



Πολυτεχνείο Κρήτης

Σχολή Μηχανικών Παραγωγής και Διοίκησης

Μοντελοποίηση βιομηχανικών διεργασιών επεξεργασίας υγραερίου (LPG) με χρήση τεχνικών μηχανικής μάθησης

Διπλωματική Εργασία

Πολίτης Χρήστος

Επιβλέπων

Γεώργιος Αραμπατζής, Επίκουρος Καθηγητής

Χανιά, Ιούλιος 2022



Πολυτεχνείο Κρήτης

Σχολή Μηχανικών Παραγωγής και Διοίκησης

Μοντελοποίηση βιομηχανικών διεργασιών επεξεργασίας υγραερίου (LPG) με χρήση τεχνικών μηχανικής μάθησης

Διπλωματική Εργασία

Πολίτης Χρήστος

Εγκρίθηκε από την εξεταστική επιτροπή:

Γεώργιος Αραμπατζής

Επίκουρος Καθηγητής

Πολυτεχνείο Κρήτης

Σχολή Μηχανικών Παραγωγής και Διοίκησης

Μιχαήλ Κονσολάκης

Αναπληρωτής Καθηγητής

Πολυτεχνείο Κρήτης

Σχολή Μηχανικών Παραγωγής και Διοίκησης

Δημήτριος Ιψάκης

Επίκουρος Καθηγητής

Πολυτεχνείο Κρήτης

Σχολή Μηχανικών Παραγωγής και Διοίκησης

Χανιά, Ιούλιος 2022

Περίληψη

Οι σύγχρονες Βιομηχανίες Διεργασιών χαρακτηρίζονται από τον μεγάλο όγκο των δεδομένων που συλλέγονται κατά την παραγωγική διαδικασία. Ταυτόχρονα, η συνεχώς αυξανόμενη υπολογιστική ισχύς, η διεύρυνση των δικτυακών υποδομών και η πρόοδος σε πεδία ανάλυσης δεδομένων όπως αυτό της Τεχνητής Νοημοσύνης, καθιστούν δυνατή την αξιοποίηση των δεδομένων, με σκοπό τη βελτιστοποίηση των συνθηκών παραγωγής ή τον έγκαιρο εντοπισμό προβλημάτων. Στην παρούσα Διπλωματική Εργασία, αναπτύσσεται ένα μοντέλο των διεργασιών επεξεργασίας υγραερίου (Liquefied Petroleum Gas – LPG) σε μια βιομηχανική μονάδα διύλισης πετρελαίου. Το μοντέλο βασίζεται σε δεδομένα (data-driven) που έχουν συλλεχθεί κατά τη λειτουργία ενός διυλιστηρίου και αφορούν σε ροές και συγκεντρώσεις των συστατικών στο μείγμα υγραερίου που υπόκειται σε επεξεργασία καθαρισμού. Για την ανάπτυξη του μοντέλου ακολουθούνται τεχνικές μηχανικής μάθησης (machine learning) και βαθιάς μάθησης (deep learning).

Πίνακας Περιεχομένων

Περίληψη.....	4
Πίνακας Περιεχομένων.....	5
Κατάλογος Σχημάτων	6
Κατάλογος Πινάκων	7
Κεφάλαιο 1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ.....	8
Κεφάλαιο 2 ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΚΗ ΕΠΙΣΚΟΠΗΣΗ	11
2.1. Θεμελιώδη Μοντέλα.....	11
2.2. Εμπειρικά μοντέλα.....	12
2.3. Υβριδικά μοντέλα.....	13
Κεφάλαιο 3 ΤΕΧΝΗΤΑ ΝΕΥΡΩΝΙΚΑ ΔΙΚΤΥΑ	15
3.1. Εισαγωγή στα Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα	15
3.2. Μοντέλο Νευρώνα	17
3.3. Αρχιτεκτονικές Δικτύου	20
Κεφάλαιο 4 ΜΕΛΕΤΗ ΠΕΡΙΠΤΩΣΗΣ.....	23
4.1. Το διυλιστήριο.....	23
4.2. Δεδομένα.....	27
Κεφάλαιο 5 ΚΑΤΑΣΚΕΥΗ ΜΟΝΤΕΛΟΥ	31
5.1. Προεπεξεργασία Δεδομένων	31
5.2. Ανάπτυξη νευρωνικού δικτύου	39
Κεφάλαιο 6 ΠΑΡΟΥΣΙΑΣΗ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ.....	44
Κεφάλαιο 7 ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ – ΠΡΟΤΑΣΕΙΣ.....	51
ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΚΕΣ ΑΝΑΦΟΡΕΣ	53

Κατάλογος Σχημάτων

Σχήμα 3.2.1 Ο νευρώνας Perceptron (Πηγή: www.google.com)	17
Σχήμα 3.3.1 Δίκτυο ενός επιπέδου (Πηγή: Χαβατζόπουλος, 2011)	20
Σχήμα 3.3.2 Δίκτυο με ένα κρυφό επίπεδο (Πηγή: Χαβατζόπουλος, 2011)	21
Σχήμα 3.3.3 Παραδείγματα αναδρομικών δικτύων (Πηγή: Χαβατζόπουλος, 2011)	22
Σχήμα 4.1.1 Απλοποιημένη απεικόνιση της διάταξης καθαρισμού του LPG	24
Σχήμα 4.1.2 Απλοποιημένη απεικόνιση αποβουτανιοποιητή (Πηγή: www.google.com)	25
Σχήμα 4.1.3 Απλοποιημένη απεικόνιση αποαιθανιοποιητή (Πηγή: www.google.com)	26
Σχήμα 5.1.1 Κατανομή δεδομένων Περιεκτικότητας C2	35
Σχήμα 5.1.2 Κατανομή δεδομένων Περιεκτικότητας C5	35
Σχήμα 5.1.3 Κατανομή δεδομένων Κατανάλωσης Ενέργειας	36
Σχήμα 5.1.4 Κατανομή δεδομένων Θερμοκρασίας Αποβουτανιοποιητή	36
Σχήμα 5.1.5 Κατανομή δεδομένων Πίεσης Αποβουτανιοποιητή	37
Σχήμα 5.1.6 Κατανομή δεδομένων Ανάρρου Αποβουτανιοποιητή	37
Σχήμα 5.1.7 Κατανομή δεδομένων Θερμοκρασίας Αποαιθανιοποιητή	38
Σχήμα 5.1.8 Κατανομή δεδομένων Πίεσης Αποαιθανιοποιητή	38
Σχήμα 5.1.9 Κατανομή δεδομένων Ανάρρου Αποαιθανιοποιητή	39
Σχήμα 5.2.1 Εξέλιξη RMSE του C2 κατά την διαδικασία της εκπαίδευσης	42
Σχήμα 5.2.2 Εξέλιξη RMSE του C5 κατά την διαδικασία της εκπαίδευσης	43
Σχήμα 5.2.3 Εξέλιξη RMSE της κατανάλωσης ενέργειας κατά την διαδικασία της εκπαίδευσης	43
Σχήμα 5.2.1 Τελική αρχιτεκτονική τεχνητού νευρωνικού δικτύου	45
Σχήμα 5.2.2 Πραγματικές μετρήσεις και προβλέψεις για την περιεκτικότητα σε C2	46
Σχήμα 5.2.3 Πραγματικές μετρήσεις και προβλέψεις για την περιεκτικότητα σε C5	46
Σχήμα 5.2.4 Πραγματικές μετρήσεις και προβλέψεις για την κατανάλωση ενέργειας	47
Σχήμα 5.2.5 Πραγματικές μετρήσεις και προβλέψεις για την περιεκτικότητα σε C2	48
Σχήμα 5.2.6 Πραγματικές μετρήσεις και προβλέψεις για C5	48
Σχήμα 5.2.7 Πραγματικές μετρήσεις και προβλέψεις για κατανάλωση ενέργειας	49

Κατάλογος Πινάκων

Πίνακας 1 Στατιστικά μεταβλητών (1ο Μέρος).....	33
Πίνακας 2 Στατιστικά μεταβλητών (2ο Μέρος).....	34
Πίνακας 3 Σφάλματα νευρωνικού δικτύου πάνω στο Train σετ.....	49
Πίνακας 4 Σφάλματα νευρωνικού δικτύου πάνω στο Validation σετ.....	50
Πίνακας 5 Σφάλματα νευρωνικού δικτύου πάνω στο Test σετ.....	50

Κεφάλαιο 1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Οι στήλες απόσταξης αποτελούν ένα αναπόσπαστο κομμάτι της βιομηχανίας επεξεργασίας υδρογονανθράκων. Η χρησιμότητά τους έγκειται στο ότι επιτρέπουν τον διαχωρισμό μειγμάτων δύο ή περισσότερων ουσιών στις εκάστοτε ουσίες. Το εν λόγω σε υγρή κατάσταση μείγμα θερμαίνεται σε κάποια προδιαγραφμένη θερμοκρασία και η ουσία με το μικρότερο σημείο βρασμού αεριοποιείται, απομακρύνεται από την στήλη και έπειτα υγροποιείται ξανά (Troudi et al., 2019). Σκοπός αυτής της διαδικασίας είναι η απομόνωση κάποιας συγκεκριμένης ουσίας για την αξιοποίησή της ή ο έλεγχος της περιεκτικότητας των διάφορων ουσιών μέσα στο μείγμα, συνήθως για την ικανοποίηση κάποιων προδιαγραφών που έχουν οριστεί από την αγορά.

