Journal of
Applied Research in Chemical-Polymer Engineering
journal homepage: www.arcpe.modares.ac.ir

Research Paper

Development of an adaptive soft sensor for real-time monitoring of gas composition: Implementation on the azeotropic distillation column of the vinyl acetate monomer production process

Amir Arsalan Sobhani, Mohammad Fakhroleslam *

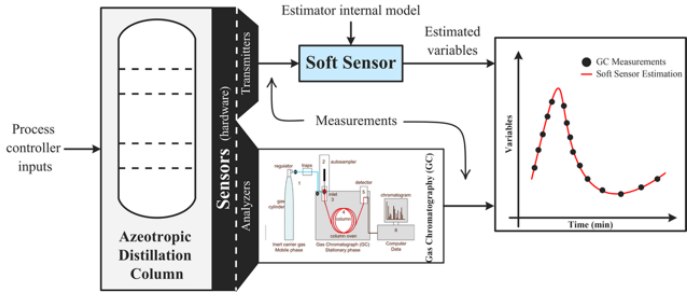
Process Design Department, Faculty of Chemical Engineering, Tarbiat Modares University, Tehran, Iran

ARTICLE INFO

Received 2024-12-11
Revised 2025-01-10
Accepted 2025-01-10
Available online 2025-07-08
ISSN: 2588-5316
Online ISSN: 2588-5324

Keywords:
Soft sensor
GC analyzer
Neural network
Azeotropic distillation
VAM process

GRAPHICAL ABSTRACT



ABSTRACT

Research subject: Real-time analysis using digital tools requires receiving instantaneous data from various points in industrial chemical processes. Time delays in measurements of process variables can affect the effective performance of different control strategies, process stability, and operational efficiency, making it impossible to analyze, extract information, and convert it into actionable decisions in real-time. The synthesis process of vinyl acetate monomer is recognized as a benchmark dynamic and nonlinear process in the chemical industry. In this process, the composition of water at the bottom of the azeotropic distillation column is one of the important variables measured by a gas chromatography (GC) analyzer, which has a significant time delay and high cost.

Research approach: Soft sensors primarily improve the real-time estimation of variables that are difficult or impossible to measure. Neural networks play an important role in the development of soft sensors due to their ability to learn nonlinear patterns and their suitable prediction speed. This study focuses on the development of a soft sensor based on a feedforward neural network model for real-time estimation of the composition of water at the bottom of an azeotropic distillation column in the vinyl acetate monomer synthesis process.

Main results: Additionally, the model was adaptively implemented under various fault conditions and accurately estimates the GC analyzer behavior instantaneously, achieving a mean squared error (MSE) of 1.1 × 10-5. Maintaining prediction accuracy in the adaptive implementation of soft sensors in the presence of various process faults demonstrates the effective adaptability of these sensors. Therefore, this study demonstrates the capability of soft sensors as an efficient and cost-effective alternative for real-time monitoring of complex chemical processes.

* Corresponding author: fakhroleslam@modares.ac.ir – ORCID: 0000-0002-3863-9155

Copyright@ 2025, The Authors. This open-access article is published under the terms of the Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License which permits Share (copy and redistribute the material in any medium or format) and Adapt (remix, transform, and build upon the material) under the Attribution-NonCommercial terms.

نشریه پژوهش‌های کاربردی مهندسی شیمی–پلیمر

آدرس صفحه: www.arcpe.modares.ac.ir

مقاله تحقیقاتی

ایجاد حسگر نرم تطبیقی برای پایش به‌هنگام ترکیب درصد گاز: پیاده‌سازی در برج تقطیر آزئوتروپیک فرایند تولید مونومر وینیل‌استات

امیر ارسلان سبحانی [۱]، محمد فخرالاسلام [۱,*]

[۱] گروه طراحی فرایند، دانشکده مهندسی شیمی، دانشگاه تربیت مدرس، تهران، ایران

چکیده

موضوع تحقیق: تحلیل به‌هنگام به کمک ابزارهای دیجیتال، نیازمند دریافت در لحظه داده‌ها از نقاط مختلف فرایندهای شیمیایی صنعتی است. تأخیرهای زمانی در اندازه‌گیری متغیرهای فرایندی ممکن است عملکرد مؤثر راهبردهای کنترلی مختلف، پایداری فرایند و کارایی عملیاتی را تحت تأثیر قرار دهد و در نتیجه تحلیل، استخراج اطلاعات و تبدیل آن به تصمیم‌های قابل اجرا در لحظه را غیرممکن کند. فرایند تولید مونومر وینیل‌استات (VAM) به‌عنوان فرایند پیچیده و غیرخطی در صنایع شیمیایی شناخته می‌شود. در این فرایند ترکیب درصد آب در پایین برج تقطیر آزئوتروپیک، یکی از متغیرهای مهم است که توسط دستگاه کروماتوگرافی گازی (GC) با تأخیر زمانی و هزینه زیاد اندازه‌گیری می‌شود.

روش تحقیق: حسگرهای نرم به‌طور عمده تخمین به‌هنگام متغیرهایی که اندازه‌گیری آن‌ها دشوار یا غیرممکن است را بهبود می‌بخشند. شبکه‌های عصبی به واسطه قابلیت یادگیری الگوهای غیرخطی و سرعت پیش‌بینی مناسب در توسعه حسگرهای نرم نقش مهمی را ایفا می‌کنند. این پژوهش بر روی توسعه حسگر نرم تطبیقی بر اساس مدل شبکه عصبی پیش‌خور برای تخمین به‌هنگام ترکیب درصد آب در پایین برج تقطیر آزئوتروپیک در فرایند VAM متمرکز است.

نتایج اصلی: حسگر نرم ایجاد شده به‌صورت تطبیقی در حضور عیب‌های عملیاتی مختلف به کار گرفته شده است و با خطای $MSE=1.1x10^{-5}$، رفتار GC را به صورت لحظه‌ای تخمین می‌زند. می‌توان با حفظ دقت پیش‌بینی در پیاده‌سازی تطبیقی حسگر نرم در حضور تغییرات مختلف فرایندی، سازگاری مؤثر این حسگرها را اثبات کرد. این پژوهش قابلیت حسگرهای نرم را به‌عنوان جایگزینی کارآمد و مقرون‌به‌صرفه برای نظارت به‌هنگام در فرایندهای شیمیایی پیچیده را نشان می‌دهد.

کلیدواژه‌ها

حسگر نرم

دستگاه کروماتوگرافی گازی

شبکه عصبی

تقطیر آزئوتروپیک

فرایند VAM

اطلاعات مقاله

دریافت: ۱۴۰۳/۰۹/۲۱

بازنگری: ۱۴۰۳/۱۰/۲۱

پذیرش: ۱۴۰۳/۱۰/۲۱

دسترس آنلاین: ۱۴۰۴/۰۴/۱۷

ISSN: 2588-5316

Online ISSN: 2588-5324

* نویسنده مسئول: fakhroleslam@modares.ac.ir – ORCID: 0000-0002-3863-9155

کپی‌رایت © ۲۰۲۵، نویسندگان . این مقاله به‌صورت دسترسی آزاد منتشر شده و تحت مجوز بین‌المللی Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 قرار دارد. بر اساس این مجوز، شما می‌توانید این مطلب را در هر قالب و رسانه‌ای کپی، بازنشر و بازآفرینی کنید و یا آن را ویرایش و بازسازی نمایید، به شرط آنکه نام نویسنده را ذکر کرده و از آن برای مقاصد غیرتجاری استفاده کنید.

۱ مقدمه

پایش به‌هنگام (درلحظه) فرایندهای شیمیایی پیچیده وابسته به اندازه‌گیری دقیق و مداوم متغیرهای مهم فرایندی است. فناوری‌های دیجیتال جدید مانند اینترنت اشیا (IoT)، از طریق بهبود سامانه‌های اندازه‌گیری، امکان پایش لحظه‌ای و عملکرد پایدار را فراهم می‌کنند. از میان متغیرهای فرایندی، برخی از متغیرها نقش مهم‌تری در عملکرد کلی فرایند ایفا می‌کنند. با وجود اینکه اندازه‌گیری دقیق آن‌ها به پایش، کنترل و بهینه‌سازی فرایند کمک می‌کند؛ اما این امر همیشه آسان نیست و ممکن است با تأخیر و هزینه زیادی همراه بوده یا غیرممکن باشد [۱].

متغیرهای فرایندی مانند دما، فشار و دبی، فیزیکی بوده یا مثل کسر مولی و pH، شیمیایی هستند. روش‌های اندازه‌گیری این متغیرها به دو دسته مستقیم و غیرمستقیم تقسیم می‌شوند. در روش‌های مستقیم، متغیرهای فیزیکی به‌صورت به‌هنگام با استفاده از حسگرهایی مانند ترموکوپل یا فرستنده‌ها (Transmitters) و در روش‌های غیرمستقیم، متغیرهای شیمیایی با استفاده از روش‌های پیشرفته‌تری مانند کروماتوگرافی یا طیف‌سنجی اندازه‌گیری می‌شوند. روش‌های غیرمستقیم به‌واسطه استفاده از الگوریتم‌های تحلیل پیچیده‌تر، زمان‌بر و پر هزینه‌تر از روش‌های مستقیم هستند [۲]. دستگاه‌های کروماتوگرافی گازی (GC)، برای تعیین ترکیب درصد یک نمونه به روش غیرمستقیم، به‌ویژه غلظت اجزای مختلف در مخلوط گاز یا مایع استفاده می‌شوند. هسته مرکزی GC، جداسازی اجزای مخلوط با بهره‌گیری از تفاوت‌های نحوه تعامل هر جزء با فاز ثابت (جامد یا مایع ویسکوز) و فاز متحرک است (که به آن گاز حامل نیز گفته می‌شود). این فرایند شامل تزریق نمونه کوچکی از ماده مورد نظر به GC، تبخیر نمونه و ترکیب با گاز حامل، جداسازی ترکیب با عبور از برجی شامل فاز ثابت، تشخیص اجزای خروجی از برج و نمایش نتایج اندازه‌گیری است [۳]. این مراحل به‌طور خلاصه در شکل ۱ ارائه شده‌اند.

