Гусев Кирилл Вячеславович

АВТОМАТИЗАЦИЯ КОНТРОЛЯ КАЧЕСТВА НЕФТЕПРОДУКТОВ ДЛЯ ОБЕСПЕЧЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОГО УПРАВЛЕНИЯ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИМ ПРОЦЕССОМ

Специальность 2.3.3 – Автоматизация и управление технологическими процессами и производствами

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание учёной степени кандидата технических наук

Работа выполнена на кафедре «Математического обеспечения и стандартизации информационных технологий» Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «МИРЭА — Российский технологический университет» (РТУ МИРЭА).

Научный руководитель

- Красников Степан Альбертович

доктор технических наук, профессор кафедры математического обеспечения и стандартизации информационных технологий ФГБОУ ВО «МИРЭА — Российский технологический университет»,

Официальные оппоненты

Хвостов Анатолий Анатольевич

доктор технических наук, профессор кафедры прикладной математики и механики ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет»

- Гончаров Андрей Витальевич кандидат технических наук, доцент ФГБОУ ВО «Московский государственный университет технологий и управления имени К.Г. Разумовского (Первый казачий университет)» заведующий кафедрой систем автоматизированного управления.

Ведущая организация

- ФГБОУ ВО "Московский государственный технологический университет "СТАНКИН", г. Москва.

Защита диссертации состоится «26» сентября 2024 г. в 12 час.00 мин на заседании Диссертационного совета 24.2.334.01 (Д212.148.02) при ФГБОУ ВО «Российский биотехнологический университет» по адресу: 109316, г. Москва, ул. Талалихина, д. 33, конференц-зал.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ФГБОУ ВО «РО-СБИОТЕХ» и на сайте: http://www.mgupp.ru.

Отзыв на автореферат в двух экземплярах, заверенные гербовой печатью, просьба направлять по адресу: 125080, г. Москва, Волоколамское шоссе, д.11, ФГБОУ ВО «РОСБИОТЕХ».

Автореферат разослан	«»	2024 г.	
Учёный секретарь диссертационного совета	24 2 334 01 (П2	12 148 02)	
кандидат технических нау		, .	окрушин С.А.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы.

Улучшение качества товаров нефтяной промышленности, а также повышение их конкурентоспособности на мировой арене являются ключевыми факторами для развития экономики страны и повышения безопасности использования нефтепродуктов. Модернизация технологий и процессов производства позволяет создавать нефтепродукты высокого качества и сохранять это качество на всех этапах производства. Это способствует укреплению позиций российских компаний на мировых рынках и повышению доверия потребителей к отечественной продукции.

Однако улучшение технологий неотделимо от совершенствования систем контроля качества как на этапе производства, так и в лабораторных условиях, с целью своевременного получения достоверных данных о качестве выпускаемой продукции. В процессе производства качество нефтепродуктов может изменяться, как и их значения физико-химических свойств. Этому воздействие сторонних фактов. способствует Возникает минимизации таких изменений. Встаёт вопрос об автоматизации контроля качества нефтепродуктов, а также об актуальном и своевременном получении информации обо всех изменениях в процессе производства. Данную оперативную информацию онжом получать, при непрерывном автоматизированном процессе контроля качества нефтепродуктов.

Анализ системы контроля качества нефтепродуктов на нефтеперерабатывающих заводах (НПЗ) в России выявил ряд недостатков, которые заключаются в:

- низком уровне автоматизации процессов контроля качества на этапах производства и использования нефтепродуктов;
- разрозненности процессов лабораторного, текущего и виртуального контроля качества нефтепродуктов на НПЗ, которая затрудняет его осуществление и точность проведения;
- неудовлетворительном уровне разработки и использования экспрессметодик тестирования нефтепродуктов на предприятиях НПЗ.

Следовательно, вопрос комплексного улучшения контроля качества нефтепродуктов в процессе производства и использования имеет важное экономическое значение.

В решение круга проблем, связанных с разработкой систем технологического (операционного) контроля нефтепродуктов, в том числе интеллектуальных систем, используемых для автоматизированного регулирования технологических процессов, существенный вклад внесли: Алаторцев Е.И., Большаков О.В., Вагин В.А., Веретенников А.В., Егоров А.Ф., Жижин Г.Н., Краснов А.Е. Костогрызов А.И., Laurens van der Maaten и др.

На основании полученных данных были разработаны рекомендации по совершенствованию системы автоматизированного контроля качества автомобильного бензина и его компонентов. Эти рекомендации включают в

себя использование современных датчиков и приборов, а также разработку новых алгоритмов обработки данных.

Предложено внедрить в технологический процесс экспертнонейросетевую систему (ЭНС), использующую нейронные сети, искусственный интеллект и вычислительные системы в реальном масштабе времени.

Данное решение даёт возможности:

- производить автоматизированный контроль качества нефтепродуктов во время всех этапов технологического процесса их производства; в результате на выходе автоматически определяется качество производимого продукта, сравнивая его показатели со стандартными и задаваемыми;
 - соблюдать непрерывность производства;
- снизить процент получения некондиционных нефтепродуктов и уменьшить финансовые затраты в технологический процесс их производства, о чём свидетельствуют Акты об использовании ЭНС в автоматизированном процессе контроля качества нефтепродуктов.

В диссертации разработаны, совершенствованы и внедрены алгоритмы и способы функционирования ЭНС для осуществления автоматизированного контроля качества нефтепродуктов на примере автомобильного бензина.

В связи с тем, что предлагаемое решение позволяет устранить выявленные недостатки применяемых систем контроля качества нефтепродуктов, тема «Автоматизация контроля качества нефтепродуктов для обеспечения эффективного управления технологическим процессом» является актуальной по научной специальности 2.3.3 — Автоматизация и управление технологическими процессами и производствами.

Диссертация соответствует паспорту специальности 2.3.3, а именно пунктам 2, 6, 11 и 12.

Целью диссертационной работы является повышение эффективности управления технологическим процессом в части оперативности и достоверности автоматизированного контроля качества продуктов нефтеперерабатывающей промышленности.

Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие задачи.

- 1. Провести анализ действующих систем контроля качества и технических средств управления технологическим процессом производства нефтепродуктов для определения области внедрения ЭНС в функциональную схему автоматизации.
- 2. Построить структуру системы идентификации больших данных на основе объединения экспертного и нейросетевого подходов.
- 3. Адаптировать математические модели, содержащиеся в базе знаний, к параметрам показателей качества продуктов нефтеперерабатывающей промышленности (автомобильных бензинов) по их спектральным данным.

- 4. Разработать на языке высокого уровня программное обеспечение ЭНС автоматизированного контроля качества нефтепродуктов на примере автомобильных бензинов по их спектральным данным для системы усовершенствованного управления технологическим процессом;
- 5. Внедрить ЭНС в систему управления технологическим процессом для повышения эффективности в части оперативности и достоверности автоматизированного контроля качества автомобильных бензинов.