Δύο παραδείγματα τέτοιων στηλών που χρησιμοποιούνται σε διυλιστήρια κατά την παραγωγική διαδικασία του υγραερίου (Liquefied Petroleum Gas – LPG) είναι οι στήλες αποαιθανιοποίησης (deethanizer columns) και οι στήλες αποβουτανιοποίησης (debutanizer columns). Οι στήλες αυτές χρησιμοποιούνται για τον καθαρισμό του υγραερίου, δηλαδή την απομάκρυνση ουσιών οι οποίες δεν πρέπει να περιέχονται στο υγραέριο ή η ποσότητά τους πρέπει να είναι περιορισμένη. Μέσω των στηλών αποαιθανιοποίησης διαχωρίζονται τα ελαφρύτερα αέρια του μεθανίου (C1) και του αιθανίου (C2) καθώς και μικρή ποσότητα του προπανίου (C3) που υπάρχουν στο μη καθαρισμένο υγραέριο. Οι στήλες αποβουτανιοποίησης χρησιμοποιούνται για την απομάκρυνση του βουτανίου (C4) και των βαρύτερων από αυτό ενώσεων (C5-C8) από το μείγμα του υγραερίου. Οι στήλες αυτές βρίσκονται συνήθως σε σειρά, δηλαδή πρώτα πραγματοποιείται η διαδικασία της αποβουτανιοποίησης και μετά η διαδικασία της αποαιθανιοποίησης. Επιτυγχάνεται έτσι η επιθυμητή συγκέντρωση των ουσιών από τις οποίες αποτελείται το υγραέριο. Στη συνέχεια το υγραέριο υπόκειται σε διαδικασία αφαίρεσης θειούχων ενώσεων και τελικά αποθηκεύεται σε δεξαμενές.

Είναι λοιπόν σημαντικό η ποιότητα του υγραερίου να βρίσκεται πάντα σε ισορροπία με τις προδιαγραφές που πρέπει να πληροί, καθώς σφάλματα στην παραγωγική διαδικασία ακόμα και μικρού μέρους του προϊόντος μπορούν να οδηγήσουν δυνητικά στην υποβάθμιση της ποιότητας πολύ μεγαλύτερης ποσότητας υγραερίου λόγω της συγκέντρωσής του σε μεγάλες δεξαμενές. Ο

συνηθισμένος τρόπος με τον οποίο αξιολογείται η ποιότητα του υγραερίου, δηλαδή οι περιεκτικότητες των επιμέρους ουσιών από τις οποίες απαρτίζεται, περιλαμβάνει την λήψη δειγμάτων μετά από κάποια χημική διεργασία και την μεταφορά τους σε εργαστήριο. Εκεί τα δείγματα υπόκεινται σε εργαστηριακούς ελέγχους ώστε να εξακριβωθεί η ποιότητα του υγραερίου και σε περίπτωση που εντοπιστεί κάποιο πρόβλημα, ρυθμίζονται οι παράμετροι της χημικής διεργασίας κατάλληλα ώστε να επανέλθει η ποιότητα του προϊόντος εντός των προδιαγραφών, γεγονός όμως που επιφέρει μεγαλύτερη κατανάλωση ενέργειας και υψηλότερο κόστος καθώς και δυνητική φθορά του εξοπλισμού.

Η διαδικασία με την οποία πραγματοποιείται ο ποιοτικός έλεγχος του LPG διαρκεί συνήθως μια ημέρα (Mohamed Ramli et al., 2014) με αποτέλεσμα να είναι αδύνατος ο έγκαιρος εντοπισμός προβλημάτων κατά την παραγωγική διαδικασία. Προκύπτει έτσι ανάγκη για πιο άμεσες και γρήγορες μεθόδους προσδιορισμού της ποιότητας του υγραερίου. Ένας τρόπος αντιμετώπισης αυτού του ζητήματος είναι η μοντελοποίηση των χημικών διεργασιών στις οποίες υπόκειται το υγραέριο. Κατασκευάζοντας ένα μοντέλο που προσομοιώνει τις χημικές διεργασίες, είναι δυνατή η πραγματοποίηση προβλέψεων σχετικά με την ποιότητα του υγραερίου και βάση αυτής, μπορεί να γίνει ο κατάλληλος έλεγχος των παραμέτρων της διαδικασίας σε πραγματικό χρόνο σύμφωνα με το μοντέλο. Υπάρχουν διαφορετικές προσεγγίσεις όσον αφορά στον τρόπο με τον οποίο κατασκευάζονται τα εν λόγω μοντέλα των διεργασιών. Στα πλαίσια της παρούσας διπλωματικής εργασίας αναπτύχθηκε ένα Τεχνητό Νευρωνικό Δίκτυο (ΤΝΔ) (Artificial Neural Network) το οποίο μοντελοποιεί ταυτόχρονα τις χημικές διεργασίες της αποαιθανιοποίησης και της αποβουτανιοποίησης. Τα δεδομένα τα οποία χρησιμοποιήθηκαν για την εκπαίδευση και την αξιολόγηση του νευρωνικού δικτύου προήλθαν από διάφορους αισθητήρες πραγματικού χρόνου (on-line sensors) που βρίσκονται εγκατεστημένοι σε ένα διυλιστήριο.

Σκοπός του τεχνητού νευρωνικού δικτύου είναι η πρόβλεψη των περιεκτικοτήτων σε C2 και C5 του υγραερίου, αφού έχει περάσει και από τις δύο στήλες απόσταξης καθώς και η πρόβλεψη της ενεργειακής κατανάλωσης των στηλών. Οι προβλέψεις αυτές προκύπτουν βάση μεταβλητών των διεργασιών, συγκεκριμένα της πίεσης, της θερμοκρασίας καθώς και της ροής του μείγματος από το δοχείο επαναρροής, οι οποίες είναι μεταβλητές που είναι δυνατόν να ελεγχθούν από το προσωπικό του διυλιστηρίου. Δίνεται, λοιπόν, η δυνατότητα να χρησιμοποιηθεί το μοντέλο για να

προσομοιωθεί το πώς μπορούν να επιδράσουν στο τελικό προϊόν οι μεταβολές στις ελέγξιμες μεταβλητές (manipulated variables) των στηλών απόσταξης.

Κεφάλαιο 2 ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΚΗ ΕΠΙΣΚΟΠΗΣΗ

Σε αυτό το κεφάλαιο πραγματοποιείται μια σύντομη αναφορά στις διαφορετικές προσεγγίσεις που έχουν υιοθετηθεί όσον αφορά στη μοντελοποίηση χημικών διεργασιών που πραγματοποιούνται σε στήλες απόσταξης. Τα μοντέλα που εντοπίζονται στην βιβλιογραφία μπορούν να χωριστούν σε τρεις βασικές κατηγορίες: τα θεμελιώδη μοντέλα που εξάγονται από ισορροπίες μάζας, ενέργειας και ορμής που περιγράφουν την διεργασία, εμπειρικά μοντέλα που εξάγονται από δεδομένα για τις εισόδους και τις εξόδους της διεργασίας και υβριδικά μοντέλα που αποτελούν συνδυασμό των θεμελιωδών και των εμπειρικών μοντέλων (Abdullah et al., 2007).