حسگرها یکی از مهم‌ترین ابزارها برای اندازه‌گیری به کمک روش‌های مستقیم یا غیرمستقیم و تولید داده‌های عملیاتی معتبر هستند و مستقیماً بر روی کیفیت داده‌های فرایندی اثر می‌گذارند. حسگرها به دو دسته سخت‌افزاری و نرم‌افزاری تبدیل می‌شوند. ترموکوپل، فرستنده‌ها، مقاومت‌سنج، حسگرهای نوری و GC همگی جزو دسته حسگرهای سخت‌افزاری هستند. حسگرهای سخت‌افزاری معمولاً در اندازه‌گیری متغیرهای فیزیکی به روش مستقیم، عملکرد قابل‌قبولی را دارند اما در سنجش متغیرهای شیمیایی به روش‌های غیرمستقیم (در صورتی که سنجش این متغیرها ممکن باشد)، همواره با تأخیر زمانی زیاد و هزینه بالا همراه هستند. تأخیر زمانی زیاد در اندازه‌گیری متغیرهای مهم فرایندی، در پایش بلادرنگ اختلال ایجاد می‌کند [۴].

حسگرهای نرم که به‌عنوان حسگرهای نرم‌افزاری یا حسگرهای مجازی نیز شناخته می‌شوند، متغیرهایی که اندازه‌گیری آن دشوار است را به صورت به‌هنگام با استفاده از مدل‌های ریاضی و اندازه‌گیری‌های برخط متغیرهایی که اندازه‌گیری آن‌ها آسان است تخمین می‌زنند [۶]. این حسگرها با ایجاد ارتباطات ریاضی بین متغیرهای مورد نظر که اندازه‌گیری آن‌ها دشوار یا پرهزینه است و متغیرهای فرایندی که به‌راحتی، با هزینه پایین و سرعت بالا قابل اندازه‌گیری هستند، می‌توانند دسترسی مداوم به داده‌ها را فراهم کنند، درک پویایی(Dynamic) فرایند را بهبود بخشند و با ارزیابی به‌هنگام (Real-time)، تشخیص خطا و تصمیم‌گیری را ممکن سازند [۷].

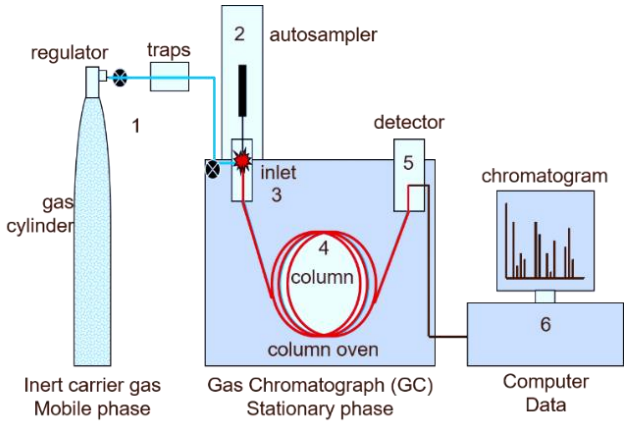
رابطه بین ورودی $\mathcal{X}$ (متغیرهایی که اندازه‌گیری آن‌ها آسان است) و خروجی $\mathcal{Y}$ (متغیر هدف یا متغیری که اندازه‌گیری آن دشوار است)، می‌تواند توسط یک تابع ناشناخته $\boldsymbol{\phi}$ توصیف شود:

$$\mathcal{Y} = \boldsymbol{\phi}(\mathcal{X}) \qquad (۱)$$

این رابطه هم‌ارز با تخمین برخط حسگر نرم است که در آن تابع $\boldsymbol{\phi}$، نگاشت متغیرهایی که سنجش آن‌ها آسان است به فضایی است که متغیر هدفی که سنجش آن دشوار است در آن تخمین زده می‌شود. بنابراین، هدف توسعه مدل، آموزش مدل $\boldsymbol{f}$ است که تقریب دقیقی از تابع نگاشت $\boldsymbol{\phi}$ باشد؛ به‌طوری که امکان نگاشت ورودی به فضای هدف را ایجاد می‌کند:

$$\mathcal{Y} = \boldsymbol{f}(\mathcal{X}) + \epsilon \qquad (۲)$$

که ϵ خطای باقی‌مانده پیش‌بینی‌ها است. وابسته به پیچیدگی فرایند و درجه دقت مورد نیاز، $\boldsymbol{f}$ می‌توانند از رگرسیون‌های خطی ساده تا شبکه‌های عصبی پیچیده و الگوریتم‌های یادگیری عمیق متغیر باشند [۶]. همچنین، براساس کاربرد و ویژگی‌های داده‌های فرایندی، روش‌های مختلفی برای توسعه حسگرهای نرم وجود دارد [۸]. در مواردی که درک کاملی از پویایی فرایند موجود باشد، حسگرهای نرم مبتنی بر مدل (جعبه سفید) که به مدل‌های مبتنی بر اصول اولیه (FPMs) برای توصیف پدیده‌های فیزیکی و شیمیایی تکیه دارند، انتخاب مناسبی هستند، اما توسعه این مدل‌ها پیچیده است [۸]. از طرفی، زمانی که پویایی فرایند به‌طور کامل شناخته شده نیست، مدل‌های مبتنی بر داده (جعبه سیاه) که از روش‌های یادگیری ماشین شامل PCR، PLS، ANNها، SVMها، GPR و منطق فازی بر روی داده‌های تاریخچه فرایند استفاده می‌کنند، مفید هستند [۸], [۹], [۱۰]. علاوه بر مدل‌های جعبه سفید و جعبه سیاه، مدل‌های ترکیبی مزایای هر دو رویکرد در FPMs و روش‌های مبتنی بر داده را تلفیق می‌کنند تا هم عدم قطعیت‌ها را مدیریت کرده و هم با تغییرات سازگار شوند. خلاصه‌ای از مدل‌های مبتنی بر داده استفاده شده در برخی از فرایندهای شیمیایی در جدول شماره ۱ آمده است [۸].



شکل ۱ مراحل اندازه‌گیری دستگاه کروماتوگرافی گازی [۵]

Figure 1. Gas chromatography analyzer measuring steps [5]

انتخاب مدل حسگر نرم بر اساس ملاحظات فرایندی و ویژگی‌های داده‌ها، قابلیت حسگر نرم برای عملکرد بهینه را تضمین می‌کند. معیارهای کلیدی برای انتخاب مدل شامل کاربرد و اهداف خاص، ویژگی‌های داده‌ها، پیچیدگی مدل، قابلیت تطبیق، دقت و با محاسباتی هستند [۱۶].

حسگرهای نرم در صنایع شیمیایی در پیش‌بینی مستقیم برخط متغیرهایی که اندازه‌گیری آن‌ها دشوار است یا به‌عنوان پشتیبان حسگرهای سخت‌افزاری (در صورت نیاز به تعمیر و نگه‌داری یا خرابی) مورد استفاده قرار می‌گیرند. این حسگرها دامنه وسیعی از کاربردها، از فرایندهای زیستی، پلیمر و شیمیایی گرفته تا تصفیه فاضلاب، تولید سیمان، صنایع مواد غذایی و نوشیدنی را شامل می‌شوند. به‌عنوان مثال، ابیکون و همکاران مطالعه مروری از طراحی و کاربرد حسگرهای نرم در فراوری پلیمرها ارائه داده است [۹]. آن‌ها در کار خود، فرصت‌ها و چالش‌های تخمین پارامترهایی مانند گرانروی مذاب، شاخص جریان مذاب و دمای ذوب در فرایندهای اکستروژن پلیمر با استفاده از حسگرهای نرم را مورد بحث قرار دادند. همچنین، حسگر نرم برای نظارت به‌هنگام پروفایل دمای ذوب قالب در فرایند عبور پلیمر از قالب تحت فشار (Polymer Extrusion) توسعه داده و استفاده عملی از این حسگرها را مورد تأکید قرار داده‌اند. کادلتس و همکاران توسعه حسگرهای نرم مبتنی بر داده را با تمرکز بر کاربرد در صنایع مختلف فرایندی، مانند صنایع شیمیایی، زیستی و فولاد بررسی کردند [۸]. آن‌ها روش‌شناسی توسعه حسگرهای نرم، روش‌های مدل‌سازی رایج مانند PCA، ANN و مشکلات در این زمینه را مورد بحث قرار داده‌اند. به همین ترتیب، کادلتس، گربیک و گابریس مروری بر سازوکارهای تطبیق برای حسگرهای نرم مبتنی بر داده ارائه دادند و تأکید کردند که حسگرهای نرم مبتنی بر داده می‌بایست قادر به سازگاری با تغییرات فرایند باشند [۱۷]. آن‌ها همچنین به بررسی رویکردهای تطبیقی مختلف مانند PCA پنجره متحرک، PCA بازگشتی و روش‌های مبتنی بر نوروفازی، روش‌هایی که قابلیت تطبیق حسگرهای نرم را با فرایندهای در حال تحول امکان‌پذیر می‌سازند، پرداختند.

