЕСКИХ МЕТОДОВ ПРИ ПОСТРОЕНИИ МОДЕЛЕЙ ДЛЯ ОЦЕНКИ КАЧЕСТВА ВЫХОДНОГО ПРОДУКТА

И.С. Можаровский^{1,2}, С.А. Самотылова^{1,3}

¹Институт автоматизации и процессов управления ДВО РАН, Россия, Владивосток, samotylova@dvo.ru

²Владивостокский государственный университет экономики и сервиса, Россия, Владивосток, studvvsu@gmail.com

³Дальневосточный федеральный университет, Россия, Владивосток

Аннотация. Рассматриваются и сравниваются два непараметрических подхода при построении прогнозирующих моделей показателей качества выходного продукта массообменного технологического объекта. Приводятся результаты построения прогнозирующих моделей с использованием генерализованной регрессионной нейронной сети и метода, основанного на использовании алгоритма условных чередующихся математических ожиданий на примере синтетического примера и промышленного массообменного технологического объекта.

Ключевые слова: прогнозирующая модель, непараметрические методы, нейронная сеть, алгоритм АСЕ, нелинейность.

COMPARATIVE ANALYSIS OF NON-PARAMETRIC METHODS FOR MODELS DESIGN FOR ESTIMATION THE QUALITY OF AN OUTPUT PRODUCT

I.S. Mozharovskii^{1,2}, S.A. Samotylova^{1,3}

¹Institute of automation and control process FEB RAS, Russia, Vladivostok, samotylova@dvo.ru

²Vladivostok State University of Economics and Service, Russia, Vladivostok, studvvsu@gmail.com

³Far Eastern Federal University, Russia, Vladivostok

Abstract. Two nonparametric approaches for predictive models design for estimation the quality of an output product of mass-transfer technological plant are considered and compared. The results of predictive models design using a generalized regression neural network and a method based on the use of an algorithm of conditional alternating mathematical expectations using the example of a synthetic example and an industrial mass-transfer technological plant are presented.

Keywords: predictive model, nonparametric methods, neural network, ACE algorithm, nonlinearity.

В настоящее время существует проблема построения прогнозирующих моделей показателей качества массообменных технологических объектов (МТО) в условиях нестационарности. Эффективность прогнозирующих моделей непосредственно зависит от качества применяемых алгоритмов идентификации, которые должны обеспечивать минимальную ошибку прогноза. В связи с этим разработка новых методов предсказательного моделирования МТО, обеспечивающих повышение качества прогнозных значений выхода по сравнению с существующими методами в условиях неопределенности структуры и параметров модели, наличия нелинейностей в силу физико-химических особенностей процессов, погрешностей измерений выхода и влияния внешних неучтенных факторов остается актуальной задачей.

В большинстве случаев для определения зависимости (структуры) между входными контролируруемыми переменными X и выходом y , связанными некоторой функциональной зависимостью (1):

$$y = F(X, B), \tag{1}$$

где B – вектор коэффициентов, применяется корреляционный или регрессионный анализ.

Такой подход основан на предположении о возможности получения аналитически заданной функциональной зависимости (известной или заданной структуры) с последовательным уточнением значений ее коэффициентов. В реальных условиях большинство массообменных технологических объектов, являются слабо формализуемыми из-за недостаточности имеющихся знаний о них и среде, в которой они функционируют, поэтому такой подход обычно не вносит ясности в выбор

структуры модели. В случае нелинейности технологического процесса наиболее перспективными являются непараметрические методы [1, 2], в частности, искусственные нейронные сети (НС) [3] и алгоритм чередующихся условных математических ожиданий (alternating conditional expectation – ACE).

Ставится задача сравнения использования непараметрических методов при построении прогнозирующих моделей показателей качества МТО в условиях нелинейности.