2.1. Θεμελιώδη Μοντέλα

Τα θεμελιώδη μοντέλα έχουν ως στόχο τη μαθηματική περιγραφή ενός συστήματος. Αυτό γίνεται χρησιμοποιώντας προϋπάρχουσες γνώσεις για τις φυσικές και χημικές διεργασίες που παρατηρούνται μέσα στο εν λόγω σύστημα. Τα μοντέλα αυτά προκύπτουν από την εφαρμογή ισοζυγίων μάζας, ενέργειας και ορμής. Για την κατασκευή των θεμελιωδών μοντέλων χρησιμοποιούνται μη-γραμμικές διαφορικές εξισώσεις, το πλήθος των οποίων είναι της τάξης των 10^2 - 10^3 , καθώς και αντίστοιχος αριθμός αλγεβρικών σχέσεων (Michelsen and Foss, 1996). Οι παράμετροι των εξισώσεων των μαθηματικών συστημάτων που αποτελούν αυτά τα μοντέλα μπορούν να βρεθούν μέσω εργαστηριακών πειραμάτων, καθώς και από δεδομένα που προέρχονται από την κανονική λειτουργία του υπό μελέτη συστήματος που πραγματοποιεί την χημική διεργασία.

Είναι σημαντικό να αναφερθεί πως, εφόσον οι υποθέσεις που έχουν γίνει για χάριν απλοποίησης κατά την περιγραφή του συστήματος παραμένουν έγκυρες, τότε υπάρχει δυνατότητα χρήσης των θεμελιωδών μοντέλων και σε συνθήκες λειτουργίας οι οποίες δεν αντιπροσωπεύονται μέσα από τα δεδομένα που χρησιμοποιήθηκαν για την κατασκευή και ανάπτυξη του μοντέλου (Henson, 1998). Τα μοντέλα που είναι βασισμένα σε θεμελιώδεις σχέσεις μπορούν να

χρησιμοποιηθούν ευρέως, όταν πρόκειται για την περιγραφή διεργασίας ίδιου τύπου. Επίσης, αυτά τα μοντέλα πετυχαίνουν συνήθως μεγαλύτερη ακρίβεια και συμβάλουν στην καλύτερη κατανόηση της διεργασίας που περιγράφουν. Ένα αρνητικό όμως είναι πως τα θεμελιώδη μοντέλα είναι πολύ σύνθετα λόγω του πλήθους των εξισώσεων που χρησιμοποιούν ώστε να αξιοποιηθούν για τον σχεδιασμό ελεγκτών, ενώ ταυτόχρονα τα θεμελιώδη μοντέλα βασίζονται σε υποθέσεις, οι οποίες μπορεί να είναι εσφαλμένες (Pearson, 1995).

Η περιγραφή στηλών απόσταξης με χρήση θεμελιωδών μοντέλων έχει αποτελέσει κίνητρο για αρκετές μελέτες. Η προσέγγιση του θεμελιώδους δυναμικού μοντέλου (fundamental dynamic model) έχει χρησιμοποιηθεί από τους Can et al. (2002) πάνω σε στήλες απόσταξης διαχωρισμού μεθανόλης/νερού. Το μεικτό ακέραιο δυναμικό μοντέλο απόσταξης (mixed integer dynamic distillation model) αναπτύχθηκε από τους Bansal et al. (2000) για τον διαχωρισμό τολουολίου (toluene) και βενζολίου (benzene). Το μοντέλο τους περιλαμβάνει διαφορικές και αλγεβρικές εξισώσεις για τους δίσκους (trays), τον αναθερμαντή, τον συμπυκνωτή και δοχείο επαναροής (reflux drum) της στήλης απόσταξης. Οι Diehl et al. (2003) εφάρμοσαν το διαφορικό αλγεβρικό θεμελιώδες μοντέλο (differential algebraic first principles model) για την περιγραφή του διαχωρισμού μείγματος μεθανόλης και n-προπανόλης (n-propanol).

2.2. Εμπειρικά μοντέλα

Τα εμπειρικά μοντέλα είναι δυνατόν να παραχθούν χωρίς να απαιτείται κάποια πρότερη γνώση για τις φυσικές και χημικές σχέσεις που διέπουν ένα σύστημα. Οι πληροφορίες στις οποίες βασίζονται τα εμπειρικά μοντέλα, γνωστά και ως «μαύρα κουτιά», προέρχονται από δεδομένα από τις εισόδους και τις εξόδους του συστήματος, τα οποία συλλέγονται κατά την κανονική λειτουργία του συστήματος. Μέσω αυτών των μοντέλων περιγράφονται οι λειτουργικές σχέσεις μεταξύ των εισόδων και των εξόδων του εν λόγω συστήματος. Βάση αυτού του γεγονότος, δεν απαιτείται η αναλυτική γνώση και κατανόηση της διεργασίας. Ως εκ τούτου, η πολυπλοκότητα του μοντέλου είναι δυνατό να αποφευχθεί και έτσι να μειωθεί το υπολογιστικό κόστος του ελέγχου της διεργασίας.

Ένα εμπειρικό μοντέλο μπορεί να αναπαραστήσει μια μη-γραμμική σχέση με ακρίβεια ακόμα και αν εμφανίζονται διαταραχές, εφόσον γίνεται χρήση του μοντέλου εντός του πεδίου ορισμού των δεδομένων που χρησιμοποιήθηκαν για την κατασκευή και ανάπτυξη του (Eikens et al., 2001). Τα αποτελέσματα ενός εμπειρικού μοντέλου είναι πολύ ευαίσθητα στην ακρίβεια των μετρήσεων από τις οποίες προήλθαν τα δεδομένα καθώς και στις ομοιότητες μεταξύ της κατάστασης που αναλύεται και της κατάστασης υπό την οποία πραγματοποιήθηκαν οι μετρήσεις.

Ο Zhu (1999) μελέτησε την περιγραφή των διεργασιών σε στήλη απόσταξης χρησιμοποιώντας το μοντέλο Wiener. Οι Norquay et al (1999) χρησιμοποίησαν το μοντέλο Wiener για την μελέτη στήλης απόσταξης υψηλής καθαρότητας. Το απλό μοντέλο Hammerstein για στήλες απόσταξης αναπτύχθηκε από τους Nugroho et al. (2004). Εκτός αυτών των μοντέλων, τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα έχουν χρησιμοποιηθεί σε πολλές περιπτώσεις για την περιγραφή και τη μελέτη στηλών απόσταξης. Η πλειοψηφία αυτών των μοντέλων χρησιμοποιούν ένα πολυεπίπεδο νευρωνικό δίκτυο πρόσθιας τροφοδότησης (multi-layer feedforward neural network) για την ανάπτυξη του μη-γραμμικού μοντέλου. Οι Brizuela et al. (1996) ανέπτυξαν ένα τέτοιο νευρωνικό δίκτυο για την μοντελοποίηση στήλης απόσταξης. Οι επιδόσεις αυτού του μοντέλου στον προγνωστικό έλεγχο της διεργασίας συγκρίθηκαν με έναν PI ελεγκτή. Ο Yu (2003) χρησιμοποίησε ένα νευρωνικό δίκτυο για την προσομοίωση στήλης απόσταξης πολλαπλών ουσιών. Ο ίδιος παρατήρησε πως ο βασισμένος στο νευρωνικό δίκτυο ελεγκτής έδινε καλύτερα αποτελέσματα σε σχέση με έναν ονομαστικό ελεγκτή (nominal controller).

2.3. Υβριδικά μοντέλα

Τα υβριδικά μοντέλα αναπτύσσονται συνδυάζοντας τους δύο παραπάνω τύπους μοντέλων, τα θεμελιώδη και τα εμπειρικά. Υπάρχει έτσι η δυνατότητα να αξιοποιηθεί όποια πρότερη γνώση σχετικά με τη διεργασία από το θεμελιώδες μοντέλο, ενώ για τα μέρη της διεργασίας που είναι δύσκολη η μαθηματική

περιγραφή τους γίνεται να χρησιμοποιηθούν μοντέλα που βασίζονται στις πληροφορίες που αντλούνται από τις εισόδους και τις εξόδους της. Η συνηθισμένη μέθοδος ανάπτυξης ενός υβριδικού μοντέλου είναι να γίνει χρήση εμπειρικών μοντέλων για να προσεγγιστεί η άγνωστη συνάρτηση του θεμελιώδους μοντέλου ή να χρησιμοποιηθεί το θεμελιώδες μοντέλο για να περιγραφούν τα κύρια χαρακτηριστικά της διεργασίας και μετά να χρησιμοποιηθεί ένα μη-γραμμικό εμπειρικό μοντέλο για να περιγραφεί η διαφορά μεταξύ μοντέλου και εργοστασίου (Henson, 1998).