دیگر پژوهشگران بر روی کاربردهای خاص حسگرهای نرم تمرکز کرده‌اند. به‌عنوان مثال، رانی و همکارانش حسگر نرم برای برج تقطیر توسعه دادند که از شبکه‌های عصبی برای تخمین متغیرهای کلیدی فرایند استفاده می‌کند [۱۵]. آن‌ها بر اهمیت انتخاب مناسب پارامترهای فرایندی تأکید کردند و به بحث در مورد استفاده از مدل‌های ترکیبی در بهبود عملکرد تخمین پرداختند. به‌طور مشابه، اسپوفیا حسگر نرمی برای برج تقطیر دیبوتانیزر طراحی کردند که کاربرد آن در نظارت بر کیفیت محصول را نشان می‌دهد [۱۸]. آن‌ها به مزایای استفاده از حسگرهای نرم به‌دلیل محدودیت‌های زیادی که استفاده از حسگرهای سخت‌افزاری سنتی ایجاد می‌کند، پرداختند. به علاوه، چندین کار به توسعه حسگرهای نرم با استفاده از روش‌های مدل‌سازی مختلف پرداخته‌اند. لین و همکاران رویکردی نظام‌مند برای توسعه حسگر نرم بر اساس روش‌های آماری قوی ارائه دادند و به اهمیت پیش‌پردازش داده‌ها در مورد داده‌های گمشده و نقاط پرت با استفاده از روش‌های رگرسیون PLS وزنی برای توسعه حسگر نرم اشاره کردند [۱۹]. از طرفی، ایتو و همکاران توسعه حسگرهای نرم را با استفاده از روش‌های آماری چندمتغیره ارائه دادند؛ در آن مطالعه، روش‌هایی مانند PCA، PLS، ANN و سامانه‌های عصبی-فازی پیشنهاد شد [۳]. این روش‌ها اغلب به مجموعه‌های داده بزرگ و مقدار زیادی پیش‌پردازش داده نیاز دارند تا به پیش‌بینی‌های دقیقی دست یابند. او و همکارانش از ESN (نوعی شبکه عصبی پویا) برای توسعه حسگر نرم پویا استفاده کردند. آن‌ها روش بهبودیافته ESN مبتنی بر SVD را برای افزایش دقت و کارایی محاسباتی حسگر نرم ارائه دادند. در نهایت، مطالعاتی وجود دارند که حسگرهای نرم را با استفاده از روش‌های جایگزین توسعه داده‌اند. به‌عنوان مثال، تام و همکارانش تخمین‌زننده‌های تطبیقی برای تخمین خروجی‌های فرایند تحت تأثیر تأخیرهای اندازه‌گیری بزرگ توسعه دادند [۲۰]. دو روش تطبیقی پیشنهاد شد که بر اساس توصیف فرایند ورودی-خروجی یا فضای حالت (State Space) بودند و کاربرد آن‌ها در فرایندهای صنعتی تخمیر، تقطیر و پلیمری‌شدن نشان داده شد. این کار بر اهمیت حسگرهای نرم تطبیقی در بهبود عملکرد کنترل فرایند با ارائه تخمین‌های دقیق از متغیرهای کلیدی فرایند تأکید دارد.

با وجود اینکه حسگرهای نرم ابزارهایی کاربردی در بسیاری از صنایع شیمیایی هستند، توسعه حسگرهای نرم قابل اعتماد برای فرایندهای صنعتی با برخی از چالش‌های فنی و فرایندی مواجه است که برخی از مهم‌ترین آن‌ها شامل موارد زیر هستند:

- **چالش‌های فنی**: چالش‌های عمده فنی شامل کیفیت داده‌ها، ساختار مدل و انتخاب الگوریتم، اعتبارسنجی دقیق مدل، آزمایش و همچنین به‌روزرسانی مداوم مدل‌ها است [۷]. همچنین برای جلوگیری از بروز مشکلات فنی مسائل داده‌ای که باید مدیریت شوند شامل داده‌های گمشده، نقاط پرت، نوسان ها و نرخ‌های نمونه‌برداری نابرابر است [۹] ,[۸]. حسگرهای نرم باید با غیرخطی بودن فرایند، رفتار پویا و تغییرات شرایط با روش‌هایی مانند به‌روزرسانی بازگشتی، رویکرد پنجره متحرک و سازگاری انطباقی سازگار باشند [۳].
- **چالش‌های فرایندی:** چالش‌های خاص فرایند شامل شناسایی روابط غیرخطی بین متغیرها، پویایی فرایند، اندازه‌گیری‌های ناقص و سازگاری با تغییرات هستند [۱۶]. برای مقابله با این چالش‌ها، مدل‌ها باید دقیق، مقاوم، انعطاف‌پذیر، کارآمد از نظر محاسباتی و آسان برای پیاده‌سازی باشند [۹].

در مطالعات مختلفی که پیرامون توسعه حسگرهای نرم انجام شده است، نسل اول این حسگرها بر مدل‌سازی برون‌خط (Offline) یا ایستا (Static) مبتنی بر داده‌های تاریخچه‌ای فرایند برای تخمین متغیرهای مهم تکیه داشتند. که این نوع مدل‌سازی شامل تعیین اولیه پارامترها یا وزن‌های شبکه‌های عصبی در حین آموزش بودند. برای تضمین عملکرد قابل قبول حسگرهای نرم برون‌خط، لازم بود تمامی حالات و شرایط ممکن فرایندی ، از جمله تغییرات محیطی و شرایط ورودی،در مرحله آموزش لحاظ شوند. این موضوع منجر به پیچیدگی بالای مدل و نیاز به مقدار زیادی داده تاریخچه‌ای برای توسعه مدل می‌شود. علاوه بر این، بیشتر فرایندها نوعی رفتار متغیر با زمان را نشان می‌دهند که در آن مدل‌های ایستا قادر به تخمین با دقت قابل قبولی نیستند و بنابراین نیاز به سازوکاری برای تطبیق برخط دارند [۲۱].

سازوکارهای تطبیق به سه دسته‌ی: الف) پویا (Dynamic)، ب) تدریجی (Incremental) و ج) بازگشتی (Recursive) تقسیم‌بندی می‌شوند. سازوکارهای پویا، اثر داده‌های قبلی را بر تخمین فعلی لحاظ می‌کنند. سازوکارهای تدریجی نیاز به تطبیق بر اساس نمونه به نمونه دارند، نمی‌توانند جریان داده‌های برخط را ذخیره کنند و اغلب از ابتدا بدون مرحله آموزش خاص شروع می‌شوند. همچنین سازوکارهای بازگشتی با استفاده از الگوریتم خود ارجاعی (Self-Reference)، با ذخیره بخشی از اطلاعات در طی زمان، تخمین فعلی خود را تطبیق می‌دهد [۱۷].

در این مقاله، حسگر نرم با سازوکار تطبیقی تدریجی برای فرایند معیار تولید مونومر وینیل استات جهت تخمین کسر مولی آب در پایین برج تقطیر طراحی شده است. در توسعه این حسگر نرم، ابتدا با شناخت محدودیت‌ها و خصوصیات فرایند، متغیرهای فرایندی تعیین و پس از انجام آزمون تحلیل همبستگی از بین این متغیرها، متغیرهای هدف برای ادامه مراحل توسعه انتخاب شده است. پس از آن، طراحی آزمایش بر متغیرهای اثرگذار به‌منظور تولید داده‌های شبه‌تجربی انجام گرفته است. با استفاده از این متغیرها به‌عنوان ورودی مدل برج، داده‌های آموزشی برای مدل تهیه شد. پس از تقسیم‌بندی داده‌ها، شبکه عصبی پیش‌خور به‌عنوان مدل داخلی این حسگر نرم آموزش داده شده. پس از اعتبارسنجی مدل، برای ارزیابی توانایی آن در تخمین کسر مولی آب، در سناریوی عیب‌های از پیش تعیین شده، مورد استفاده قرار گرفت. در این مرحله، از سازوکار تطبیقی تدریجی در حین اجرا بهره گرفته شدتا عملکرد مدل بهبود یابد. در نهایت پیش‌بینی‌های مدل با اندازه‌گیری‌های شبه‌واقعی GC مقایسه شده‌اند.

۲ بخش نظری

۲-۱ شرح فرایند و روش‌شناسی

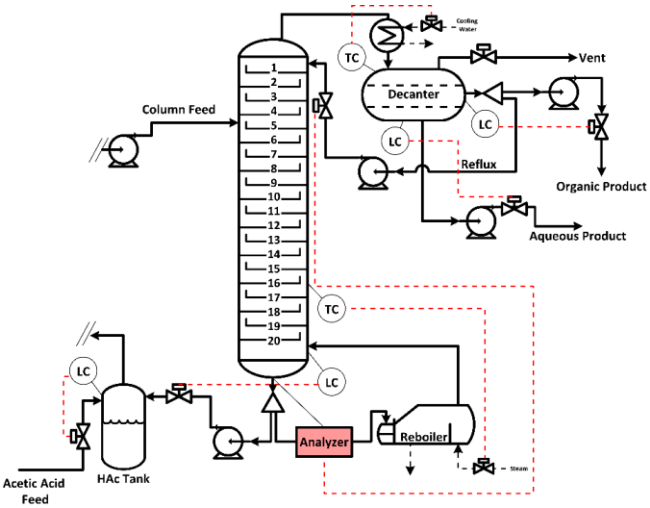
۲-۱-۱ فرایند تولید وینیل‌استات مونومر

در فرایند تولید VAM، ابتدا اتیلن و اکسیژن تازه و استیک‌اسید مایع پس از بخارشدن به‌عنوان خوراک‌های اصلی وارد فرایند می‌شوند. این مواد تحت واکنش اصلی فرایند (واکنش ۱) که ذاتاً گرمازا است، قرار می‌گیرند، VAM و آب که محصولات اصلی این فرایند هستند، تولید می‌شوند. علاوه بر این محصولات، دی‌اکسیدکربن و آب نیز محصولات جانبی واکنش فرعی (واکنش ۲) این فرایند است.

$$C_2H_4 + CH_3COOH + {}^1\!/_2\, O_2 \rightarrow CH_2 = CHOCOCH_3 + H_2O \qquad (۱)$$

$$C_2H_4 + 3O_2 \rightarrow 2CO_2 + 2H_2O \qquad (۲)$$

پس از انجام واکنش، مخلوط گازی پالایش نشده‌ی خروجی از راکتورخنک می‌شود. این فرآیند باعث می‌شود بخشی از VAM تولید شده متراکم شده و از گازهای واکنش نداده جدا شود. VAM متراکم نشده در برج جذب، در استیک اسید سرد جذب می‌شود و سایر گازهای جذب نشده بازیافت می‌شود. تقطیر آزئوتروپیک به عنوان اخرین مرحله این فرایند، VAM و آب را از استیک اسید جدا می‌کند. نمودار جریان‌های فرایندی این برج در شکل ۲ و شرح مفصل‌تر آن در مطالعه چن و همکاران ارائه شده است [۲۲].



شکل ۲ نمودار جریان‌های فرایندی برج تقطیر آزئوتروپیک فرایند VAM

Figure 2 Flowsheet of azeotropic distillation column process streams of VAM process

شرایط عملیاتی کلیدی برای این برج شامل حفظ دما در بازه مشخص، فشار کمی بالاتر از فشار اتمسفری و تنظیمات نرخ جریان برگشتی است. عملکرد کارآمد این برج از نظر تصفیه VAM، بازیابی اسیداستیک، کارایی فرایند و کیفیت محصول از اهمیت بالایی برخوردار است. در تولید مونومر وینیل‌استات، متغیر اثرگذاری که باید نظارت شود، کسر مولی آب در انتهای برج تقطیر است، زیرا این متغیر به کیفیت محصول و کارایی تولید مربوط می‌شود. VAM نباید پلیمری شود زیرا تجمع آن در دماهای بالا باعث آلوده‌شدن و در نتیجه آسیب به تجهیزات می‌شود، بنابراین غلظت VAM در جریان تقطیر باید زیر ppm ۱۰۰ نگه داشته شود. کسر مولی آب می‌تواند به عنوان شاخص غیرمستقیم از غلظت VAM در نظر گرفته شود و به اپراتورها کمک کند تا با تنظیم مناسب پارامترها، از پلیمری شدن VAM جلوگیری نماید.