В качестве синтетического примера рассмотрим нелинейную численную модель (зависимость) вида:

$$y = \sin(x_1) + \sin(1,7 \cdot x_2) + \cos(3,4 \cdot x_3) + \cos(2,4 \cdot x_4) + 0,01 \cdot x_5 \quad (2)$$

Для входных переменных x_i , $i = \overline{1,5}$ на которые наложены ограничения $-2,5 \leq x_i \leq 2,5$ формируется выборка объема $K = 500$, представляющая матрицу размера $(K \times 6)$. Таким же образом построена проверочная выборка объемом в $L = 50$. Прогнозирующие модели построены с использованием методов непараметрического моделирования: генерализованной регрессионной нейронной сети и подхода, основанного на использовании алгоритма условных чередующихся математических ожиданий, описанного в [4].

В качестве критериев точности построенных моделей использовали коэффициент детерминации (доля объяснённой дисперсии отклонений зависимой переменной от её среднего значения) (3) и квадратный корень из среднеквадратичной ошибки (4):

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_n^N (y_n - \hat{y}_n)^2}{\sum_n^N (y_n - \bar{y})^2}, \quad (3)$$

$$RMSE = \sqrt{\sum_n^N (y_n - \hat{y}_n)^2 / N}, \quad (4)$$

где y_n – наблюдаемое значение выходной переменной; \hat{y}_n – значение выходной переменной, предсказанное по модели; \bar{y} – среднее значение наблюдаемой выходной переменной; N – количество наблюдений.

Расчитанные критерии точности построенных моделей (2) с помощью генерализованной регрессионной нейронной сети (НС) и подходом на основе ACE алгоритма приведены в табл. 1.

Таблица 1. Результаты критериев точности построенных моделей на примере синтетических данных

Метод	Обучающая выборка		Проверочная выборка	
	R^2	$RMSE$	R^2	$RMSE$
НС	0,4629	0,2433	0,2891	1,0788
ACE	0,9826	0,0438	0,9837	0,1635

Точность прогнозирующих моделей представлена на рис. 1.

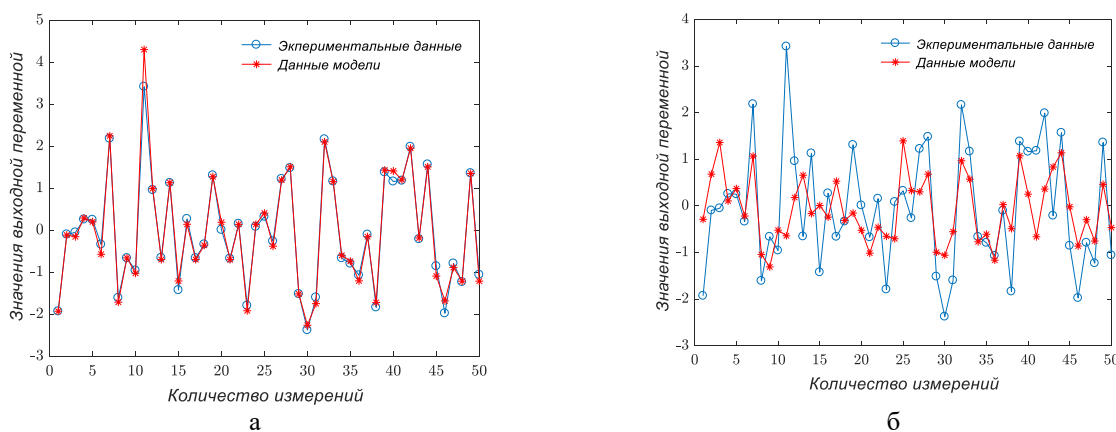


Рис. 1. Точность предсказания моделей:

а - непараметрическая модель ACE; б - непараметрическая модель, построенная на основе нейронных сетей

Дополнительным преимуществом применения алгоритма АСЕ к моделированию является то, что подход позволяет найти структуру модели (рис. 2). Как видно из рис. 2, структура найдена правильно и соответствует зависимости (2).