Объектом исследования является автоматизация контроля и испытания показателей качества продуктов нефтеперерабатывающей промышленности (автомобильных бензинов).

Предметом исследования является методика построения ЭНС идентификации больших данных, основанная на совокупности моделей взаимодействия экспертных и нейросетевых технологий для автоматизированной системы контроля качества управления технологическим процессом.

Методы и средства исследований. Научные исследования по применению ЭНС в автоматизированном контроле качества нефтепродуктов проводились инфракрасными (ИК) Фурье-спектрометрами АФ-3 и ПФС-1, с помощью которых были получены спектральные данные автомобильных бензинов для их анализа в ЭНС.

Для решения поставленных задач применяли методологию основ интеллектуальных систем управления, математические основы построения реляционных баз данных, искусственного интеллекта и нейронных систем. Программное обеспечение - Java. Графическая обработка выполнялась с применением табличного редактора. Численная обработка выполнялась с помощью методов математической статистики.

Научная новизна работы. В диссертационной работе впервые получены следующие научные результаты.

- 1. Разработана функциональная схема автоматизации производства автомобильного бензина с внедрением в неё ЭНС контроля качества.
- 2. Разработана методика построения ЭНС автоматизированного контроля качества нефтепродуктов на НПЗ по спектральным данным автомобильных бензинов с объединением экспертной и нейросетевой технологий идентификации больших данных в системе усовершенствованного управления технологическим процессом.
- 3. Разработана структура ЭНС идентификации больших данных в системе усовершенствования управления технологическим процессом.
- 4. Проведена адаптация математических моделей, содержащихся в базе знаний, по параметрам показателей качества автомобильных бензинов.

Практическая значимость диссертационной работы заключается в следующем.

1. Разработано программное обеспечение ЭНС идентификации больших данных автоматизированного контроля качества нефтепродуктов системы

усовершенствованного управления технологическим процессом на НПЗ в части её серверной и клиентской реализаций.

- 2. Разработанная ЭНС идентификации больших данных автоматизированного контроля качества обеспечивает поддержку процессов производства нефтепродуктов на НПЗ, что способствует повышению эффективности производства в части оперативности и достоверности результатов технологического контроля качества производимых нефтепродуктов.
- 3. Предложена и апробирована технология реализации ЭНС, функционирующей на персональных компьютерах и клиент-серверных структурах.

Научные и практические результаты, полученные в диссертации, внедрены в:

- учебном математического обеспечения процессе кафедры стандартизация информационных технологий института информационных ФГБОУ ВО АЄЧИМ» — Российский технологий технологический университет», а именно в лекционных и практических занятиях по дисциплинам «Структуры и алгоритмы обработки данных», «Технология программных приложений», «Системная И программная инженерия» программ высшего образования бакалавриата по направлениям 09.03.01 Информатика и вычислительная техника, 09.03.03 Прикладная информатика, 09.03.04 Программная инженерия;
- ФГБУН Научно-технологическом центре уникального приборостроения Российской академии наук (НТЦ УП РАН);
- ФГБУН Ордена Трудового Красного Знамени Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской академии наук (ИНХС РАН) специализированное предприятие, выполняющее проектирование в области разработки высокоэффективных процессов и катализаторов нефте- и газохимии, глубокой переработки традиционного и возобновляемого углеродсодержащего сырья в ценные продукты, в том числе полимерные
 - АО ИНСТИТУТ НЕФТЕХИМПЕРЕРАБОТКИ (АО «ИНХП»).

Разработанное программное обеспечение ЭНС защищено свидетельствами о государственной регистрации программ для ЭВМ № 2023669036 от 07.09.2023 и № 2023669265 от 12.09.2023.

Основные положения, выносимые на защиту.

- 1. Способ модификации системы контроля качества продуктов нефтеперерабатывающей промышленности для усовершенствования управления технологическим процессом.
- 2. Методика построения ЭНС технологического контроля качества автомобильных бензинов по их спектральным характеристикам с объединением экспертной и нейросетевой технологий идентификации больших данных в системе усовершенствованного управления технологическим процессом.

3. Программное обеспечение ЭНС технологического контроля качества нефтепродуктов на примере автомобильных бензинов по их спектральным данным для системы усовершенствованного управления технологическим процессом.

Личный вклад автора.

Представленные результаты работы являются итогом исследования, проводимого лично автором в 2021 – 2024 гг.

Степень достоверности результатов исследования.

Достоверность научных положений и обоснованность представленных в диссертационной работе результатов научного исследования, сформулированных на их основе выводов и рекомендаций обеспечиваются проработкой моделей исследуемого технологического процесса и применением математического аппарата.

Апробация работы.

Основные результаты диссертационной работы докладывались на Международная следующих научных форумах: метрологическая конференции «Актуальные вопросы метрологического обеспечения измерений расхода количества жидкостей газов. Качество углеводородного сырья (нефти и природного газа)», Казань, ФГУП «ВНИИМ им. Д. И. Менделеева, 2023г.; XXII Международная конференция «Алгебра, теория чисел, дискретная геометрия и многомасштабное моделирование: современные проблемы, приложения и проблемы истории», Тула, ТГПУ им. Л. Н. Толстого, 2023г.; II Международная научно-практическая конференция «Цифровые международные отношения 2023», Москва, МГИМО МИД, партнерами являются институт Информационных технологий РТУ МИРЭА, Институт системного программирования им. В.П. Иванникова РАН, 2023г.; Научно-практическая конференция международным участием «Современные проблемы автоматизации технологических процессов и РОСБИОТЕХ, 2023г.; XXVI Международной Москва, производств», конференции «Современные информационные технологии в образовании, науке и промышленности», в XXIV Международном конкурсе научных и научно-методических работ, Москва, Региональное Международной академии информатизации совместно с факультетом ИЗО и НР ФГБОУ ВО «ГУП», с факультетом политических и социальных технологий ФГБОУ ВО «РГСУ» и с ФГБОУ ВО «МГУТУ им. К.Г. Разумовского (ПКУ)», Москва 2023г.; Национальная научно-практическая конференция «Фундаментальные, поисковые, прикладные исследования и инновационные проекты», Москва, РТУ МИРЭА, 2023г.; Международной конференции «Современные информационные технологии в образовании, науке и промышленности», факультет ИЗО и НР ФГБОУ ВО «ГУП» ФГБОУ ВО «МГУТУ им. К.Г. Разумовского (ПКУ)», Москва, 8- $9.02.2024_{\Gamma}$; X Всероссийская научно-техническая конференция «Фундаментальные и прикладные аспекты компьютерных технологий и

информационной безопасности» круглый стол на тему «ИТ-тренды 2024» ФГБОУ ВО РТУ МИРЭА, Москва, 18.04.2024г; V Международной конференции «ФАБРИКА БУДУЩЕГО: переход к передовым цифровым, интеллектуальным производственным технологиям и роботизированным системам для отраслей пищевой промышленности», ФГБОУ ВО «РОСБИОТЕХ», Москва, 26 апреля 2024 г.