علاوه بر این، برای برآورده‌کردن مشخصات محصول نهایی، اسیداستیک باید زیر ppm ۱۵۰ نگه داشته شود. کسر مولی بالای آب ممکن است نشان‌دهنده عملکرد ضعیف جداسازی باشد. برج تقطیر آزئوتروپیک برای بازیابی و بازیافت اسیداستیک است و مقدار زیاد آب نشان‌دهنده از دست رفتن اسیداستیک و عملکرد ضعیف برج است. متغیرهای فرایندی برج به همراه مشخصات در جدول ۲ فهرست شده‌اند [۲۲].

۲-۱-۲روش نگه‌داشت مرتبه صفرم (ZOH)

با توجه به جدول ۲، فرستنده‌های اطراف برج تقطیر در این فرایند، دما و سطح مایع را در نقاط مختلف اندازه‌گیری و GC ترکیب درصد مولی را محاسبه می‌کند. مقایسه خروجی این اندازه‌گیری‌ها در شکل ۳ ارائه شده است. همان‌طور که در این شکل مشخص است، تفاوت قابل‌توجهی در اندازه‌گیری فرستنده‌ها و GC وجود دارد.

برای جبران تفاوت بین فرکانس‌های اندازه‌گیری فرستنده‌ها و GC، روش رایج این است که از روش نگه‌داشت مرتبه صفرم (ZOH) برای اندازه‌گیری‌های GC استفاده شود.

جدول ۱ مدل‌های مبتنی بر داده‌ی استفاده‌شده در توسعه حسگرهای نرم در برخی از مطالعات
Table 1 Data-based models used in soft sensor development in some different chemical processes

Soft Sensor Model	Application	Author	References
Time difference (TD) model	Prediction of y-values in a distillation process	Takeshi Okada	[6]
MLR Ensemble	Thermal oxidiser NOx prediction	Kadlec	[8]
PLS	Extruder die melt temperature in polymer process	Abeykoon	[9]
ARMAX	Particle size estimation in grinding plant	A. Casali	[11]
PCA/PLS + LWR	Toluene composition in a splitter column, diesel temperature in a crude oil column	Park	[12]
MLP, FPM, eKF	Biomass estimation in a fermentation process	Jos de Assis	[13]
Improved Elman neural network	Pyrolysis Reactor for Compositions Predictions of Gas Phase Components	H. Zhu	[14]
Neural Network	Soft sensor for a distillation column	A. Rani	[15]

جدول ۲ شرح متغیرهای فرایند برج تقطیر آزئوتروپیک
Table 2 Azeotropic distillation column process variables description

Process variable	Description	Unit	Type	Measurement Frequency
PV1	fresh HAc feed	kmol/min	Manipulated Variable	-
PV2	column reflux	kmol/min	Manipulated Variable	-
PV3	column reboiler duty	kcal/min	Manipulated Variable	-
PV4	column condenser duty	kcal/min	Manipulated Variable	-
PV5	column organic exit	kmol/min	Manipulated Variable	-
PV6	column aqueous exit	kmol/min	Manipulated Variable	-
PV7	column bottom exit	kmol/min	Manipulated Variable	-
PV8	decanter level (organic)	-	Measurement (transmitter)	1/s
PV9	decanter level (aqueous)	-	Measurement (transmitter)	1/s
PV10	decanter temperature	^oC	Measurement (transmitter)	1/s
PV11	column bottom level	-	Measurement (transmitter)	1/s
PV12	fifth tray temperature	^oC	Measurement (transmitter)	1/s
PV13	HAc tank level	-	Measurement (transmitter)	1/s
PV14	column bottom H_2O composition	mol%	Measurement (Analyzer)	1/10min

در این روش، زمانی که GC درگیر اندازه‌گیری مقدار ترکیب درصد آب است، این مقدار برابر اندازه‌گیری قبلی درنظر گرفته می‌شود تا اندازه‌گیری بعدی توسط GC گزارش شود. به کمک این روش، اندازه‌گیری GC می‌تواند با اندازه‌گیری فرستنده‌ها از طریق ZOH مطابق شکل ۴، از دقیقه دهم به بعد همگام شوند. این روش این امکان را می‌دهد تا راهبردهای کنترل فرایند به‌راحتی و به‌طور مؤثر در سامانه‌هایی که فرستنده‌ها و GC با فواصل اندازه‌گیری به‌طور قابل‌توجهی متفاوت کار می‌کنند، عمل کنند.

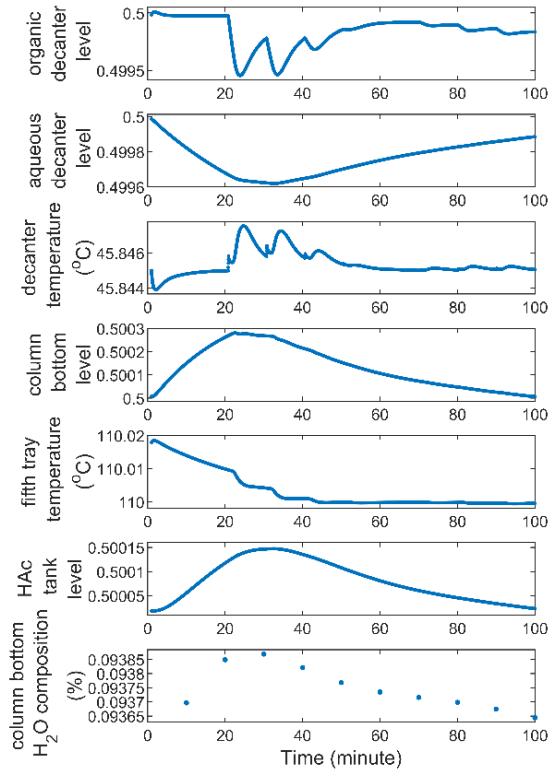
با وجود اینکه با استفاده از این روش اندازه‌گیری‌ها با نرخ مشابه با فرستنده‌ها در اختیار کنترل‌کننده‌ها قرار می‌گیرند اما مقادیر تخمین‌زده شده با روش ZOH، با مقادیر واقعی اختلاف دارند و ممکن است در شرایط متفاوت این اختلاف چشمگیرتر شود.

۲-۱-۳ انتخاب متغیرهای اساسی به‌کمک تحلیل آزمون همبستگی

به‌منظور آماده‌سازی داده معتبر برای آموزش مدل حسگر نرم، ابتدا می‌بایست با شناخت روابط بین متغیرهای فرایندی، متغیرهای اثرگذار مشخص شوند. به‌منظور تحلیل همبستگی غیرخطی بین متغیرهای فرایندی، آزمون اسپیرمن (Spearman) یک بار برای تحلیل روابط بین متغیرهای دستکاری‌شونده (manipulated) و اندازه‌گیری‌ها و بار دیگر برای تحلیل روابط بین اندازه‌گیری‌های مختلف صورت گرفته است. ضریب همبستگی رتبه‌ای اسپیرمن معیاری آماری است که برای تعیین قدرت رابطه بین دو متغیر استفاده می‌شود. این آزمون غیرپارامتری است به‌طوری‌که رابطه‌ی یکنواخت (monotonic) بین دو متغیر را اندازه‌گیری می‌کند. این ضریب از ۱- تا ۱ متغیر است، به‌طوری‌که ۱- نشان‌دهنده همبستگی کاملاً معکوس، ۱ نشان‌دهنده همبستگی کاملاً مستقیم و صفر نشان‌دهنده عدم همبستگی است [۲۳].

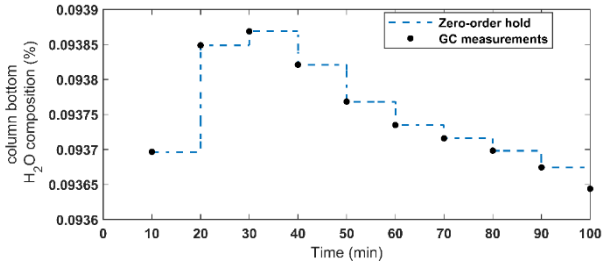
۲-۱-۴ طراحی آزمایش به کمک روش LHS

به‌منظور در نظر گرفتن حداکثر دامنه تغییرات متغیرهای فرایند در حین آماده‌سازی داده‌های آموزش، از روش نمونه‌برداری LHS استفاده شده است. روش LHS، روش نمونه‌برداری آماری است که در طراحی آزمایش‌ها برای تولید مجموعه نمونه‌ای از ترکیب‌های متغیرهای دستکاری‌شونده استفاده می‌شود. در مقایسه با نمونه‌برداری تصادفی، روش LHS اطمینان می‌دهد که کل محدوده‌ی رفتار پویای هر متغیر پوشش داده شود و مورد بررسی قرار گیرد. این روش به‌ویژه برای مجموعه داده‌های با ابعاد بالا مؤثر است، زیرا در عین پوشش کامل رفتار سیستم، تعداد داده‌های آموزش مورد نیاز را کاهش می‌دهد [۲۴].