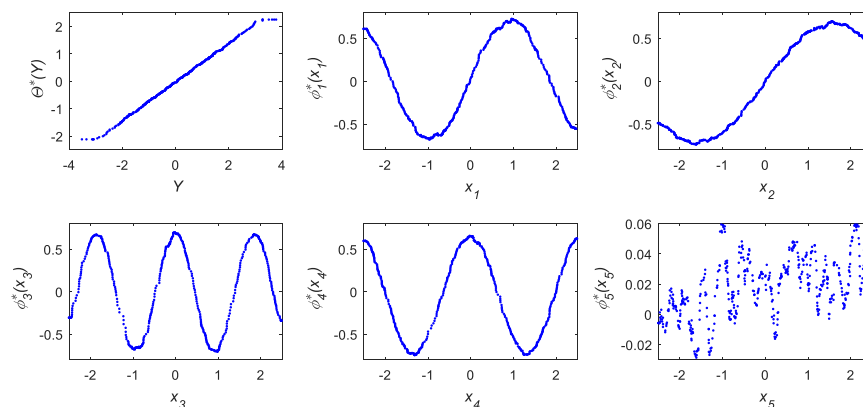


Рис. 2. Результат применения алгоритма АСЕ к элементам базовой матрицы

При построении модели для оценки содержания метанола в выходном (кубовом) продукте метил-трет-бутилового-эфира (МТБЭ) – компонента бензина, обладающего высоким октановым числом, использовались измеряемые технологические переменные: x_1 – температура нижней части ректификационной колонны К-1 (ТІ4), x_2 – давление низа реакционной колонны К-1 (РІ7) (рис. 3). Выход МТБЭ должен составлять 98 %. Основным показателем качества данного процесса является содержание метанола (MeOH) в МТБЭ, массовая доля которого не должна превышать 1,5 % в товарном продукте МТБЭ.

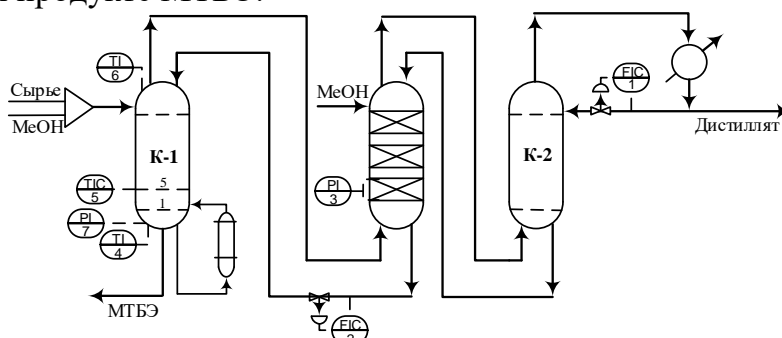


Рис. 3. Технологическая схема процесса производства МТБЭ

С использованием обучающей выборки размером (55×3) и проверочной выборки размером (17×3) , полученных на промышленном объекте исследования, построены модели с помощью непараметрических методов, и получены значения критериев точности, представленные в табл. 2.

Таблица 2. Результаты критериев точности построенных моделей на примере промышленного объекта

Метод	Обучающая выборка		Проверочная выборка	
	R^2	$RMSE$	R^2	$RMSE$
НС	0,9085	0,0454	0,7111	0,2055
АСЕ	0,9999	0,00014	0,9348	0,0977

Точность прогнозирующих моделей для оценки содержания метанола в выходном продукте МТБЭ представлена на рис. 4.