Результаты исследования представлялись и получили одобрение на 8 расширенных заседаниях кафедры математического обеспечения и стандартизации информационных технологий института информационных технологий ФГБОУ ВО «МИРЭА — Российский технологический университет».

Публикации.

По теме диссертации опубликовано 8 научных работ, в том числе 6 работ в рецензируемых научных периодических изданиях, рекомендованных ВАК РФ, и 2 тезиса в сборниках трудов конференций, и получено 2 свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ.

Структура и объем диссертации.

Диссертация состоит из введения, четырёх глав, заключения, списка литературы, двух приложений. Работа изложена на 151 страницах основного текста; она содержит 12 таблиц, 43 рисунков; список литературы включает 103 наименований, из которых 91 отечественных и 12 зарубежных авторов.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОЙ РАБОТЫ

Во введении была обоснована актуальность темы диссертационного исследования, охарактеризована степень её проработанности, поставлена цель и определены задачи исследования. Осуществлён выбор предмета и объекта исследования, а также показана научная новизна и практическая значимость работы.

В первой главе проведен анализ состояния контроля качества нефтепродуктов на НПЗ в России, который позволил выявить «узкие» места и возможные пути совершенствования системы контроля качества.

Показано, что одним из основных недостатков в нефтехимической промышленности является управление процессами, которые имеют сложную динамику и требуют постоянного мониторинга и регулирования. Например, при переработке нефти в различные фракции, необходимо поддерживать определенные параметры, чтобы обеспечить высокую эффективность процесса и минимизировать потери. В автоматизированном процессе основную роль играет система усовершенствованного управления технологическим процессом (СУУТП), так называемые АРС-системы, которые осуществляют автоматический контроль этих параметров и оптимальное оперативное управление.

Рассмотрено, что для внедрения в автоматизированные системы управления НПЗ требуются в первую очередь автоматические средства контроля качества нефти, продуктов ее переработки и нефтепродуктов. В качестве технических средств в технологическом контроле качества могут использоваться поточные и виртуальные анализаторы, выходные данные которых поступают в СУУТП. В качестве поточных анализаторов могут быть использованы и используются наряду с другими анализаторы на базе ИК-Фурье спектрометров.

Проведенный анализ литературных и патентных данных показал, что основными недостатками по созданию систем поточного (автоматизированного) анализа являются проблемы, связанные с необходимостью разработки программного обеспечения, позволяющего обрабатывать поступающие с них данные для применения в конкретных технологических схемах переработки нефти.

В качестве системы, позволяющей анализировать ИК-спектры поточных анализаторов предлагается использовать разработанную ЭНС, которая позволяет на основе ИК спектров идентифицировать показатели качества автомобильного бензина.

Во второй главе предложена модернизация системы контроля качества продуктов нефтеперерабатывающей промышленности для усовершенствования управления технологическим процессом.

Модернизация заключается во внедрении разработанной ЭНС в состав системы поточного анализа (СПА), где на вход ЭНС подаются ИК спектры снятые поточным анализатором, а результат работы ЭНС поступает в СУУТП,

что позволяет ей своевременно осуществлять автоматический контроль параметров нефтепродуктов и производить оптимальное оперативное управление, показанное на рисунке 1.

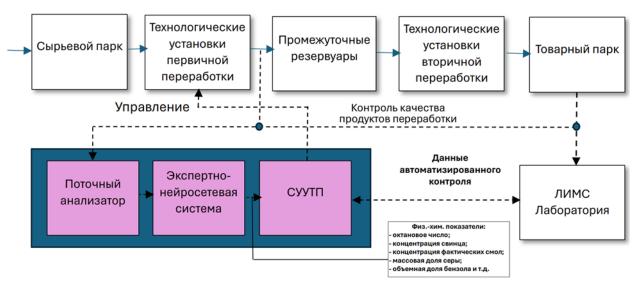


Рисунок 1 — Внедрение ЭНС в процесс функционирования подсистемы контроля качества на НПЗ

На рисунке 2 представлена функциональная схема автоматизации фракционирования автомобильного бензина с внедрением ЭНС, на которой показано, что после арматуры с пневмоприводом поз. UV028 поток автомобильного бензина проходит через поточный ИК Фурье спектрометр AE200-1 который формирует спектральные данные поступающие на контроллер ЭНС AT200-2. Данный процесс определяет физ.-хим. показатели автомобильного бензина. Например, если показатель октанового числа автомобильного бензина не соответствует заданному, то циркуляция прекращается и автомобильный бензин отправляется в резервуар, где отбирают пробу автомобильного бензина и осуществляют аналитический контроль по всем показателям.

Разработанная ЭНС представляет собой программный комплекс, включающий три компонента: интегрированную экспертную систему (ЭС); интегрированную нейронную сеть (НС); подсистему контроля. Общая схема функционирования интегрированной ЭНС представлена на рисунке 3.

Первый компонент, ЭС включает в себя: входной интерпретатор, необходимый для предварительной обработки спектральных данных; базу данных; базу знаний и машину логического вывода. ЭС используется для интерпретации, кластеризации (с учителем или без учителя), классификации (распознавания) данных, снижения их размерности, а также оценивания по спектральным данным сопутствующие им показатели, соответствующих объектов/процессов, породивших эти данные.

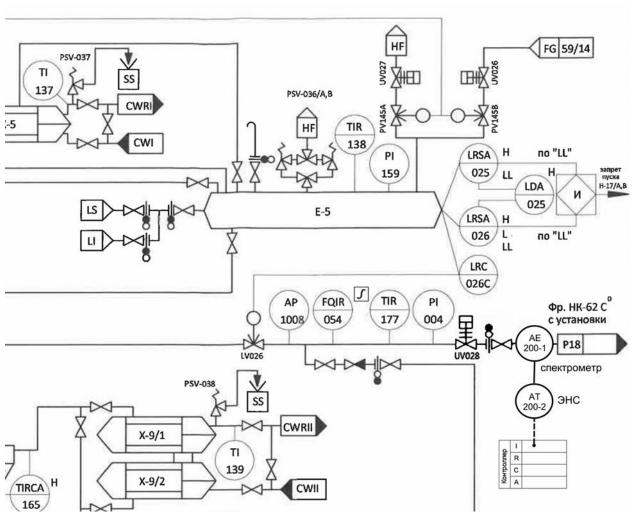


Рисунок 2 — Функциональная схема автоматизации с внедрением ЭНС системы фракционирования автомобильного бензина

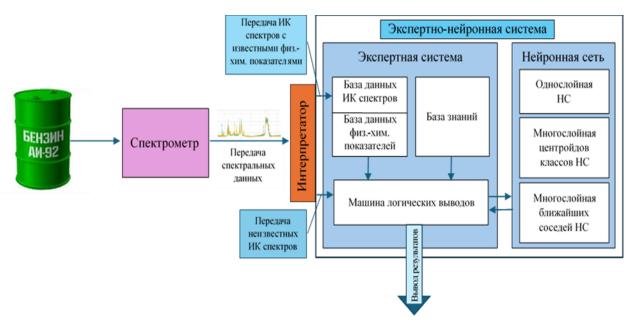


Рисунок 3 – Общая схема функционирования интегрированной ЭНС

При подаче на вход ЭС неизвестных данных на ее выходе формируются редуцированные данные - вектор принадлежности спектральных данных к

классам (кластерам), который подается далее на вход нейронной сети для повышения надежности идентификации данных.