شکل ۳ نمونه‌برداری از متغیرهای فرایند در ۱۰۰ دقیقه عملیات برج تقطیر آزئوتروپیک

Figure 3 Process variables sampling in 100 minutes operation of azeotropic distillation column



شکل ۴ اندازه‌گیری متغیر PV14 و تخمین آن به کمک سیگنال نگه‌داری مرتبه صفر

Figure 4 PV14 measurements and its zero-order hold signal prediction

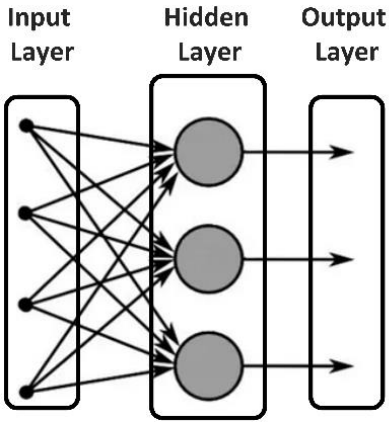
۲-۱-۵ حسگرهای نرم مبتنی بر شبکه عصبی

وجود فرایندهای غیرخطی، پویایی ناشناخته، وابستگی زمانی داده‌ها و الگوهای رفتاری پیچیده میان متغیرها، شبکه‌های عصبی را به یکی از مدل‌های داخلی کارآمد برای حسگرهای نرم تبدیل کرده است. شبکه‌های عصبی پیش‌خور (FFNN) قادرند روابط غیر خطی پیچیده را تقریب بزنند و به خوبی به شرایط متغیر فرایند تعمیم یابند [۲۵]. از این رو، برای مدلسازی فرایندهای شیمیایی مناسب‌تر از روش‌های خطی مانند PCR و PLS هستند [۲۶].

این نوع شبکه عصبی به کیفیت داده‌ها وابسته است، در معماری‌های پیچیده مستعد بیش‌برازش است و آموزش آن‌ها از نظر محاسباتی سبک و پیاده‌سازی آن‌ها آسان است. با وجود معایب خاص خود، شبکه‌های عصبی پیش‌خور در کاربردهای به‌هنگام مفید هستند که این امر آن‌ها را به فرایندهای صنعتی قابل‌تطبیق می‌کند [۱۶]. شکل ۵ نمونه‌ای از ساختار شبکه عصبی پیش‌خور را نمایش داده است.

۲-۱-۶ بیان مسئله

ترکیب درصد آب در پایین برج تقطیر آزئوتروپیک یکی از مهم‌ترین متغیر در فرایند تولید VAM است که در این فرایند، این متغیر توسط GC با تأخیر زمانی ۱۰ دقیقه‌ای، ترکیب درصد آب را هر ۱۰ دقیقه اندازه‌گیری می‌کند. این در حالی است که سایر متغیرهای مهم این فرایند هر ثانیه توسط حسگرهای سخت‌افزاری (فرستنده‌ها) اندازه‌گیری می‌شود [۲۲]. علاوه بر هزینه‌بر بودن GC، این تأخیر زمانی زیاد و اختلاف قابل توجه در گام اندازه‌گیری‌های متغیرهای مهم این فرایند باعث ایجاد خطا در راهبردهای کنترلی، اختلال در به کارگیری پردازش داده در لحظه و در تصمیم‌گیری به‌هنگام می‌شود.



شکل ۵ ساختار شبکه عصبی پیش‌خور با لایه مخفی میانی

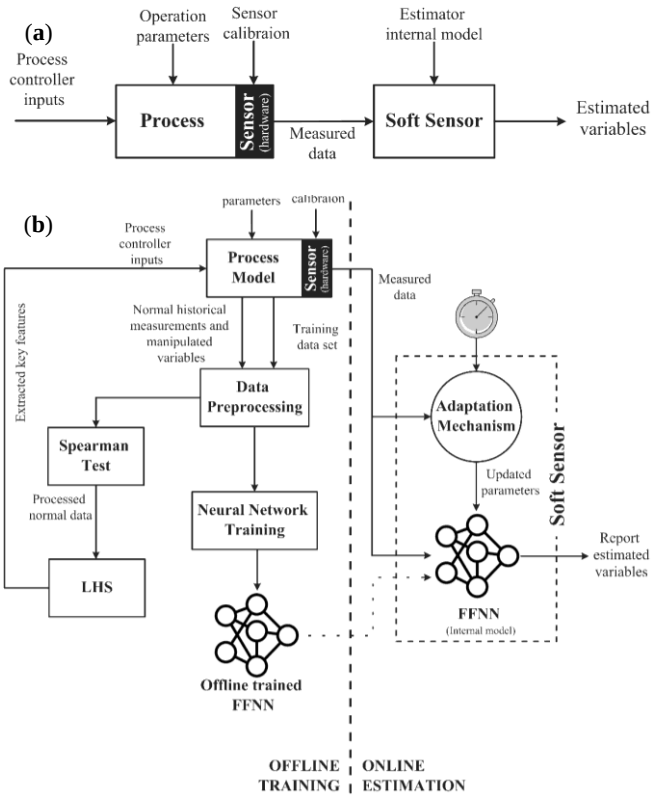
Figure 5 A Feed Forward Neural Network (FFNN) structure with one hidden layer

۲-۱-۷ ایجاد حسگر نرم کروماتوگرافی گازی برای تخمین درصد آب

توسعه حسگرهای نرم مبتنی بر داده معمولاً شامل تعریف اهداف، جمع‌آوری و تحلیل داده‌ها، پیش‌پردازش داده‌ها، استخراج ویژگی‌ها، انتخاب مدل‌ها، آموزش، اعتبارسنجی، پیاده‌سازی و نگهداری و تطبیق در طول زمان می‌باشد [۷], [۲۷], [۲۸]. مراحل ایجاد حسگر نرم در این مطالعه به این صورت است که در گام اول، مدل برج به مدت ۱۰۰۰ دقیقه اجرا شده تا داده‌های فرایند تولید شوند. همانطور که در بخش قبلی ذکر شد، فواصل زمانی اندازه‌گیری واقعی فرستنده‌ها، ۱ نمونه در ثانیه و برای GC، ۱ نمونه در هر ۱۰ دقیقه است. سپس، آزمون تحلیل همبستگی برای تحلیل روابط غیرخطی بین متغیرهای دستکاری‌شونده و اندازه‌گیری‌ها انجام شد. این تحلیل، انتخاب ویژگی‌های ورودی که با کسر مولی آب همبسته هستند را ممکن می‌سازد و می‌تواند در بهبود دقت پیش‌بینی کمک‌کننده باشد. در گام سوم، برای به‌دست‌آوردن دامنه کامل پویایی برج و بهبود آموزش شبکه عصبی، از روش‌های نمونه‌گیری LHS بر روی متغیرهای ورودی استفاده شده است. این رویکرد دید جامع‌تر و کارآمدتری از خصوصیات و پویایی برج را فراهم می‌کند و بدین ترتیب اطلاعات ضروری را تولید می‌کند که می‌تواند دقت و استحکام (Robust) مدل را بهبود بخشد. گام چهارم شامل

پیش‌پردازش، ورود این متغیرها به مدل برج تقطیر و شبیه‌سازی مجدد با حضور متغیرهای ورودی تغییر یافته است. پیش‌پردازش داده‌های خام و شبیه‌سازی در نرم‌افزار MATLAB صورت گرفته است. پیش‌پردازش شامل نرمال‌سازی داده‌ها با استانداردسازی مقیاس متغیرها، پرکردن مقادیر ناموجود، و شناسایی و مدیریت نقاط پرت با استفاده از روش‌های آماری برای انسجام و قابلیت اطمینان داده‌ها است. در گام بعدی، داده‌های شبیه‌سازی‌شده به سه بخش آموزش، اعتبارسنجی و آزمایش تقسیم شده‌اند، به‌طوری که نسبت ۶۰ تا ٪۷۰ برای آموزش، ۱۵ تا ٪۲۰ برای اعتبارسنجی، و بقیه برای آزمایش در نظر گرفته شده است.

انتخاب ساختمان و الگوریتم یادگیری شبکه عصبی گام ششم را تشکیل می‌دهند. ساختمان شبکه عصبی پیش‌خور انتخابی به‌عنوان مدل داخلی این حسگر نرم، شامل لایه ورودی، سه لایه پنهان که هر کدام به‌ترتیب شامل ۲۵، ۱۰ و ۵ نورون و یک لایه خروجی است. الگوریتم یادگیری مورد استفاده برای آموزش این شبکه عصبی، الگوریتم لوانبرگ-مارکواردت در نظر گرفته شده است، در حالی که نرخ یادگیری بر روی ۰/۱ تنظیم شده و آموزش تا زمان رسیدن به دقت مورد نظر صورت گرفته است. این شبکه عصبی با هدف به حداقل رساندن میانگین مربعات خطا (MSE) به‌عنوان معیار عملکرد، آموزش داده شد. نحوه به‌کارگیری این حسگر نرم در تعامل با مدل فرایند در شکل ۶ (a) ارائه شده است.



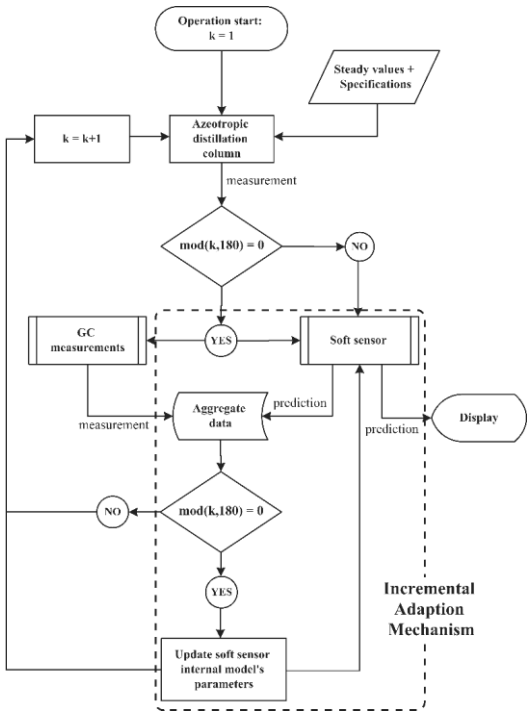
شکل ۶ a) نحوه به‌کارگیری حسگر نرم در فرایند؛ b) ساختار حسگر نرم طراحی شده و رویه آموزش برون‌خط حسگر نرم و به‌کارگیری برخط آن

Figure 6 a) Soft sensor implementation in actual process, b) The structure of the soft sensor has been developed, and its training and online implementation procedures

در نهایت به منظور حفظ دقت پیش‌بینی در شرایط فرایندی مختلف در طول زمان، سازوکار به‌کارگیری تطبیقی تدریجی پیاده‌سازی شده است. این امر، درصد اطمینان پیش‌بینی مدل در حضور تغییرات مختلف فرایندی که ممکن است در مرحله آموزش در نظر گرفته نشده باشند، افزایش می‌دهد. این روش شناسی، با تکیه بر قابلیت‌های شبکه‌های عصبی و به کمک سازوکار به‌کارگیری تطبیقی تدریجی، تخمین قابل اعتمادی از کسری مولی آب به‌صورت به‌هنگام ارائه می‌کند. مراحل آموزش و سازوکار به‌کارگیری تطبیقی در شکل ۶ (b) شرح داده شده است.