Οι Sun και Hahn (2005) ανέπτυξαν ένα δυναμικό μοντέλο χρησιμοποιώντας την τεχνική της αναγωγής σταθερής διαφορικής-αλγεβρικής εξίσωσης (reduction of stable differential-algebraic equation technique) για διαχωρισμό κυκλοεξανίου (cyclohexane) και επτανίου (heptane). Μέσω αυτής της μεθόδου μειώθηκε η τάξη των διαφορικών εξισώσεων καθώς και ο αριθμός και η πολυπλοκότητα των αλγεβρικών εξισώσεων. Το συγκεκριμένο μοντέλο απλοποιείται περαιτέρω αντικαθιστώντας τις αλγεβρικές εξισώσεις με νευρωνικά δίκτυα. Υβριδικά μοντέλα έχουν χρησιμοποιηθεί σε μεγάλο βαθμό σε διάφορες χημικές διεργασίες όπως ο πολυμερισμός (Cubillos et al., 2001; Chang et al., 2007), η απόσταξη παρτίδας (batch distillation) (van Lith et al., 2003) και η αντιδραστική απόσταξη (reactive distillation) (Chen et al., 2004). Τα υβριδικά μοντέλα που συνδυάζουν θεμελιώδη και εμπειρικά μοντέλα αποτελούν την πιο πολλά υποσχόμενη επιλογή για μελλοντική εφαρμογή και χρήση όσον αφορά την μοντελοποίηση και προσομοίωση χημικών διεργασιών και τον έλεγχό τους.

Κεφάλαιο 3 ΤΕΧΝΗΤΑ ΝΕΥΡΩΝΙΚΑ ΔΙΚΤΥΑ

3.1. Εισαγωγή στα Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα

Η ανάπτυξη και η μελέτη στον τομέα των τεχνητών νευρωνικών δικτύων βασίστηκε στη δομή και στις λειτουργίες του ανθρώπινου εγκεφάλου. Ο τρόπος με τον οποίο εκτελεί υπολογισμούς ο εγκέφαλος διαφέρει σημαντικά από τον τρόπο ενός υπολογιστή. Ο εγκέφαλος είναι ένα εξαιρετικά πολύπλοκο, μη-γραμμικό σύστημα παράλληλης επεξεργασίας πληροφοριών. Οι μικρότερες υπολογιστικές μονάδες του εγκεφάλου είναι οι νευρώνες, οι οποίοι οργανώνονται με συγκεκριμένο τρόπο, ο οποίος εξαρτάται από τον υπολογισμό ή την εργασία που πραγματοποιούν, όπως για παράδειγμα ο έλεγχος μιας κίνησης. Αυτοί οι υπολογισμοί πραγματοποιούνται με ταχύτητα πολλαπλάσια αυτής του γρηγορότερου σύγχρονου ψηφιακού υπολογιστή (Χαβατζόπουλος, 2011). Από την στιγμή της γέννησης ενός ανθρώπου, ο εγκέφαλος έχει ήδη σημαντικά ανεπτυγμένη δομή και έχει την ικανότητα να κατασκευάζει νέους κανόνες συμπεριφοράς μέσω της εμπειρίας. Το ανθρώπινο νευρικό σύστημα έχει τη δυνατότητα να προσαρμόζεται ανάλογα με τα εξωτερικά ερεθίσματα που δέχεται από το περιβάλλον.

Ανάλογη σημασία και ρόλο με τους νευρώνες του εγκεφάλου έχουν και οι τεχνητοί νευρώνες για τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα. Στη γενική του μορφή ένα τεχνητό νευρωνικό δίκτυο είναι ένα σύστημα που έχει σχεδιαστεί ώστε να προσομοιώνει τον τρόπο με τον οποίο εκτελεί μια συγκεκριμένη λειτουργία ή εργασία ο ανθρώπινος εγκέφαλος. Ένα νευρωνικό δίκτυο είναι ένας μεγάλου μεγέθους παράλληλος επεξεργαστής με κατανομημένη αρχιτεκτονική, οποίος αποτελείται από πολλές απλές υπολογιστικές μονάδες και έχει εκ σχεδιασμού την δυνατότητα να αποθηκεύει εμπειρική γνώση και να την καθιστά διαθέσιμη για χρήση. Οι ομοιότητες ενός τεχνητού νευρωνικού δικτύου και του ανθρώπινου εγκεφάλου συγκεντρώνονται σε δύο βασικά σημεία. Πρώτον, στο γεγονός ότι το δίκτυο λαμβάνει τη γνώση από το περιβάλλον του, μέσω μιας διαδικασίας εκπαίδευσης και δεύτερον, στο γεγονός ότι η ισχύς των συνδέσεων μεταξύ των νευρώνων, το συνολικό βάρος, χρησιμοποιείται ως μέσο αποθήκευσης της γνώσης που αποκτιέται.

Η διαδικασία μέσω της οποίας επιτυγχάνεται η μάθηση από το τεχνητό νευρωνικό δίκτυο καλείται αλγόριθμος μάθησης και η λειτουργία αυτού του αλγορίθμου είναι να μεταβάλλει καταλλήλως τα συναπτικά βάρη μεταξύ των νευρώνων του δικτύου. Η τροποποίηση των συναπτικών βαρών είναι η πιο συχνή μέθοδος σχεδιασμού και ανάπτυξης τεχνητών νευρωνικών δικτύων. Υπάρχει όμως και η μέθοδος κατά την οποία τον νευρωνικό δίκτυο δύναται να τροποποιήσει την τοπολογία του, μηδενίζοντας ουσιαστικά τα συναπτικά βάρη συνδέσεων που κρίνονται αχρείαστες. Αυτή η μέθοδος έχει τη βάση της στον τρόπο με τον οποίο λειτουργεί ο ανθρώπινος εγκέφαλος, όπου, για διάφορους λόγους κατά τη διάρκεια της ζωής ενός ανθρώπου, ορισμένα κύτταρα του εγκεφάλου καταστρέφονται και στη θέση τους αναπτύσσονται νέες συναπτικές συνδέσεις για να διασφαλιστεί η ομαλή λειτουργία του εγκεφάλου.

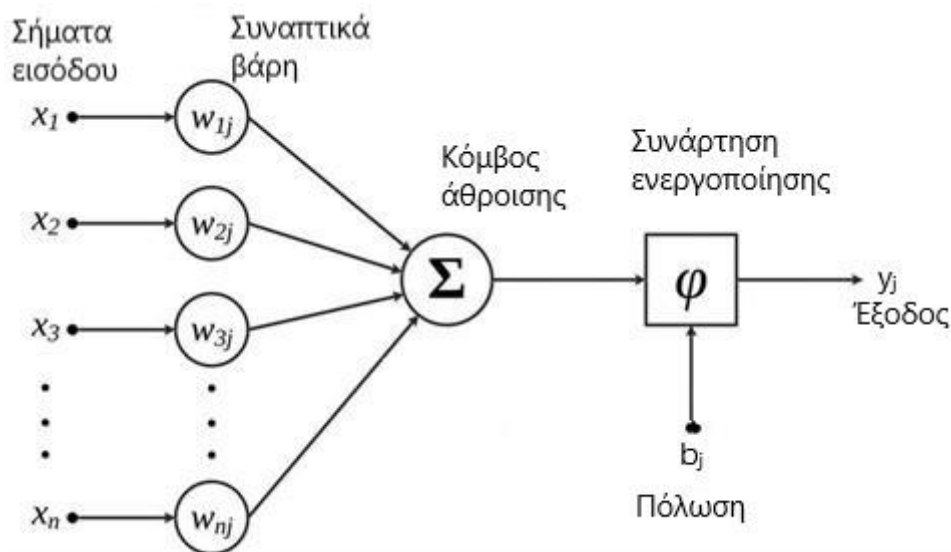
Η υπολογιστική ισχύς των νευρωνικών δικτύων είναι αποτέλεσμα της παράλληλης, κατανεμημένης σε επίπεδα δομής τους, καθώς και της ικανότητά τους να εκπαιδεύονται και να γενικεύουν. Αυτές οι δύο ιδιότητες των νευρωνικών δικτύων είναι ο λόγος για τον οποίον μπορούν να βρίσκουν καλές προσεγγιστικές λύσεις σε πολύπλοκα και μεγάλης κλίμακας προβλήματα, τα οποία είτε δεν επιδέχονται λύσης, είτε είναι πολύ δύσκολο να λυθούν μέσω συμβατικών μεθόδων. Τα νευρωνικά δίκτυα διαθέτουν επιπλέον την ιδιότητα της μη-γραμμικότητας, καθώς ένας τεχνητός νευρώνας δύναται να είναι είτε γραμμικός, είτε μη-γραμμικός. Ένα δίκτυο το οποίο αποτελείται από μη-γραμμικούς νευρώνες συνδεδεμένους μεταξύ τους, είναι φύσει μη-γραμμικό και η μη-γραμμικότητα αυτή είναι κατανεμημένη σε όλη την έκταση του δικτύου, γεγονός που είναι σημαντικό σε περιπτώσεις που τα προβλήματα που επιλύονται από το νευρωνικό δίκτυο είναι μη γραμμικά.