Второй компонент, которой является интегрированная HC, включает программные модули (рисунок 3): однослойную нейронную сеть; многослойную нейронную сеть центроидов классов; многослойную нейронную сеть ближайших соседей.

Однослойная нейронная сеть не имеет ограничений на количество возможных классов больших данных и представителей каждого класса.

Входными данными модуля однослойной нейронной сети является вектор принадлежности больших данных к классам (кластерам), реализованный на выходе интегрированной экспертной системы. Для каждого класса рассчитываются пороговые функции, исходя из максимальных значений мер сходства.

Обобщенная структура интегрированной ЭНС представлена на рисунке 4.

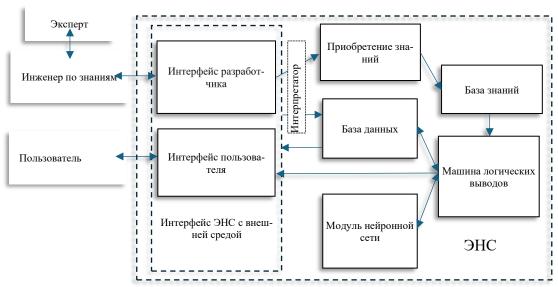


Рисунок 4 – Обобщенная структура интегрированной ЭНС

Интерфейс ЭНС с внешней средой поддерживает взаимодействие ЭНС с внешним миром на всех стадиях жизненного цикла системы и включает две компоненты: интерфейс разработчика и интерфейс пользователя. Интерфейс разработчика используется на этапе разработки ЭНС, его основной функцией является поддержка процесса наполнения базы знаний (БЗ). Обычно эта функция выполняется экспертом в предметной области во взаимодействии с инженером по знаниям. Интерфейс пользователя поддерживает общение пользователя с системой в режиме консультации или взаимодействие ЭНС с техническими средствами на этапе ее использования. Компонента приобретения знаний предназначена для занесения в БЗ новых знаний и модификации имеющихся, как на этапе начального обучения ЭНС, так и в режиме ее обучения в процессе эксплуатации. Ее задачей, в частности, является преобразование знаний в форму, позволяющую машине логических выводов (МЛВ) использовать их в процессе работы. База данных (БД) хранит факты о текущем состоянии предметной области, промежуточных и окончательных результатах вывода.

БЗ служит для хранения знаний о проблемной области. Форма хранения соответствует выбранной модели представления знаний. МЛВ осуществляет взаимодействие с модулем нейронной сети, которая позволяет с высокой степенью надежности классифицировать входящие данные в присутствии значительных аддитивных помех, а также производит вывод решения задачи на основе имеющихся в системе знаний и фактов. БД, БЗ, модуль нейронной сети и МЛВ составляют ядро ЭНС.

Структура баз знаний (БЗ) содержит в себе две модели:

- модель идентификации макросостояний нефтепродуктов, включающей в себя выбор ближайших соседей в многомерном пространстве спектральных характеристик с использованием мер сходства;
- модель идентификации микросостояний, включающей в себя непараметрическое оценивание физико-химических показателей нефтепродуктов (показателей качества, далее ПК).

Для реализации модели идентификации макросостояний нефтепродуктов, позволяющей классифицировать спектральные данные, наблюдаемый спектра S(v) нефтепродукта неизвестной марки представлен в виде

$$S(\nu) = S_m(\nu, k) + H_m(\nu, k), \tag{1}$$

где $S_m(v, k)$ — спектры оптической плотности используемого диапазона волн, определенные для каждого волнового числа v для k-го образца (k = 1, 2, ..., K) известного нефтепродукта m-ой марки (m = 1, 2, ..., M); $H_m(v, k)$ — неизвестные случайные спектральные функции, описываемые усеченными нормальными распределениями вероятностей, с нулевыми средними $\overline{H_m(v, k)} = 0$ и неизвестными дисперсиями $\sigma_{\text{Hm}}^2(v, k)$.

В ней допускается, что наблюдаемый спектр $S(\nu)$ является зашумленной версией какого-либо полностью известного спектра $S_m(\nu, k)$, измеряемого с известными дисперсиями $\sigma_S^2(\nu)$, определяемыми точностью $\sigma_S(\nu)$ используемого инструментального средства при измерении спектра поглощения для данного волнового числа ν .

В этих условиях идентификация возможна при использовании статистики в виде мер сходства наблюдаемого спектра S(v) с известными спектрами $S_m(v,k)$

$$\mu[S, S_{m}(k)] = \frac{\left(\sum_{\nu \min}^{\nu \max} \gamma_{m}(\nu) \frac{S(\nu)S_{m}(\nu, k)}{\sigma_{S}^{2}(\nu)}\right)^{2}}{\sum_{\nu \min}^{\nu \max} \gamma_{m}(\nu) \frac{S^{2}(\nu)}{\sigma_{S}^{2}(\nu)} \sum_{\nu \min}^{\nu \max} \gamma_{m}(\nu) \frac{S_{m}^{2}(\nu, k)}{\sigma_{S}^{2}(\nu)}}, \quad 0 \leq \mu[S, S_{m}(k)] \leq 1, \quad (2)$$

где $\gamma_m(\nu)$ — идентификационные значимости волновых чисел спектров m-ой марки, зависящие от амплитуд спектров. Например, $\gamma_m(\nu)=1$, если $S_m(\nu, k)<1,5$ и $\gamma_m(\nu)=0$, если $S_m(\nu, k)\geq 1,5$.