۲-۱-۸ سازوکار تطبیقی تدریجی

استفاده از سازوکارهای تطبیقی به‌منظور سازگاری حسگرهای نرم با رفتار متغیر با زمان فرایندهای شیمیایی روشی معمول است. برای تجهیز حسگر نرم به قابلیت تطبیق‌پذیری، دو کار باید انجام شود: اول، شناسایی نیاز به تطبیق از طریق نظارت بر عملکرد مدل از طریق مقایسه خروجی با تحلیل‌های آزمایشگاهی و پس از آن تطبیق واقعی صورت پذیرد. در حالی که استفاده از سازوکارهای پویا پیچیدگی و تأخیر زیاد و سازوکارهای بازگشتی نیاز به استفاده از الگوریتم‌های خودارجاعی و ذخیره‌سازی اطلاعات تاریخچه‌ای دارند، سازوکار تدریجی با استفاده از به‌روزرسانی و تطبیق پارامترهای مدل به‌صورت گام‌به‌گام و بدون نیاز به ذخیره‌سازی اطلاعاتی، سهولت استفاده و سرعت به‌کارگیری بیشتری دارند. اما برای استفاده از این سازوکارها، نیاز به بازخورد متناوب عملکرد حسگر نرم است. بنابراین، با اجماع داده‌های برخط، بازخورد عملکرد و دانش کارشناسان، سازوکار تطبیقی تدریجی ایجاد و مطابق شکل ۷ به‌کارگرفته شده است. این سازوکار به این صورت عمل می‌کند که هر ۱۰ دقیقه معادل با ۱۸۰ مشاهده، پارامترها و وزن‌های مدل داخلی حسگر نرم، با استفاده از الگوریتم آموزش شبکه عصبی، به‌روزرسانی می‌شوند.



شکل ۷ الگوریتم سازوکار تطبیقی تدریجی حسگر نرم

Figure 7 Incremental soft sensor adaptation mechanism

۳ نتایج و بحث

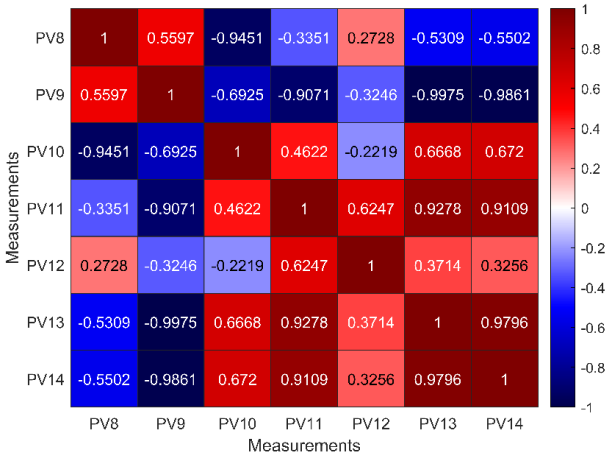
برای بررسی سازگاری حسگر نرم توسعه داده‌شده با فرایندهای شیمیایی پیچیده، این مدل تحت عملیات همراه با عیب‌های شبیه‌سازی شده مختلف در فرایند تولید مونومر وینیل‌استات آزموده شده و نتایج به‌کارگیری آن در این قسمت ارائه شده است. همچنین با مقایسه عملکرد این مدل با اندازه‌گیری‌های خروجی از GC تحت شرایط عملیاتی مختلف، به بهبودهای حاصل در کارایی تحت شرایط پویا اشاره شده است.

۳-۱ آزمون همبستگی متغیرهای فرایند

هدف از انجام این آزمون‌ها، اول یافتن مرتبط‌ترین اندازه‌گیری‌ها با متغیر هدف یعنی کسر مولی آب و دوم، یافتن اثرگذارترین متغیرهای دستکاری‌شونده بر این متغیر هدف است که هدف اول در انتخاب ورودی‌های مدل داخلی حسگر نرم و هدف دوم در انتخاب متغیرهای ورودی برای طراحی آزمایش موثر هستند. نتایج خروجی این آزمون‌ها در شکل‌های ۸ و ۹ ارائه شده است. مطابق نتایج مشهود در شکل ۸، متغیر PV13، سطح استیک‌اسید، متغیر PV11، سطح مایع پایین برج و متغیر PV9، سطح محصول مایع در آب جداکننده سه فازی، بیشترین همبستگی را با متغیر هدف دارند. از طرفی بر اساس شکل ۹، متغیرهای PV1، PV6 و PV7 که به‌ترتیب، دبی خوراک تازه استیک‌اسید، دبی محصول مایع در آب و دبی مایع پایین برج را نمایندگی می‌کنند، اثرگذارترین متغیرهای دستکاری‌شونده روی متغیر هدف هستند.

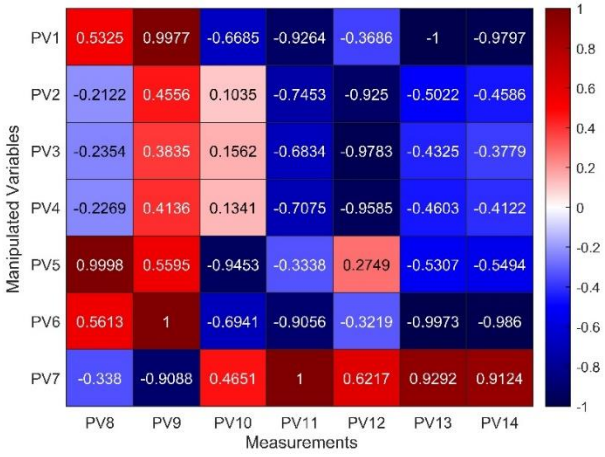
۳-۲ آزمون همبستگی متغیرهای فرایند

شکل ۱۰ متغیرهای ورودی به شبکه عصبی پیش‌خور را که به کمک روش LHS انتخاب شده‌اند را نشان می‌دهد. این سیگنال‌ها، با توجه به پوشش حداکثری بازه مجاز مقادیر متغیرهای ورودی و در عین حال حفظ پایداری سامانه ایجاد شده‌اند [۲۹] و تعداد نقاط و بازه زمانی هر آزمایش با سعی و خطا به دست آمده است.



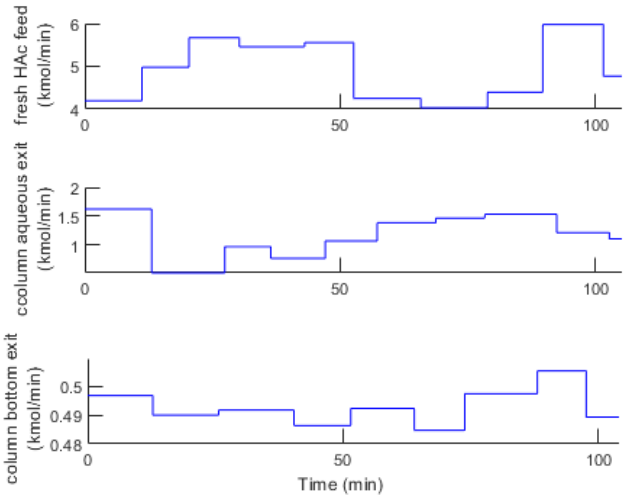
شکل ۸ تحلیل همبستگی متغیرهای اندازه‌گیری

Figure 8 Measurement variables correlation analysis (Spearman test)



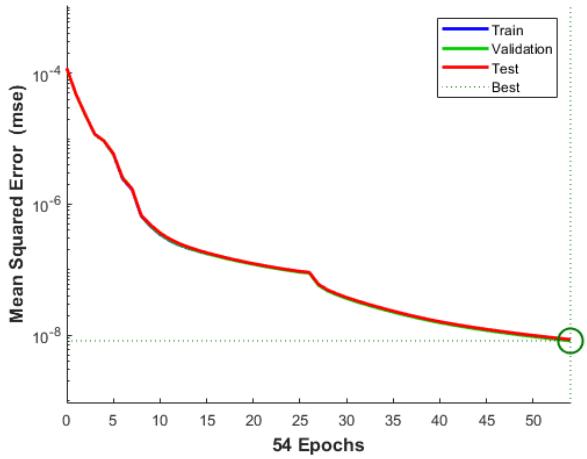
شکل ۹ اندازه‌گیری و تحلیل همبستگی متغیرهای دستکاری شونده

Figure 9 Measurement and manipulated variables correlation analysis (Spearman test)



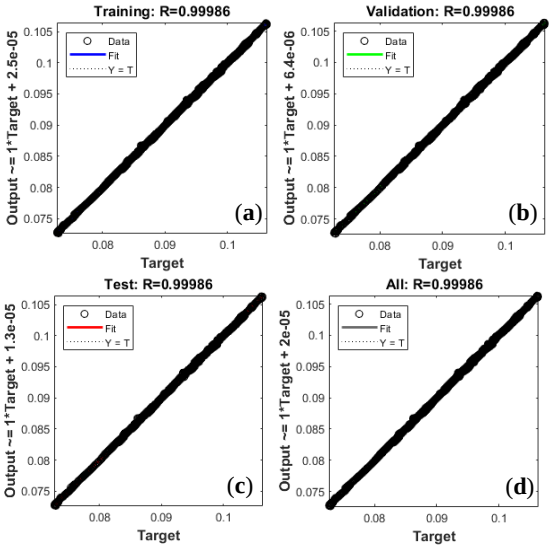
شکل ۱۰ سینگال ورودی به فرایند

Figure 10 Process input data signal



شکل ۱۱ عملکرد شبکه عصبی پیش‌خور در آموزش، اعتبارسنجی و آزمایش

Figure 11 Train, validation and test performance of FFNN



شکل ۱۲ کیفیت برازش مقادیر واقعی و پیش‌بینی شده: a) آموزش؛ b) اعتبارسنجی؛ c) آزمایش؛ d) کل داده‌ها

Figure 12 performance of Actual and prediction regression analysis: a) Training, b) Validation, c) Test, d) Overall

برای تصدیق این ادعا، پیش‌بینی این مدل و مقادیر اندازه‌گیری شده GC در طی بازه آزمایش در شکل ۱۳ مقایسه شده است. انطباق قابل قبول بین مقادیر واقعی اندازه‌گیری‌شده توسط GC و مقادیر پیش‌بینی‌شده توسط حسگر نرم در شکل ۱۳(a)، نشان دهنده دقت قابل قبول مدل و توانمندی آن در درک جزییات و پویایی‌های زیرین فرایند است. این امر امکان جایگزینی مطمئن حسگر نرم به جای GC را فراهم می کند. همچنین مقادیر پیش‌بینی‌شده توسط حسگر نرم در شکل ۱۳(b) با مقادیر تخمینی به روش ZOH مقایسه شده است. عملکرد به‌هنگام حسگر نرمِ ایجاده شده، در شرایط عملیاتی مختلف آزموده شده و نتایج بررسی‌های انجام‌گرفته، در قسمت‌های بعدی گزارش شده است.