Η μεταβολή και η ρύθμιση των συναπτικών βαρών ενός τεχνητού νευρωνικού δικτύου επιτυγχάνεται αξιοποιώντας ένα σύνολο παραδειγμάτων εκπαίδευσης τα οποία τροφοδοτούνται στο δίκτυο. Αυτή η διαδικασία αποκαλείται επιβλεπόμενη μάθηση (supervised learning). Κάθε παράδειγμα που τροφοδοτείται στο δίκτυο αποτελείται από το σήμα και την επιθυμητή απόκριση. Στο δίκτυο παρουσιάζεται ένα τυχαία επιλεγμένο παράδειγμα από το σύνολο και τα συναπτικά βάρη του νευρωνικού δικτύου μεταβάλλονται ώστε να ελαχιστοποιηθεί η διαφορά μεταξύ της επιθυμητής απόκρισης και της πραγματικής απόκρισης που παράγεται από το

σήμα εισόδου, βάσει ενός στατιστικού κριτηρίου, παραδείγματος χάριν το μέσο απόλυτο σφάλμα. Η εκπαίδευση του δικτύου επαναλαμβάνεται για πολλά παραδείγματα του συνόλου εκπαίδευσης, μέχρι το δίκτυο να φτάσει σε μια κατάσταση που δεν υπάρχουν περαιτέρω σημαντικές μεταβολές στα συναπτικά βάρη που να μπορούν να πραγματοποιηθούν.

3.2. Μοντέλο Νευρώνα

Ο νευρώνας αποτελεί τη θεμελιώδη μονάδα επεξεργασίας ενός νευρωνικού δικτύου. Στο παρακάτω σχήμα παρουσιάζεται το μοντέλο ενός νευρώνα που ονομάζεται μοντέλο νευρώνα Perceptron. Υπάρχουν τρία βασικά δομικά στοιχεία σε αυτό το μοντέλο.



Σχήμα 3.2.1 Ο νευρώνας Perceptron (Πηγή: www.google.com)

Πρώτο βασικό στοιχείο του Perceptron είναι το σύνολο των συνάψεων, τα σήματα εισόδου. Κάθε μια από τις συνάψεις χαρακτηρίζεται από το δικό της συναπτικό βάρος. Συγκεκριμένα, ένα σήμα x_i στην είσοδο της σύναψης i που συνδέεται με έναν

νευρώνα j πολλαπλασιάζεται με το συναπτικό βάρος w_{ij} . Ο πρώτος δείκτης του w_{ij} αναφέρεται στο άκρο εισόδου της σύναψης και ο δεύτερος δείκτης αναφέρεται στον εν λόγω νευρώνα. Τα συναπτικά βάρη δύνανται να λάβουν και αρνητικές τιμές. Το δεύτερο βασικό στοιχείο του μοντέλου είναι ο κόμβος άθροισης, στον οποίο αθροίζονται τα σήματα εισόδου, πολλαπλασιασμένα από τα αντίστοιχα συναπτικά βάρη του νευρώνα. Τελευταίο στοιχείο του συστήματος είναι η συνάρτηση ενεργοποίησης, η οποία είναι υπεύθυνη για τον περιορισμό του πλάτους του σήματος εξόδου ενός νευρώνα. Το μοντέλο περιλαμβάνει ακόμα μια εξωτερική πόλωση, b_j . Η πόλωση αυτή χρησιμοποιείται για την αύξηση ή τη μείωση του σήματος που εισέρχεται στη συνάρτηση ενεργοποίησης από τις συνάψεις.

Η συνάρτηση ενεργοποίησης $\varphi(u)$, καθορίζει την έξοδο ενός νευρώνα βάσει του τοπικού πεδίου u . Παραδοσιακά, υπάρχουν τρεις βασικοί τύποι συναρτήσεων ενεργοποίησης:

Αρχικά, υπάρχει η συνάρτηση κατωφλίου. Ο τύπος της είναι

$$\varphi(u) = \begin{cases} 1, & \text{εάν } u \geq 0 \\ 0, & \text{εάν } u < 0 \end{cases}$$

Συχνά στο πεδίο της μηχανικής, η συνάρτηση κατωφλίου που έχει αυτή την μορφή αναφέρεται ως συνάρτηση Heaviside. Αντιστοίχως, η έξοδος ενός νευρώνα k που χρησιμοποιεί μια συνάρτηση κατωφλίου τέτοιου είδους ορίζεται ως

$$y_k = \begin{cases} 1, & \text{εάν } u_k \geq 0 \\ 0, & \text{εάν } u_k < 0 \end{cases}$$

όπου u_k το τοπικό πεδίο του νευρώνα, δηλαδή

$$u_k = \sum_{i=1}^m w_{ik} x_i + b_k$$

Το παραπάνω μοντέλο είναι γνωστό ως μοντέλο McCulloch – Pitts.

Άλλη μια από τις βασικές συναρτήσεις ενεργοποίησης είναι η σιγμοειδής συνάρτηση. Η συνάρτηση αυτή παίρνει το όνομά της από την γραφική της παράσταση η οποία έχει σχήμα που μοιάζει στο γράμμα «S». Αυτή η συνάρτηση είναι αυστηρά αύξουσα και παρουσιάζει καλές ιδιότητες όσον αφορά τη περιγραφή γραμμικών αλλά και μη-γραμμικών συμπεριφορών. Ένα παράδειγμα σιγμοειδούς συνάρτησης αποτελεί η λογιστική συνάρτηση, που ορίζεται ως

$$\varphi(u) = \frac{1}{1 + e^{-au}}$$

όπου a η παράμετρος κλίσης της σιγμοειδούς. Καθώς η παράμετρος κλίσης τείνει στο άπειρο, η σιγμοειδής συνάρτηση παίρνει τη μορφή μιας συνάρτησης κατωφλίου. Σε αντίθεση με τις συναρτήσεις κατωφλίου που παίρνουν τιμές 0 και 1, η σιγμοειδής συνάρτηση μπορεί να πάρει όλες τις τιμές στο πεδίο τιμών $[0, 1]$.

Οι παραπάνω συναρτήσεις ενεργοποίησης έχουν πεδία τιμών τα οποία παίρνουν τιμές από 0 έως και το 1. Υπάρχουν όμως περιπτώσεις που είναι χρήσιμο το πεδίο τιμών να ορίζεται από το -1 έως το +1. Τότε, η συνάρτηση ενεργοποίησης είναι μια περιττή συνάρτηση του τοπικού πεδίου και ορίζεται ως

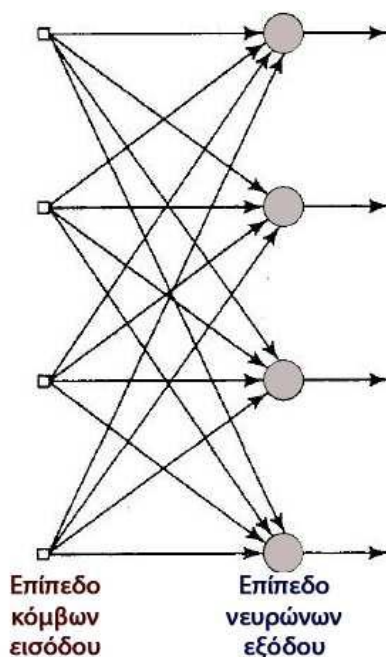
$$\varphi(u) = \begin{cases} 1, & \text{εάν } u > 0 \\ 0, & \text{εάν } u = 0 \\ -1, & \text{εάν } u < 0 \end{cases}$$

η οποία είναι γνωστή ως συνάρτηση προσήμου.

3.3. Αρχιτεκτονικές Δικτύου

Ο τρόπος δόμησης του τεχνητού νευρωνικού δικτύου είναι άρρηκτα συνδεδεμένος με τον αλγόριθμο μάθησης που χρησιμοποιείται κατά την διαδικασία εκπαίδευσής του. Υπάρχουν τρεις κύριες κατηγορίες αρχιτεκτονικής νευρωνικών δικτύων.