Идентификацию неизвестной марки нефтепродуктов можно проводить методом «ближайшего соседа», относя испытуемый образец к той марке m,

для которой мера сходства $\mu[S, S_m(k)]$ принимает наибольшее значение, т.е. $m = \arg\max\{\mu[S, S_m(k)]\}.$

В модели идентификации микросостояний, позволяющей проводить оценку значений показателей качества нефтепродукта на основе узлов интерполяции, получаемых для всех ее состояний (марок), будем использовать следующую нечеткую регрессионно-факторную зависимость

$$Y_{\sum | | |} = \frac{\sum_{m=1}^{M} \sum_{k=1}^{Km} Y_m(k) \ G[S(\nu), S_m(\nu, k)]}{\sum_{m=1}^{M} \sum_{k=1}^{Km} G[S(\nu), S_m(\nu, k)]}, \tag{3}$$

$$G[S(\nu), S_m(\nu, k)] = 1/\left[1 + \sum_{\nu \min}^{\nu \max} \gamma_m(\nu) \frac{[S(\nu) - S_m(\nu, k)]^2}{\Delta_{R\min}^2}\right],$$

$$\Delta_{R\min}^2 = \frac{1}{\sqrt{\sum_{m=1}^M K_m}} \frac{\sigma_Y}{(Y_{\max} - Y_{\min})} \langle \sigma_S^2 \rangle =$$
(5)

$$\Delta_{R\min}^{2} = \frac{1}{\sqrt{\sum_{m=1}^{M} K_{m}}} \frac{1}{\langle Y_{\max} - Y_{\min} \rangle} \langle \sigma_{S}^{2} \rangle =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\sum_{m=1}^{M} K_{m}}} \frac{\sigma_{Y}}{\langle Y_{\max} - Y_{\min} \rangle} \frac{\Delta \nu}{\nu_{\max} - \nu_{\min}} \sum_{\nu=1}^{\nu_{\max}} \sigma_{S}^{2}(\nu), \qquad (5)$$

где $\sum_{m=1}^{M} K_m$ – количество узлов интерполяции, определяемых количеством K_m эталонных образцов нефтепродукта для каждой m-ой марки; σ_Y – ошибка (стандартное отклонение) лабораторного измерения ПК Y; Y_{\min} и Y_{\max} – минимальное и максимальное значения ПК соответственно; $\langle \sigma_S^2 \rangle$ – усредненная по используемому спектральному диапазону (v_{\min} , v_{\max}) дисперсия спектра оптической плотности, определяемая точностью измерений оптических плотностей для различных волновых чисел v; $\gamma_m(v)$ – функция, определяющая значимости используемых волновых чисел в диапазоне v_{\min} ÷ v_{\max} и используемая для режекторной фильтрации аппаратных помех спектрометра.

Объединение экспертной системы и нейросети в одну ЭНС даёт синергетический эффект при идентификации больших данных, например, оптических спектральных данных: снижает их размерность до размерности, определяемой небольшим числом классов; повышает правдоподобие классификации.

В третьей главе рассмотрено применение разработанной ЭНС технологического контроля качества нефтепродуктов на примере автомобильных бензинов по их спектральным данным с объединением экспертной и нейросетевой технологий идентификации спектральных данных в системе усовершенствованного управления технологическим процессом на конкретном примере.

Спектральные данные, а именно инфракрасные (ИК) спектры оптического поглощения нефтепродуктов (автомобильные бензины разных марок с разным октановым числом) получены с применением ИК Фурье-спектрометра. Все спектры снимались в полосе волновых чисел среднего ИК-диапазона (450...4000) см⁻¹ с разрешением 0,964 см⁻¹ отечественным спектрометром АФ-3.

Диаграмма показывает сложность идентификации различных ИК-спектров из-за практически полного перекрытия их характеристических полос поглощения.



Рисунок 4 – Примеры ИК-спектров автомобильных бензинов

ЭНС для идентификации марок автомобильных бензинов рассматривается с применение электронной таблицы.

Работа системы состоит из последовательности операций.

- 1. Определяется количество известных образцов, исходя из требуемой точности оценивания значений физико-химических показателей.
- 2. Измеряются спектры оптических плотностей известных образцов при различных условиях производства, обеспечивающих равномерное заполнение диапазонов значений их физико-химических показателей в максимальных границах, гостированных для каждой марки автомобильного бензина.
- 3. Производится режекторная фильтрация спектров известных образцов каждой марки автомобильного бензина. Полученные спектральные данные и соответствующие им физико-химические показатели заносятся в БД ЭС.
- 4. Измеряется ИК спектр неизвестного образца марки автомобильного бензина и производится его режекторная фильтрация. Отфильтрованный спектр поступает в МЛВ, где проводится предварительная классификация автомобильного бензина неизвестной марки методом «ближайшего соседа» на основе нечетких мер сходства, оцениваются его физико-химические показатели и формируются редуцированные данные вектор принадлежности больших данных к классам (кластерам), который подается далее на вход нейронной сети.
- 5. Сжатые данные в виде вектора принадлежности больших данных к классам поступают на вход нейронной сети результатом работы которой является повышение правдоподобия классификации.

На первом шаге определено, что для оценивания физико-химических показателей (октанового числа) не противоречащим требованиям в промышленности и установленные ГОСТами на определение октанового числа по моторному и исследовательскому методам ($\leq 0,1$ единицы октанового числа), например $\delta Y = 0,1$, необходимо ввести в базу данных экспертной системы не менее 50 образцов ИК-спектров каждой из исследуемых марок автомобильных бензинов.

БД (Окта	ановые числ	а бен:	зино	в)														
		Окт	тан	о вы е чи	сла													
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	 50
80 нормал	ъ 82	,6	82,0	82,0	82,4	86,5	80,0	83,3	81,2	84,5	83,0	81,0	84,3	82,8	82,2	81,5	83,6	 81,0
92 регуля	p 93	,0	93,1	93,3	93,5	93,7	93,6	92,0	92,0	92,0	92,8	92,8	92,5	92,9	92,9	92,6	93,7	 93,1
95 премну	м 95	,6	95,0	95,0	95,1	96,5	96,2	96,5	96,2	95,0	95,0	95,0	95,6	95,6	95,4	95,8	95,8	 96,4
98 супер	98	,5	98,3	98,1	98,5	98,0	98,2	98,2	98,6	98,1	98,0	98,3	98,1	98,4	98,5	98,0	98,2	 98,0

Рисунок 5 – Пример хранения значений октановых чисел в базе данных ЭС

На втором шаге показано преимущество равномерного заполнения диапазона значений физико-химических показателей (октановых чисел) при их максимально возможном разбросе.

На третьем шаге осуществляется подготовка спектральных данных для проведения предварительной классификации автомобильного бензина методом «ближайшего соседа» с использованием режекторной фильтрации.

Режекторная фильтрация необходима, т.к. она позволяет избавиться от лишних спектральных данных, снижающих достоверность полученных результатов.

В качестве режекторного фильтра выступают следующие.

1) Фильтр диапазонов, отвечающий нестабильной работе конкретного прибора.

При работе с ПФС-1 используются значения спектрального диапазона 400...4000 см⁻¹, за исключением интервалов, содержащие нестационарные данные (см⁻¹): 692,0...695,0; 702,0...703,0; 707,3...707,7; 746,0...750,0; 752,6...757,0; 769,0...770,0; 1490,0...1492,0. При работе на АФ-3 для анализа используется весь спектральный диапазон 400...4000 см⁻¹.