۳-۴ به‌کارگیری مدل در حضور عیب‌های مختلف عملیاتی

به‌منظور بررسی استحکام و عملکرد تطبیقی تدریجی حسگر نرم توسعه‌یافته، سه سناریوی مختلف از عیب‌های فرایندی، که در حین جمع‌آوری داده‌های آموزشی درنظر گرفته نشده بودند، تعریف و پیاده‌سازی شده‌اند. این سناریوها نشان‌دهنده برخی اختلالات واقعی در عملکرد برج تقطیر هستند و با هدف بررسی توانایی حسگر در حفظ دقت پیش‌بینی در شرایط غیرعادی به کار گرفته شده‌اند. [۲۲].

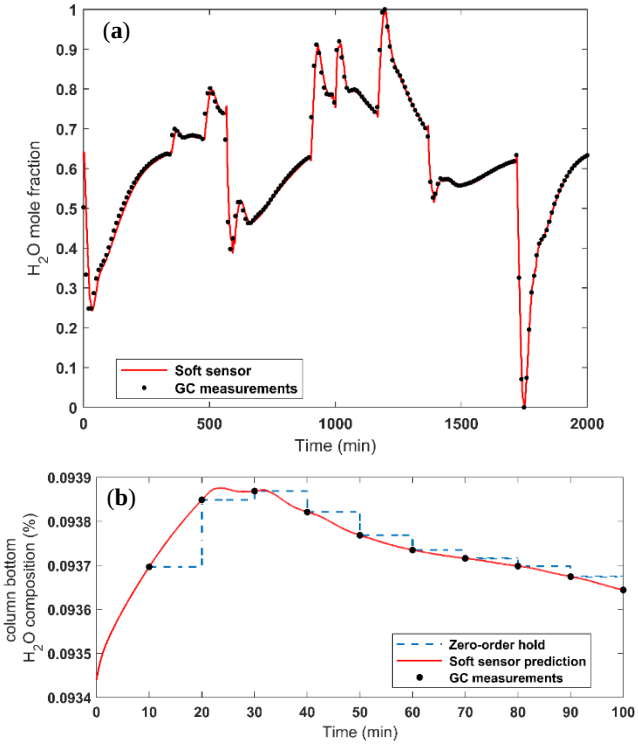
- **سناریوی عیب یکم:** نقطه تنظیم (Setpoint) ترکیب درصد (درصد مولی) آب در انتهای برج از ٪۹ به ٪۱۸ افزایش یابد.
- **سناریوی عیب دوم:** جریان خوراک تازه استیک اسید به مدت ۵ دقیقه به‌طور کامل قطع شود.
- **سناریوی عیب سوم:** خوراک ورودی به برج تقطیر به مدت ۵ دقیقه به‌طور کامل قطع شود.

این سناریوها در جدول ۳ بر اساس شناسه، متغیر مربوطه، نوع و روش یا شدت هر عیب خلاصه شده‌اند.

جدول ۳ توصیف سناریوهای عیب عملیاتی فرایند برای آزمودن عملکرد حسگر نرم

Table 3 Description of operational fault scenarios for testing the performance of the soft sensor

Fault ID	Variable	Type of Fault	Method/Magnitude of Fault
1	H_2O Composition Setpoint	Step Change	Increase from 9% to 18%
2	HAc Fresh Feed Stream	Supply Interruption	Loss for 5 minutes
3	Column Feed	Supply Interruption	Loss for 5 minutes

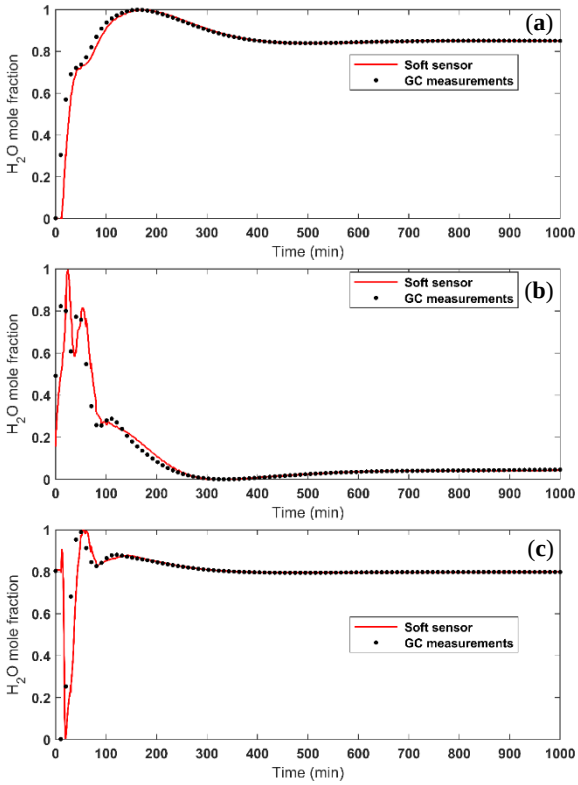


شکل ۱۳ a) مقایسه اندازه‌گیری GC و پیش‌بینی مدل شبکه عصبی پیش‌خور برای جزء مولی آب؛ b) مقایسه تخمین اندازه‌گیری متغیر PV14 به روش ZOH و حسگر نرم

Figure 13 a) Comparison of analyzer measurements and FFNN model predicted water mole fraction, b) Comparison of PV14 variable measurement estimation using the ZOH method and soft sensor

مقایسه عملکرد به‌هنگام حسگر نرم با اندازه‌گیری‌های واقعی GC تحت شرایط عملیاتی مختلف در سناریوهای عیب یکم تا سوم به‌ترتیب در شکل‌های ۱۴(a)، ۱۴(b) و ۱۴(c) نمایش داده شده‌اند.

این مقایسه‌ها نشان می‌دهند که مدل پیشنهادی می‌تواند با کمک سازوکار تطبیقی تدریجی با تغییرات ناگهانی در فرایند سازگار شده و پیش‌بینی با دقت قابل‌قبولی از کسر مولی آب در انتهای برج را ارائه دهد. در هر مورد، حسگر نرم به‌طور مؤثری با اندازه‌گیری‌های GC تطابق دارد، که پتانسیل آن را به‌عنوان ابزار نظارت به‌هنگام برای شرایط عادی و همچنین در حضور انواع عیب نشان می‌دهد.



شکل ۱۴ مقایسه اندازه‌گیری‌های تخمینی و GC برای: a) سناریوی عیب یکم؛ b) سناریوی عیب دوم؛ c) سناریوی عیب سوم

Figure 14 Predicted and GC analyzer measurements comparison for: (a) fault scenario #1, b) fault scenario #2, c) fault scenario #3

۴ جمع‌بندی

روش‌های سنتی اندازه‌گیری در صنایع شیمیایی، زمان‌بر و پرهزینه هستند. به‌علاوه، به‌علت تأخیر بالا در اندازه‌گیری، تحلیل به‌هنگام را غیرممکن یا با خطای قابل‌توجهی همراه می‌کند. حسگرهای نرم، پیش‌بینی به‌هنگام متغیرهای اساسی را در فرایندهای صنعتی پیچیده ممکن می‌سازند و تحلیل‌های برخط، تبدیل آن به تصمیمات قابل اقدام به‌هنگام و کارایی عملیاتی فرایند را بهبود می‌بخشند. با به‌کارگیری حسگرهای نرم، مدیریت فرایند از حالت واکنشی به حالت پیشگیرانه تغییر می‌کند و امکان پیش‌بینی و اصلاح انحرافات قبل از تشدید آن‌ها را فراهم می‌آورد.

در این مطالعه توسعه و به‌کارگیری حسگر نرم برای تخمین کسری مولی آب در پایین برج تقطیر آزئیوتروپیک در فرایند تولید مونومر استات وینیل، ارائه شده است. هدف اصلی جایگزینی دستگاه کروماتوگرافی گازی سنتی، که با تأخیرهای زیاد در اندازه‌گیری مواجه است، با یک مدل پیش‌بین بهنگام است. روند نظام‌مند توسعه مدل در این مطالعه شامل تحلیل همبستگی برای انتخاب ویژگی‌ها، طراحی آزمایش با استفاده از روش نمونه‌گیری LHS، آموزش و اعتبارسنجی شبکه عصبی پیش‌خور بود که به پیاده‌سازی تطبیقی تدریجی برای مدیریت سناریوهای عملیاتی مختلف منجر شد.

نتایج نشان داد که مدل شبکه عصبی پیش‌خور پیشنهادی، کسری مولی آب را در هر دو فاز عملیاتی عادی و معیوب با دقت مناسبی تخمین زده است. نتایج همچنین، پیاده‌سازی تطبیقی تدریجی حسگر نرم برای در نظر گرفتن تغییرات فرایند و حضور عیب به‌هنگام را ارائه کرده است. مقایسه مقادیر پیش‌بینی‌شده و اندازه‌گیری‌شده در سناریوهای مختلف عیب، نشان‌دهنده استحکام عملکرد حسگر نرم از نظر تشخیص و پاسخ به اختلالات است. به عبارت دیگر، مدل پیشنهادی می‌تواند جایگزین قابل اعتماد و مؤثری برای نظارت برخط بر متغیرهای اساسی فرایند در فرایند شیمیایی پیچیده ارائه دهد تا کنترل با دقت قابل‌قبول، ثبات و کارایی عملیاتی را به‌دست آورد.