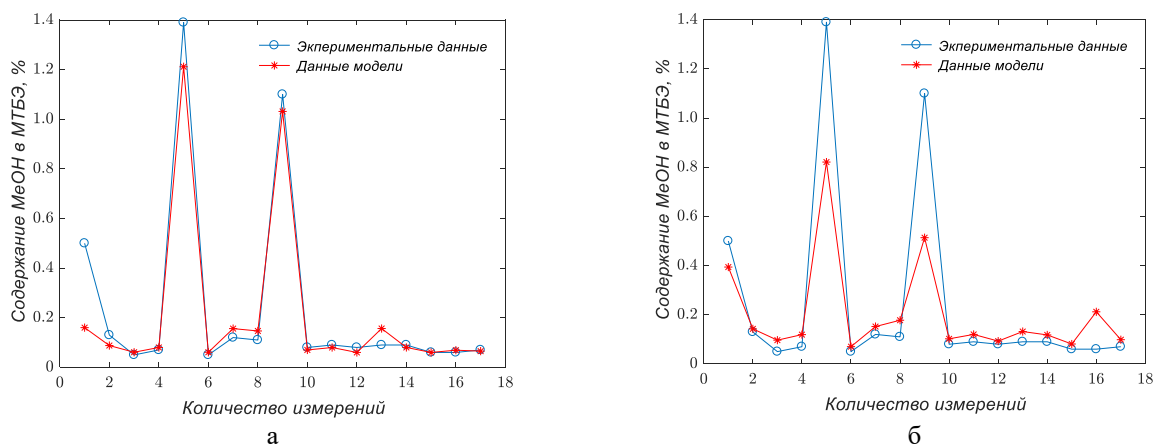


Рис. 4. Точность предсказания моделей для оценки содержания метанола в кубовом продукте: а - непараметрическая модель ACE; б - непараметрическая модель, построенная на основе нейронных сетей

Набор векторов оптимальных преобразований, графически представленный на рис. 5, отображает найденную структуру модели.

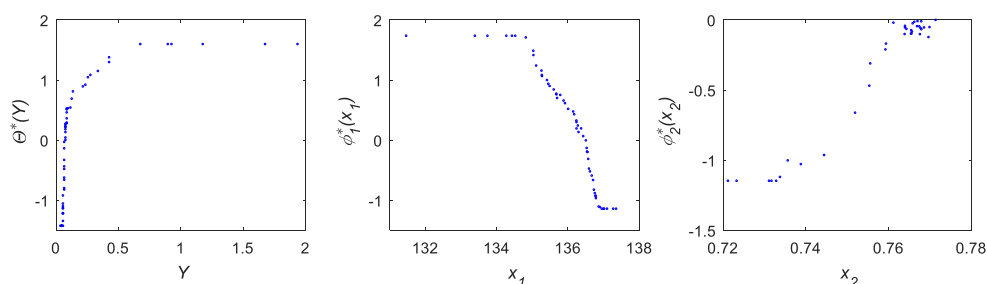


Рис. 5. Результат применения алгоритма ACE к элементам базовой матрицы промышленных данных

По результатам, представленным в табл. 1 и табл. 2, можно сделать вывод, что метод построения прогнозирующих моделей на основе ACE алгоритма хорошо подходит для моделирования сложных нелинейных объектов и позволил более точно описать слабо формализуемый МТО (улучшение значения R^2 на $100 \cdot (0,9348 - 0,7111) / 0,9348 = 24\%$ в сравнении с генерализованной регрессионной нейронной сетью на проверочной выборке).

Библиографический список

1. Hengl S., Kreutz C., Timmer J., Maiwald T. Data-based identifiability analysis of non-linear dynamical models // *Bioinformatics*. 2007. V. 23. No. 19. P. 2612-2618.
2. Di Ciaccio A., Montanari G.E. Non-parametric methods for data-mining applications // *Atti della XLI Riunione scientifica della Societa italiana di Statistica. Sessioni plenarie e Sessioni specializzate*. CLEUP – Padova. 2002. P. 339-348.
3. Tun M.S., Lakshminarayanan S., Emoto G. Data selection and regression method and its application to softsensing using multirate industrial data // *Journal of Chemical Engineering of Japan*. 2008. V. 41. No. 5. P. 374-383.
4. Можаровский И.С., Самотылова С.А., Торгашов А.Ю. Предсказательное моделирование массообменного технологического объекта с использованием алгоритма чередующихся условных математических ожиданий // *Математическое моделирование*. 2020. Т. 32. № 3. С. 127-142.