2) Фильтр диапазонов, отвечающий за поглощение паров воды. В исходном спектре с помощью режекторной фильтрации в районе 1500 см⁻¹ вырезана полоса частот, соответствующая данному поглощению (рисунок 6).



Рисунок 6 – Пример работы фильтра частот, соответствующих поглощению паров воды

3) Фильтр частот, соответствующих поглощению бензола, и др.

На четвертом шаге после режекторной фильтрации реализуется модель идентификации макросостояний автомобильных бензинов, позволяющая проводить предварительную классификацию нефтепродукта методом «ближайшего соседа».

Среди полученных мер сходства для каждого класса автомобильного бензина выбирается её максимальное значение. Результаты вычислений в виде вектора принадлежности спектральных данных к классам MAX[SM] выводятся машиной вывода.

БЗ (НЕЧЕТКИЕ РЕЗОНАНСНЫ	ЕМЕРЫ СХ	ОДСТВА С	ПЕКТРА Н	ЕИВВЕСТН	ого увс	СЭТАЛОН	ными ст	ПЕКТРАМИ)		Интегриро	ван на я нейр	осеть!А1
Параметры мер сходства		→	Регуляризации		ε =	0,001		Резонансности		N =	40		
Меры сходства	макс 🔪	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9		4
			Отклики н	ейронов									
80_нормаль	0,443	0,30136	0,04909	0,24545	0,09506	0,43583	0,43314	0,26341	0,11173	0,44291	0,18735		0,10220
92_регуляр	1,000	70868	0,27289	0,00108	0,08018	0,66969	0,99997	0,59398	0,67365	0,30483	0,34623		0,4386
95_премиум	0,668	49944	0,35579	0,31861	0,36548	0,53468	0,66843	0,22329	0,31193	0,52956	0,39336		0,4552
98_супер	0,156	0,13861	0,08586	0,14281	0,04982	0,12081	0,12866	0,14466	0,15559	0,10369	0,14789		0,12433
Бензол	0,000	00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000		0,00000
Толуол	0,000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000		0,0000
			_	На вход в	reŭnouuo	й сати (Н	C)						
				на вход г	тепронно	n cern (n	c,						
МВ (МАШИНА ВЫВОДА	1)												
макс (макс)	1,00							эс		HC		3-х Сл Н	C
Результат идентификации		→	Марка УВС			92_регуляр		92_регуляр		92_регуляр!!!			
				Октанов	ое число			92,2		93,1		93,0	
				Относительное содержание бензол				28%		•			
				Относит	ельное со	держани	е толуол	15%					

Рисунок 7 — Предварительная классификация нефтепродукта методом «ближайшего соседа»

Неизвестный многомерный вектор (4000 отсчётов) приводится к шестимерному вектору $MAX[SM] = (0,443; 1,000; 0,668; 0,156; 0,000; 0,000)^T$.

Таким образом осуществляется значительное сжатие информации и указание на то, что неизвестный вектор наиболее близок к классу АИ-92.

Идентификации микросостояний нефтепродукта - оценивание значений физико-химических показателей (октановых чисел) - осуществляется с помощью нечёткого регрессионно-факторного анализа.

На пятом шаге сжатые данные в виде вектора принадлежности больших данных к классам поступают на вход нейронной сети. Применение которой позволяет повысить правдоподобие классификации нефтепродуктов.

На рисунке 8 показан фрагмент структуры топологии модуля трёхслойной нейронной сети прямого распространения, реализованной в табличном процессоре.

Модуль рассчитан на работу с 6 классами (АИ-80, АИ-92, АИ-95, АИ-98, бензол, толуол).

На выходе модуля трехслойной нейронной сети, обладающего высокой устойчивостью к аддитивным входным помехам, формируются сигналы-индикаторы принадлежности исследуемых спектральных данных соответствующему классу.

Эксперименты показали, что однослойная и многослойная нейронные сети центроидов классов классифицируют неизвестные ИК-спектры с высокой степенью правдоподобия: ИК-спектр автомобильного бензина АИ-92 с вероятностью 99% и 100% соответственно (см. рисунок 8). Это говорит о том, что

для многих задач идентификации больших данных вполне достаточно использования интегрированных экспертных систем и однослойных нейронных сетей.

Трехслойная нейронная сеть (сильная нелинейность)

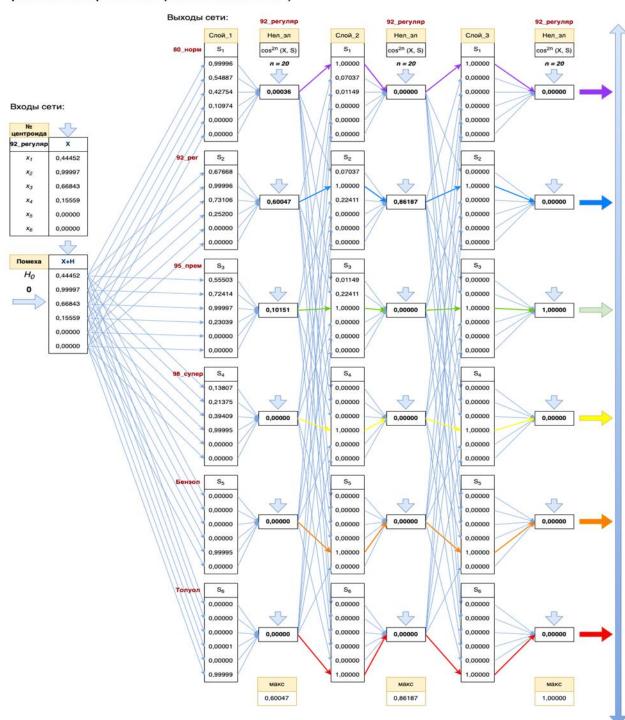


Рисунок 8 — Структурная топология модуля трехслойной нейронной сети прямого распространения

Показана эффективность применения в интегрированной ЭНС простейшей однослойной нейронной сети, количество нейронов которой равно числу идентифицируемых классов.

Эффективность внедрения разработанной ЭНС была проверена с помощью программно-вычислительного комплекса оценки качества производственных процессов «Своевременность». Расчеты проводились для двух случаев, до внедрения ЭНС и после внедрения ЭНС.

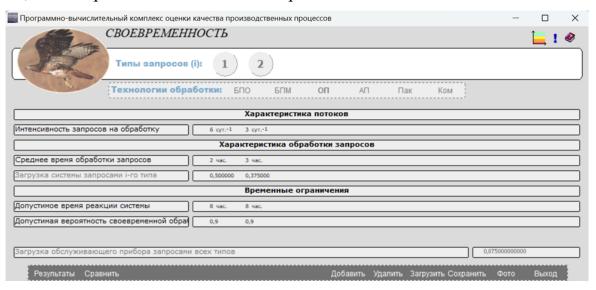


Рисунок 9 — Ввод данных в систему оценки качества производственных процессов до внедрения ЭНС

В первом случае результаты показали, что при внесении в программновычислительный комплекс следующих показателей: забор образцов бензина с частотой раз в 4 часа, ожидаемая обработка образца в ЛИМС в течении 2 часов, допустимое время реакции системы 8 часов (рисунок 9) вероятность своевременной обработки показателей качества составила 72% при допустимой вероятности 90% (рисунок 10).