Η πρώτη κατηγορία αφορά την αρχιτεκτονική δικτύων «ενός επιπέδου εμπρόσθιας τροφοδότησης» (feedforward). Στα νευρωνικά δίκτυα, οι νευρώνες οργανώνονται σε επίπεδα. Στην απλούστερη μορφή ενός δικτύου, υπάρχουν μόνο ένα επίπεδο εισόδου και ένα επίπεδο εξόδου. Η ροή του σήματος είναι από την είσοδο στην έξοδο και για αυτόν τον λόγο το δίκτυο καλείται εμπρόσθιας τροφοδότησης.

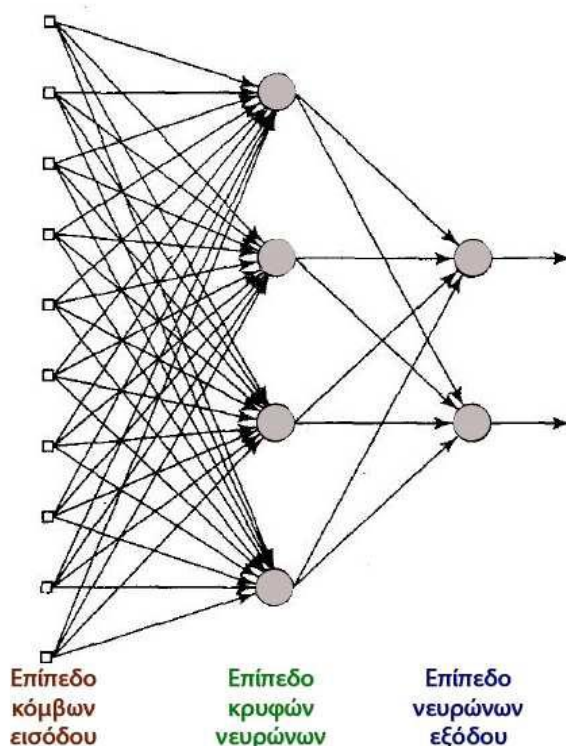


Σχήμα 3.3.1 Δίκτυο ενός επιπέδου (Πηγή: Χαβατζόπουλος, 2011)

Ο χαρακτηρισμός «ενός επιπέδου» αναφέρεται στο επίπεδο εξόδου. Το επίπεδο εισόδου δεν λαμβάνεται υπόψιν καθώς δεν πραγματοποιείται κανένας υπολογισμός σε αυτό.

Η δεύτερη κατηγορία νευρωνικών δικτύων εμπρόσθιας τροφοδότησης διαφοροποιείται ως προς την προηγούμενη λόγω της παρουσίας ενός ή περισσότερων κρυφών επιπέδων. Οι υπολογιστικοί κόμβοι σε αυτά τα επίπεδα καλούνται κρυφοί νευρώνες. Ο όρος «κρυφός» αναφέρεται στο ότι αυτό το τμήμα του τεχνητού νευρωνικού δικτύου δεν είναι άμεσα ορατό ούτε από την είσοδο του δικτύου, ούτε από την έξοδό του. Η λειτουργία των κρυφών επιπέδων είναι να παρεμβάινουν μεταξύ του σήματος που προέρχεται από το περιβάλλον και της εξόδου του νευρωνικού δικτύου, τροποποιώντας το σήμα περαιτέρω ώστε να παράγονται καλύτερα αποτελέσματα στην έξοδο του δικτύου.

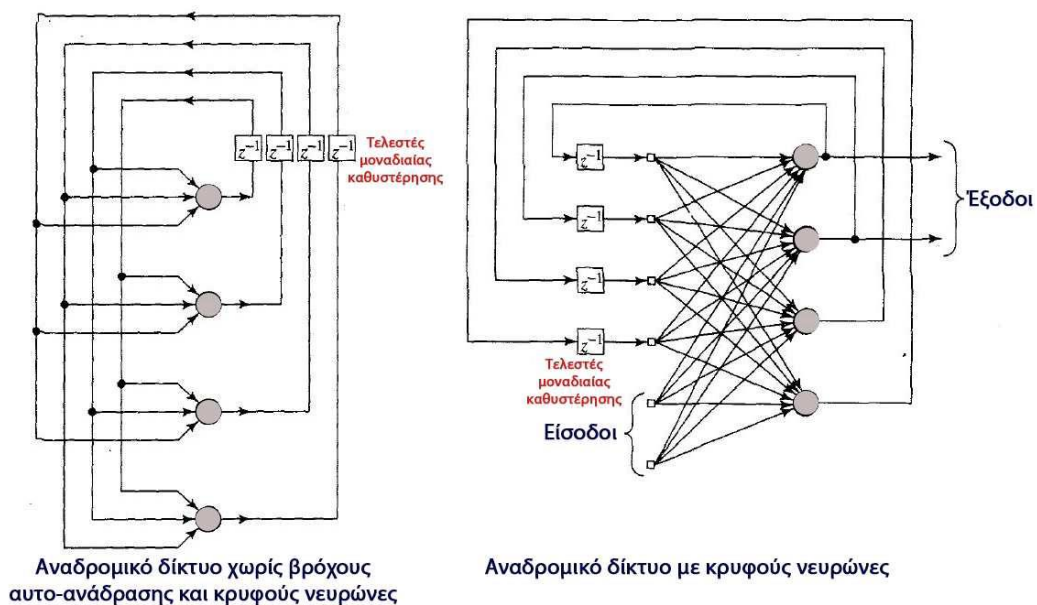
Τυπικά, οι νευρώνες σε κάθε επίπεδο του δικτύου έχουν ως εισόδους τα σήματα εξόδου μόνο του προηγούμενου επιπέδου. Το σύνολο των σημάτων εξόδου των νευρώνων του επιπέδου εξόδου του δικτύου συνιστά την συνολική απόκριση του δικτύου στο σήμα ενεργοποίησης που παρέχεται από τους νευρώνες στο επίπεδο εισόδου.



Σχήμα 3.3.2 Δίκτυο με ένα κρυφό επίπεδο (Πηγή: Χαβατζόπουλος, 2011)

Το νευρωνικό δίκτυο καλείται πλήρως συνδεδεμένο όταν κάθε νευρώνας σε ένα επίπεδο συνδέεται με κάθε άλλο κόμβο του επόμενου επιπέδου. Σε περίπτωση που ορισμένες από αυτές τις συνδέσεις απουσιάζουν από το δίκτυο, τότε αυτό καλείται μερικώς συνδεδεμένο.

Τελευταία βασική κατηγορία αρχιτεκτονικής είναι τα αναδρομικά δίκτυα. Ο τρόπος με τον οποίο διαφέρουν από τα δίκτυα εμπρόσθιας τροφοδότησης είναι το ότι διαθέτουν τουλάχιστον ένα βρόγχο ανάδρασης. Εκτός από βρόγχους ανάδρασης, αυτά τα δίκτυα μπορούν να περιέχουν και βρόγχους αυτο-ανάδρασης. Σε αυτήν την περίπτωση η έξοδος ενός νευρώνα ανατροφοδοτείται στην είσοδο του ίδιου του νευρώνα.



Σχήμα 3.3.3 Παραδείγματα αναδρομικών δικτύων (Πηγή: Χαβατζόπουλος, 2011)

Οι βρόγχοι ανάδρασης καθιστούν απαραίτητη τη χρήση συγκεκριμένων κλάδων στο δίκτυο, οι οποίοι αποτελούνται από στοιχεία μοναδιαίας χρονικής καθυστέρησης (συμβολίζονται ως z^{-1}). Τα στοιχεία αυτά έχουν ως αποτέλεσμα μη-γραμμική δυναμική συμπεριφορά, σε περίπτωση που το νευρωνικό δίκτυο περιέχει μη-γραμμικές μονάδες.