بهره‌بردای کامل از حسگرهای نرم، با توجه به قابلیت‌های بالای آن‌ها، نیازمند غلبه بر چالش‌هایی نظیر پیچیدگی‌های فرایندی، قابلیت مقیاس‌پذیری، وابستگی شدید زمانی ویژگی‌ها و تغییرات شدید و وسیع متغیرهاست.این چالش‌ها ممکن است با ادغام روش‌های پیشرفته‌ای مانند یادگیری عمیق، شبکه‌های عصبی بازگشتی و ترکیبی، و یادگیری انتقالی، برطرف شوند و در نتیجه، مقیاس‌پذیری و استحکام حسگرهای نرم در کاربردهای صنعتی به طور چشم‌گیری بهبود یابد. پیچیدگی فزاینده فرایندهای شیمیایی صنعتی، پلیمری و دارویی و پیشرفت روش‌های دیجیتال مبتنی بر داده، حسگرهای نرم را به یک ابزار کاربردی تبدیل کرده است. همچنین، در عصر انقلاب صنعتی چهارم، ابزارهای دیجیتال نوظهور به داده‌های پیوسته و دقیق برای تحلیل‌های برخط و درلحظه وابسته‌اند، و توسعه حسگرهای نرم نقشی کلیدی در تحقق این نیاز ایفا می‌کند.

۵ جدول اختصارات

حروف اختصاری	توضیح
ANN	Artificial Neural Network
DoE	Design of Experiment
ESN	Echo State Network
FFNN	Feed Forward Neural Network
FPMs	First-Principles Models
GPR	Gaussian Process Regression
LHS	Latin Hypercube Sampling
LSTM	Long-Short Term Memory
MSE	Mean Square Error
PCA	Principal Component Analysis
PCR	Principal Component Regression
PLS	Partial Least Square
SVD	Singular Value Decomposition
SVM	Support Vector Machine
ZOH	Zero Order Holding

مراجع

1. P. Fantke *et al.*, Transition to sustainable chemistry through digitalization, *Journal of Chem CelPress*, vol. 7, Elsevier, no. 11, pp. 2866–2882, Nov. 2021, doi: 10.1016/j.chempr.2021.09.012.
2. P. Mohindru, A review on smart sensors used in chemical industry 4.0, *Journal of Data Acquisition and Processing*, vol.38, Scimago Journal & Country Rank, 2023, pp. 1172-1188, doi: 10.5281/zenodo.776698
3. E. H. C. Ito, A. R. Secchi, M. V. C. Gomes, and C. R. Paiva, Development of a gas composition soft sensor for distillation columns: A simplified model based and robust approach, in *Computer Aided Chemical Engineering*,vol.44,Elsevier, 2018, pp. 661–666. doi:10.1016/B978-0-444-64241-7.50105-1.
4. S. P. H. R. Rajesh, The Analysis of Different Types of IoT Sensors and security trend as Quantum chip for Smart City Management, *IOSR J. Bus. Manag.*, vol. 20, no. 1, pp. 55–60, Jan. 2018, doi: http://dx.doi.org/10.9790/487X-2001045560.

5. Dr. Diane Turner, Gas Chromatography – How a Gas Chromatography Machine Works, How To Read a Chromatograph and GCxGC, Technology networks, Analysis andSeparations.[Online].Available:https://www.anthias.co.uk
6. T. Okada, H. Kaneko, and K. Funatsu, Development of a model selection method based on the reliability of a soft sensor model, 2012.
7. Y. Jiang, S. Yin, J. Dong, and O. Kaynak, A Review on Soft Sensors for Monitoring, Control, and Optimization of Industrial Processes, *IEEE Sens. J.*, vol. 21, no. 11, pp. 12868–12881, Jun. 2021, doi: 10.1109/JSEN.2020.3033153.
8. P. Kadlec, B. Gabrys, and S. Strandt, Data-driven Soft Sensors in the process industry, *Comput. Chem. Eng.*, vol. 33, no. 4, pp.795–814,Apr.2009,doi: 10.1016/j.compchemeng.2008.12.012.
9. C. Abeykoon, Design and Applications of Soft Sensors in Polymer Processing: A Review, *IEEE Sens. J.*, vol. 19, no. 8, pp. 2801–2813, Apr. 2019, doi: 10.1109/JSEN.2018.2885609.
10. X. Yuan, S. Qi, Y. A. W. Shardt, Y. Wang, C. Yang, and W. Gui, Soft sensor model for dynamic processes based on multichannel convolutional neural network, *Chemom. Intell. Lab. Syst.*, vol. 203, p. 104050, Aug. 2020, doi: 10.1016/j.chemolab.2020.104050.
11. I. A. Udugama *et al.*, Novel Soft Sensor for Measuring and Controlling Product Recovery in a High-Purity, Multicomponent, Side-Draw Distillation Column, *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 58, no. 43, pp. 20026–20035, Oct. 2019, doi: 10.1021/acs.iecr.9b04594.
12. S. Park and C. Han, A nonlinear soft sensor based on multivariate smoothing procedure for quality estimation in distillation columns, *Comput. Chem. Eng.*,vol. 24, no. 2–7, pp. 871–877, Jul. 2000, doi: 10.1016/S0098-1354(00)00343-4.
13. R. F. E. Jiménez, C. M. A. Zaragoza, J. A. Hernández, M. A. Medina, and G. V. G. Ramírez, Design and implementation of an observer-based soft sensor for a heat exchanger, *Journal of Dyna (Medellin, Colombia)*, vol. 116, 2011, pp.89-97, http://www.redalyc.org/articulo.oa?id=49622365012.
14. W. Zhu, Y. Ma, Y. Zhou, M. Benton, and J. Romagnoli, Deep Learning Based Soft Sensor and Its Application on a Pyrolysis Reactor for Compositions Predictions of Gas Phase Components, *in Computer Aided Chemical Engineering*, vol. 44, Elsevier, 2018, pp. 2245–2250. doi: 10.1016/B978-0-444-64241-7.50369-4.
15. A. Rani, V. Singh, and J. R. P. Gupta, Development of soft sensor for neural network based control of distillation column, *ISA Trans.*, vol. 52, no. 3, pp. 438–449, May 2013, doi: 10.1016/j.isatra.2012.12.009.
16. K. Funatsu, Process Control and Soft Sensors, *in Applied Chemoinformatics*, 1st ed., T. Engel and J. Gasteiger, Eds., Wiley,2018, pp. 571–584. doi: 10.1002/9783527806539.ch13.
17. P. Kadlec, R. Grbić, and B. Gabrys, Review of adaptation mechanisms for data-driven soft sensors, *Comput. Chem. Eng.*, vol. 35, no. 1, pp. 1–24, Jan. 2011, doi: 10.1016/j.compchemeng.2010.07.034.
18. L. P. A. Espufia, A Systematic Approach for Soft Sensor Development, *Computers & Chemical Engineering* , vol. 31, Elsevier,pp.419-425,2007, https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2006.05.030.
19. B. Lin, B. Recke, J. K. H. Knudsen, and S. B. Jørgensen, A systematic approach for soft sensor development, *Comput. Chem. Eng.*, vol. 31, no. 5–6, pp. 419–425, May 2007, doi: 10.1016/j.compchemeng.2006.05.030.
20. M. T. Tham, G. A. Montague, A. Julian Morris, and P. A. Lant, Soft-sensors for process estimation and inferential control, *J. Process Control*, vol. 1, no. 1, pp. 3–14, Jan. 1991, doi: 10.1016/0959-1524(91)87002-F.
21. B. M. Wise, N. B. Gallagher, S. Watts Butler, D. D. White, and G. G. Barna, Development and Benchmarking of Multivariate Statistical Process Control Tools for a Semiconductor ETCH Process: Impact of Measurement Selection and Data Treatment on Sensitivity, *IFAC Proc. Vol.*, vol. 30, no. 18, pp. 35–42, Aug. 1997, doi: 10.1016/S1474-6670(17)42377-9.
22. R. Chen, K. Dave, T. J. McAvoy, and M. Luyben, A Nonlinear Dynamic Model of a Vinyl Acetate Process, *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 42, no. 20, pp. 4478–4487, Oct. 2003, doi: 10.1021/ie020859k.
23. Y. Dodge, The concise encyclopedia of statistics, *Springer*, New York, pp. 92-119, 2010, ISBN: 978-0-387-32833-1.
24. W.-L. Loh, On Latin hypercube sampling, *The Annals of Statistics*, vol.24, Project Euclid, vol. 24, pp. 2058-2080, October 1996, doi: 10.1214/aos/1069362310
25. X. Yuan, Y. Gu, Y. Wang, C. Yang, and W. Gui, A Deep Supervised Learning Framework for Data-Driven Soft Sensor Modeling of Industrial Processes, *IEEE Trans. Neural Netw. Learn. Syst.*, vol. 31, no. 11, pp. 4737–4746, Nov. 2020, doi: 10.1109/TNNLS.2019.2957366.
26. Y.-L. He, Z.-Q. Geng, and Q.-X. Zhu, Data driven soft sensor development for complex chemical processes using extreme learning machine, *Chem. Eng. Res. Des.*, vol. 102, pp. 1–11, Oct. 2015, doi: 10.1016/j.cherd.2015.06.009.
27. H. Pan, T. Su, X. Huang, and Z. Wang, LSTM-based soft sensor design for oxygen content of flue gas in coal-fired power plant, *Trans. Inst. Meas. Control*, vol. 43, no. 1, pp. 78–87, Jan. 2021, doi: 10.1177/0142331220932390.
28. Y. S. Perera, D. A. A. C. Ratnaweera, C. H. Dasanayaka, and C. Abeykoon, The role of artificial intelligence-driven soft sensors in advanced sustainable process industries: A critical review, *Eng. Appl. Artif. Intell.*, vol. 121, p. 105988, May 2023, doi: 10.1016/j.engappai.2023.105988.
29. D. Rodriguez-Granrose *et al.*, Design of experiment (DOE) applied to artificial neural network architecture enables rapid bioprocess improvement, *Bioprocess Biosyst. Eng.*, vol. 44, no. 6, pp. 1301–1308, Jun. 2021, doi: 10.1007/s00449-021-02529-3.