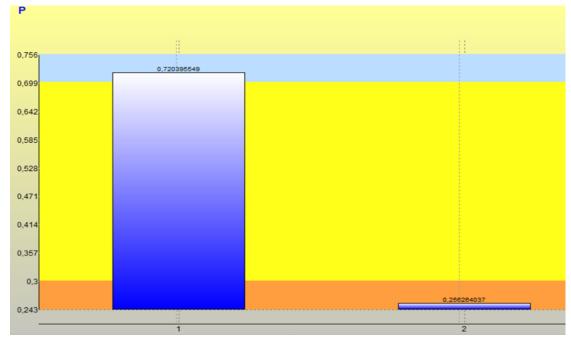


Рисунок 10 — Вероятность своевременной обработки показателей качества до внедрения ЭНС

При заборе образцов бензина с частотой раз в 8 часов, ожидаемой обработки образца в ЛИМС в течении 3 часов, допустимом времени реакции системы 8 часов вероятность своевременной обработки показателей качества составила 26% при допустимой вероятности 90%. Ни один результат не достиг уровня допустимой вероятности, что говорит о неэффективной работе автоматизированной системы контроля качества нефтепродуктов.

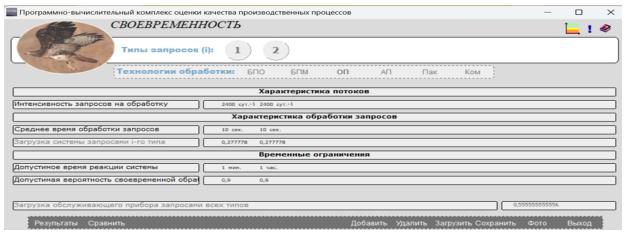


Рисунок 11 — Ввод данных в систему оценки качества производственных процессов после внедрения ЭНС

Во втором случае при использовании поточного анализатора с разработанной ЭНС были внесены следующие данные: забор образцов бензина осуществляется непрерывно (с частотой раз в 30 секунд), ожидаемая обработка образца в ЭНС в течении 10 секунд, допустимое время реакции системы 1 минута (рисунок 11). При этом вероятность своевременной обработки показателей качества составила 94% при допустимой вероятности 90%. При изменении допустимого времени реакции системы до 1 часа вероятность своевременной обработки показателей качества возрастает до 100% (рисунок 12).

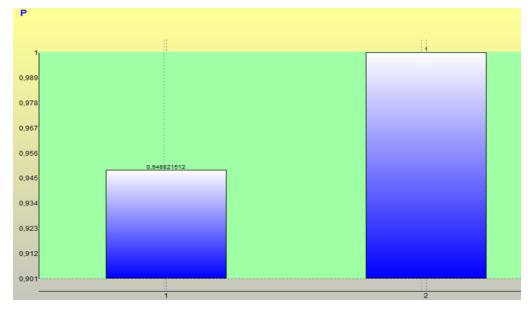


Рисунок 12 — Вероятность своевременной обработки показателей качества после внедрения ЭНС

Полученные результаты показывают, что внедрение в автоматизированный контроль качества нефтепродуктов разработанной ЭНС выводит управление технологическим процессом на новый уровень.

Четвертая глава посвящена программной реализации ЭНС для автоматизированного контроля качества нефтепродуктов. Рассмотрены программные компоненты и библиотеки, вошедшие в состав разработанной ЭНС. Сконфигурирована нейронная сеть для повышения правдоподобия классификации нефтепродуктов. Проработана и реализована серверная часть при помощи фреймворка Express на языке JavaScript. Данный фреймворк предоставляет небольшие и надёжные инструменты для HTTP-серверов что делает его отличным решением для одностраничных приложений и HTTP API.

Проработан и реализован пользовательский интерфейс для взаимодействия с ЭНС построенный на ReactJS (React), представляющим собой библиотеку JavaScript с открытым исходным кодом для создания пользовательских интерфейсов. Он используется для обработки уровня представления в одностраничных приложениях и при разработке мобильных приложений.

Сценарий использования ЭНС выглядит следующим образом. При открытии основной страницы приложения пользователю предлагается выбрать неизвестный спектр для его определения. После загрузки файла с неизвестным спектром пользователь должен выбрать классы или конкретные спектры, с которыми следует сравнивать неизвестный (рисунок 9).

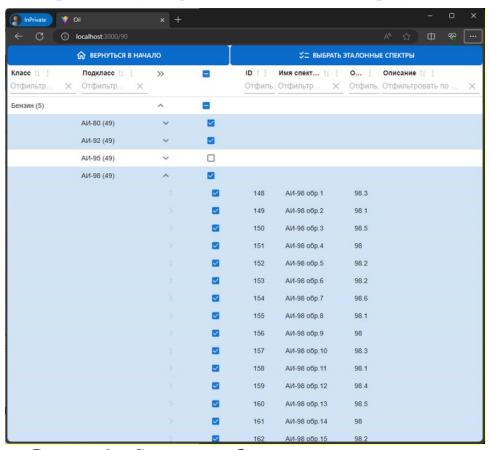


Рисунок 9 – Страница выбора спектров для проверки

После выбора спектров и обработки запроса сервером пользователь получает результат, но также может и визуально оценить неизвестный спектр и наиболее похожие на него спектры из выбранных классов. На этом этапе производится оценка октанового числа неизвестного спектра (рисунок 10).

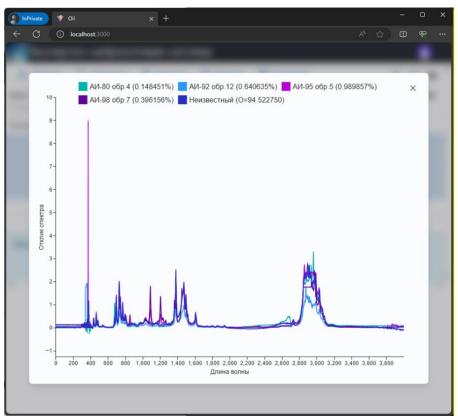


Рисунок 10 – Пример результатов работы алгоритма

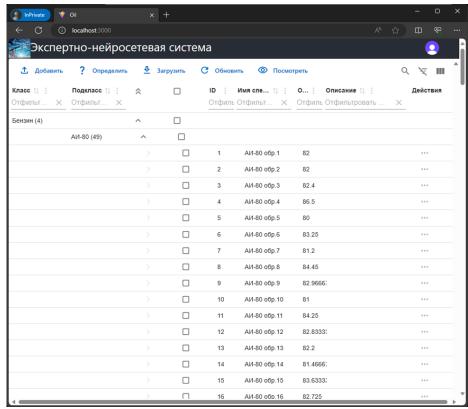


Рисунок 11 – Интерфейс администратора ЭНС

Помимо пользовательского интерфейса, разработан интерфейс администратора ЭНС (рисунок 11), предоставляющий администратору системы следующие возможности.