Κεφάλαιο 4 ΜΕΛΕΤΗ ΠΕΡΙΠΤΩΣΗΣ

4.1. Το διυλιστήριο

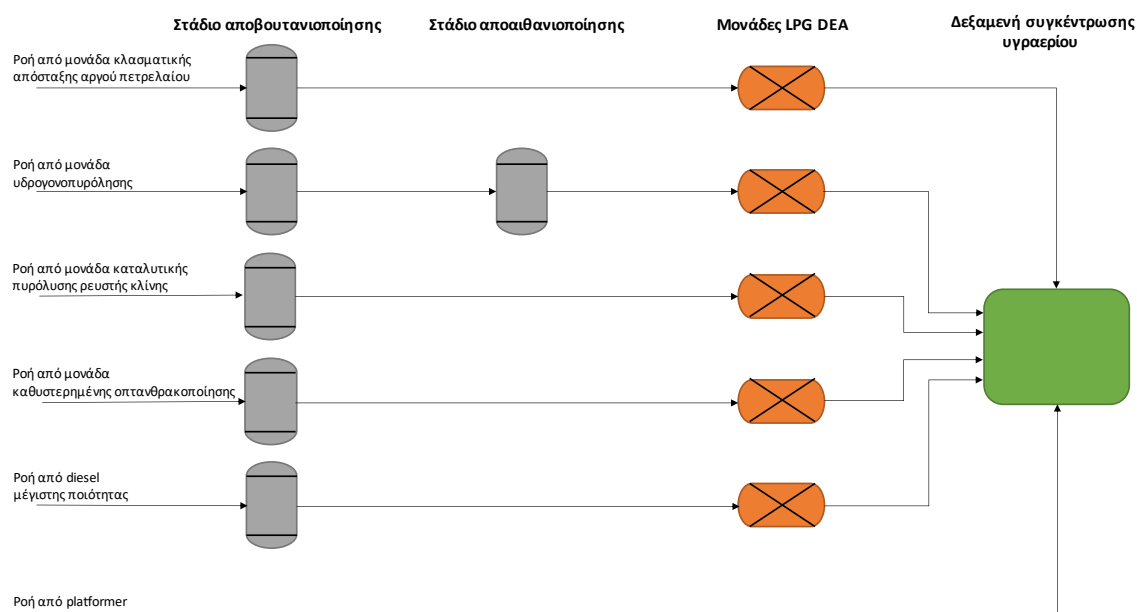
Τα διυλιστήρια είναι βιομηχανικές μονάδες που επεξεργάζονται το αργό πετρέλαιο με σκοπό την παραγωγή άλλων προϊόντων όπως η νάφθα, η βενζίνη, η ασφαλτος και το υγραέριο. Η πρώτη επεξεργασία στην οποία υποβάλλεται το αργό πετρέλαιο είναι η κλασματική απόσταξη. Η κλασματική απόσταξη του πετρελαίου πραγματοποιείται σε στήλες απόσταξης, η χρήση των οποίων επιτρέπει τον διαχωρισμό των διαφόρων προϊόντων του πετρελαίου βάση του σημείου βρασμού τους. Τα προϊόντα της κλασματικής απόσταξης ως επί το πλείστον θα υποστούν περαιτέρω επεξεργασία πριν να είναι δυνατή η πώληση και χρήση τους.

Το υγραέριο, ή αλλιώς LPG, όντας παράγωγο του πετρελαίου, αποτελεί ένα μείγμα υδρογονανθράκων. Υπάρχει ποικιλία όσον αφορά στη σύσταση του υγραερίου, με μείγματα τα οποία αποτελούνται κυρίως από προπάνιο, μείγματα που αποτελούνται κυρίως από βουτάνιο και πιο συχνά, μείγματα που περιέχουν και προπάνιο και βουτάνιο. Επίσης παρατηρείται διαφοροποίηση στη σύσταση του υγραερίου ανάλογα με την εποχή του χρόνου που παράγεται. Τον χειμώνα τα μείγματα του υγραερίου περιέχουν περισσότερο προπάνιο, ενώ το καλοκαίρι περιέχουν περισσότερο βουτάνιο. Εκτός αυτών των ουσιών, συνήθως στο μείγμα του υγραερίου υπάρχουν και μικρές ποσότητες προπυλενίου, βουτυλενίου, καθώς και άλλων υδρογονανθράκων.

Το διυλιστήριο από το οποίο αντλούνται τα δεδομένα για την ανάπτυξη του τεχνητού νευρωνικού δικτύου στην παρούσα εργασία έχει ετήσια δυναμικότητα επεξεργασίας αργού πετρελαίου η οποία υπερβαίνει τους 11 εκατομμύρια τόνους. Κάποια από τα προϊόντα που παράγονται στο εν λόγω διυλιστήριο είναι το υγραέριο, καύσιμα όπως η αμόλυβδη βενζίνη, η κηροζίνη, το ντίζελ, το πετρέλαιο θέρμανσης, λιπαντικά έλαια και παραφίνες, καθώς και ασφαλτος διαφόρων προδιαγραφών. Το διυλιστήριο αυτό αποτελείται από πολλές μονάδες, οι οποίες αναλαμβάνουν διαφορετικό ρόλο η κάθε μία στην παραγωγική διαδικασία. Δηλαδή, άλλη μονάδα είναι υπεύθυνη για την παραγωγή του υγραερίου, άλλη για την

παραγωγή της βενζίνης, κ.ο.κ.. Η παραγωγή του υγραερίου σε αυτό το διυλιστήριο πραγματοποιείται με έξι διαφορετικούς τρόπους:

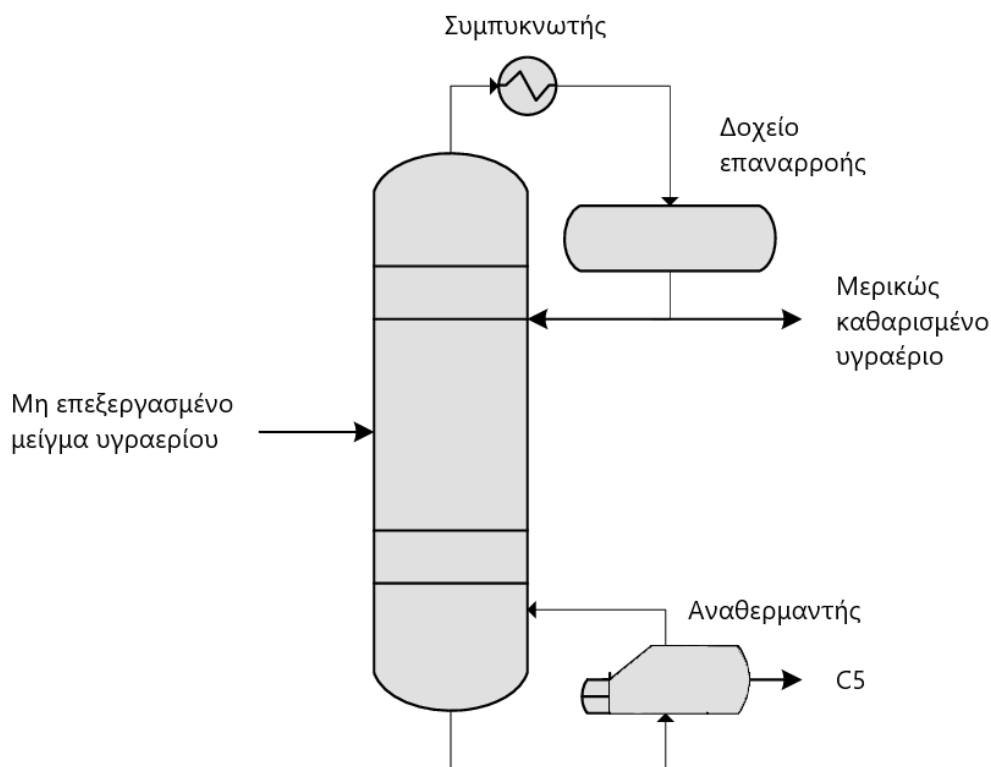
1. Μονάδα κλασματικής απόσταξης αργού πετρελαίου (Atmospheric or Crude Distillation Unit)
2. Μονάδα υδρογονοπυρόλυσης (Hydrocracker Unit)
3. Μονάδα καταλυτικής πυρόλυσης ρευστής κλίνης (Fluid Catalytic Cracking Unit)
4. Μονάδα καθυστερημένης σπτανθρακοποίησης (Delayed Coker Unit)
5. Diesel μέγιστης ποιότητας (Maximum Quality Diesel)
6. Platformer