- 1. Добавление спектра в базу данных.
- 2. Определение неизвестного спектра из файла по имеющимся эталонным спектрам в базе данных.
 - 3. Загрузка спектров из базы данных.
 - 4. Изменение данных загруженного спектра.
 - 5. Определение спектра по имеющимся эталонным.
 - 6. Удаление спектра.
 - 7. Просмотр значений спектров.

В заключении приведены основные результаты и выводы диссертационной работы.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ РАБОТЫ

В диссертации содержатся новые научно обоснованные технические, технологические решения и разработки, имеющие существенное значение для развития страны. Получены следующие основные результаты.

- 1. Разработана и внедрена в технологический процесс производства автомобильных бензинов экспертно-нейросетевая система (ЭНС) автоматизированного контроля качества по их спектральным данным, позволяющая учесть особенности функционирования сложной системы, такие как проведение периодического контроля, мониторинг и нарушение технологического процесса.
- 2. Разработан метод построения интеллектуальных систем управления технологическим процессом объединены экспертная система и нейросеть в одну ЭНС, что даёт синергетический эффект при идентификации оптических спектральных данных: снижает их размерность до размерности, определяемой небольшим числом классов, и повышает правдоподобие классификации.

Показана эффективность применения в интегрированной ЭНС простейшей трехслойной нейронной сети, количество нейронов которой равно числу идентифицируемых классов: что повышает достоверность определения марки бензина до 100%.

- 3. Создано информационное и программное обеспечение автоматизированной системы управления технологическим процессом (АСУТП) применение экспертной системы повышает гибкость и функциональность всей интегрированной ЭНС: позволяет интерпретировать исходные данные; оценивать по интерпретированным данным их сопутствующие показатели (в случае оптических спектральных данных показатели многокомпонентных молекулярных соединений, порождающих эти данные, концентрации соединений с известными спектрами).
- 4. Создано специальное программное обеспечение АСУТП в реальном времени. Прототип ЭНС разработан на основе клиент-серверной архитектуры: клиентская часть реализована в виде веб-клиента она представляет собой т.н.

«тонкий клиент», т.е. клиент, который переносит большую часть задач по обработке информации на серверную часть; серверная часть ЭНС обрабатывает запросы клиентов.

5. Программная реализация интегрированной ЭНС автоматизированного контроля качества нефтепродуктов показала высокую производительность на практике при внедрении в систему управления технологическим процессом для повышения эффективности в части оперативности и достоверности автоматизированного контроля качества автомобильных бензинов.

В результате экспериментальных исследований с использованием программно-вычислительного комплекса оценки качества производственных процессов «Своевременность», было показано, что применение ЭНС в технологическом процессе повышает своевременную обработку показателей качества на 20-75%.

7. Результаты исследования, а именно: ЭНС идентификации больших данных автоматизированного контроля качества автомобильных бензинов, предложенные алгоритмы, модели и методы, программное обеспечение - реализованы в научно-исследовательских работах научно-технологический центра уникального приборостроения РАН (НТЦ УП РАН) и в ИНХС РАН; в учебном процессе кафедры математического обеспечения и стандартизация информационных технологий института информационных технологий ФГБОУ ВО «МИРЭА — Российский технологический университет».

ПУБЛИКАЦИИ АВТОРА ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Публикации в изданиях, рекомендованных ВАК

- 1. Гусев, К. В. Автоматизированный контроль качества продукции в непрерывном цикле промышленных предприятий / К. В. Гусев, С. А. Красников, В. М. Образцов // Научно-технический вестник Поволжья. 2024. № 3. С. 149-152.
- 2. Гусев К.В., Николаева С.В., Красников С.А., Сартаков М.В., Филатов А.С. Кластеризация многомерных спектральных данных с применением алгоритма уменьшения размерности // Научно-технический вестник Поволжья. Казань: ООО «Рашин Сайнс», № 10. 2023.
- 3. Гусев К.В., Краснов А.Е., Красников С.А., Овчинников М.А. Технология интегрирования экспертных систем и нейронных сетей для автоматизации идентификации больших данных // Журнал Информатизация образования и науки, № 3 (59). 2023.
- 4. Гусев К.В., Николаева С.В., Красников С.А., Овчинников М.А Метод спектральной компьютерной квалиметрии // Научно-технический вестник Поволжья. Казань: ООО «Рашин Сайнс», № 4. 2023.
- 5. Гусев К.В., Красников С.А., Авакумов Г.Е. Архитектура модуля загрузки данных распределенного текстового хранилища // Научно-технический вестник Поволжья. Казань: ООО «Рашин Сайнс», № 12. 2022.
 - 6. Гусев К.В., Леонтьев А.С. Формирование системы булевых функций,

используемых при оценке достоверности числовых показателей и выборе моделей прогнозирования их новых значений в базах данных большой размерности // Журнал «Системы высокой доступности» Издательство «Радиотехника», Москва, Том 18 № 1. 2022.

- 7. Гусев К.В., Краснов А.Е., Красников С.А., Овчинников М.А. Экспертно-нейронная система для идентификации больших данных (серверная часть). Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ в ФГУ ФИПС № 2023669265 от 12.09.2023 г.
- 8. Гусев К.В., Краснов А.Е., Красников С.А., Овчинников М.А. Экспертно-нейронная система для идентификации больших данных (клиентская часть). Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ в ФГУ ФИПС № 2023668219 от 07.09.2023 г.

Публикации в других изданиях

- 9. Гусев, К. В. Технология интегрирования экспертных систем и нейронных сетей для автоматизации идентификации больших данных / К. В. Гусев // Современные информационные технологии в образовании, науке и промышленности: Сборник трудов XXVI Международной конференции, XXIV Международного конкурса научных и научно-методических работ, 09—10 ноября 2023 года. Москва: Общество с ограниченной ответственностью "Издательство "Экон-Информ", 2023. С. 44-46.
- 10. Гусев, К.В. Новый подход к построению систем идентификации больших данных / К. В. Гусев, С. А. Красников // Современные информационные технологии в образовании, науке и промышленности: Сборник трудов XXVII Международная конференция; XXV Международный конкурс научных и научно-методических работ, 08–09 февраля 2024 года. Москва: Общество с ограниченной ответственностью "Издательство "Экон-Информ", 2024. С. 26 29.