Σχήμα 4.1.1 Απλοποιημένη απεικόνιση της διάταξης καθαρισμού του LPG

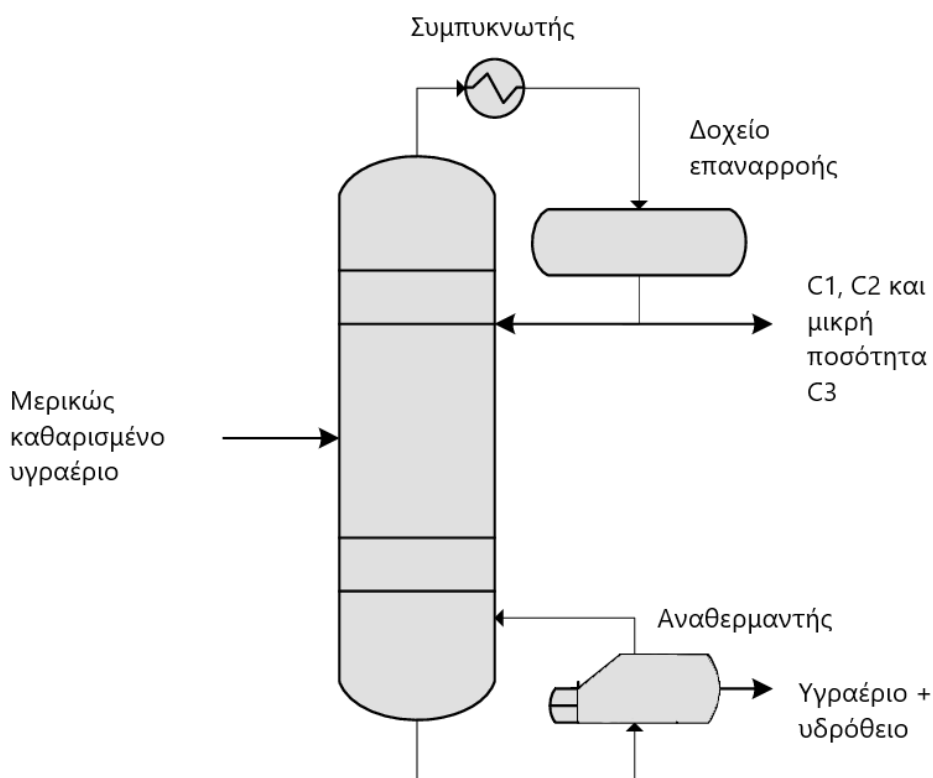
Το υγραέριο που παράγεται από την εκάστοτε μονάδα οδηγείται για τον καθαρισμό του σε αποβουτανιοποιητές και έπειτα σε μονάδες LPG DEA. Οι μονάδες LPG DEA χρησιμοποιούνται για την αφαίρεση του υδρόθειου (H_2S) και του σουλφιδίου του καρβονυλίου (COS) από το μείγμα του υγραερίου. Τα όξινα αυτά αέρια δεσμεύονται από την διαιθανολαμίνη (DEA) που υπάρχει σε αυτές τις μονάδες και με αυτό το στάδιο ολοκληρώνεται ο καθαρισμός του υγραερίου, το οποίο οδηγείται στην συνέχεια σε δεξαμενές αποθήκευσης. Πρέπει να σημειωθεί πως το προϊόν από την μονάδα υδρογονοπυρόλωσης εκτός από αποβουτανιοποίηση, πρέπει να υποστεί και αποαιθανιοποίηση ώστε να καθαριστεί περαιτέρω, ενώ το προϊόν από τους Platformers οδηγείται απευθείας στις δεξαμενές αποθήκευσης.

Για τις ανάγκες αυτής της εργασίας αναπτύχθηκε ένα νευρωνικό δίκτυο το οποίο προσομοιώνει το σύστημα αποβουτανιοποιητή/αποαιθανιοποιητή που καθαρίζει το υγραέριο που έχει παραχθεί από τις μονάδες υδρογονοπυρόλωσης.



Σχήμα 4.1.2 Απλοποιημένη απεικόνιση αποβουτανιοποιητή (Πηγή: www.google.com)

Η είσοδος σε έναν αποβουτανιοποιητή είναι ένα μείγμα υγραερίου (LPG) και LSRN (Light straight run naphtha) (C5). Επειδή το C5 είναι συστατικό της βενζίνης πρέπει να διατηρηθεί στο LSRN ώστε αυτό μετέπειτα να υποστεί περαιτέρω επεξεργασία και να γίνει βενζίνη, και ταυτόχρονα να απομακρυνθεί από το υγραέριο, καθώς το C5 θεωρείται πρόσμειξη στο υγραέριο. Η περιεκτικότητα του υγραερίου σε C5 ελέγχεται μέσω της στήλης αποβουτανιοποίησης. Ο διαχωρισμός του C5 από το υγραέριο έχει ως υποπροϊόν ένα μείγμα υδρογονανθράκων το οποίο αξιοποιείται εσωτερικά στο διυλιστήριο, για την παραγωγή ενέργειας που απαιτείται για τις διάφορες διεργασίες που πραγματοποιούνται, όπως η λειτουργία φούρνων θέρμανσης. Οι στήλες αποαιθανιοποίησης χρησιμοποιούνται με σκοπό την αφαίρεση του C2 από το μείγμα του υγραερίου. Όπως και στις στήλες αποβουτανιοποίησης, έτσι και στις στήλες αποαιθανιοποίησης παράγεται υποπροϊόν που περιέχει μεθάνιο και αιθάνιο.



Σχήμα 4.1.3 Απλοποιημένη απεικόνιση αποαιθανιοποιητή (Πηγή: www.google.com)

Σε όλες αυτές τις διαφορετικές μονάδες που λειτουργούν στο διυλιστήριο για τον καθαρισμό του υγραερίου υπάρχουν υψηλές ενεργειακές απαιτήσεις. Στην πλειοψηφία τους οι μονάδες λαμβάνουν την θερμική ενέργεια που χρειάζονται μέσω εναλλακτών θερμότητας, ενώ κάποιες άλλες παίρνουν ενέργεια μέσω φούρνων θέρμανσης. Ο εναλλάκτης θερμότητας είναι μια διάταξη η οποία επιτρέπει την μεταφορά θερμότητας μεταξύ δύο ή περισσότερων ρευστών ουσιών και η χρήση του είναι πολύ διαδεδομένη στα διυλιστήρια αλλά και στην βιομηχανία εν γένη. Ο λόγος για τον οποίο είναι τόσο συχνή η χρήση των εναλλακτών θερμότητας στην βιομηχανία έχει να κάνει με το γεγονός ότι στις μονάδες βιομηχανικής παραγωγής συχνά υπάρχουν πολλές ροές ουσιών υψηλής θερμοκρασίας. Οι ουσίες αυτές, που πιθανότατα έχουν υποστεί κάποια διεργασία και ως αποτέλεσμα έχει ανέβει η θερμοκρασία τους, μεταφέρουν θερμική ενέργεια η οποία είναι θεμιτό να αξιοποιείται γιατί αλλιώς μεταφέρεται στο περιβάλλον και χάνεται. Στο υπό μελέτη διυλιστήριο οι ουσίες που χρησιμοποιούνται στους εναλλάκτες θερμότητας είναι θερμό diesel, ατμός και βαρύ πετρέλαιο οπτάνθρακα (HCGO). Οι φούρνοι θέρμανσης που λειτουργούν στο διυλιστήριο είναι διατάξεις στις οποίες η παραγόμενη θερμότητα προκύπτει από την καύση μειγμάτων υδρογονανθράκων, είτε σε αέρια είτε σε υγρή κατάσταση, που προέρχονται από διάφορες πηγές εντός του διυλιστηρίου, όπως για παράδειγμα τα υποπροϊόντα του καθαρισμού του υγραερίου που αναφέρθηκαν παραπάνω

4.2. Δεδομένα

Το διυλιστήριο από το οποίο αντλούνται τα δεδομένα είναι εξοπλισμένο με πλήθος αισθητήρων πραγματικού χρόνου, οι οποίοι είναι τοποθετημένοι σε συγκεκριμένα σημεία που έχει κριθεί απαραίτητη η μέτρηση ορισμένων παραμέτρων των διεργασιών. Οι αισθητήρες αυτοί πραγματοποιούν καταγραφές των εν λόγω παραμέτρων ανά τακτά χρονικά διαστήματα και διαθέτουν τις πληροφορίες που συλλέγουν στο σύστημα διαχείρισης της παραγωγής. Παρατηρούνται τέσσερις βασικές κατηγορίες αισθητήρων:

- Αισθητήρες μέτρησης θερμοκρασίας

- Αισθητήρες μέτρησης πίεσης
- Αισθητήρες μέτρησης ροής
- Αισθητήρες μέτρησης συγκέντρωσης ουσίας

Στον αποβουτανιοποιητή που μελετάται υπάρχουν αισθητήρες για την μέτρηση της θερμοκρασίας στους δίσκους, στην κορυφή και στον πάτο της στήλης. Ακόμα μετριέται η θερμοκρασία που έχει το μείγμα του υγραερίου όταν εισέρχεται στην στήλη καθώς και η θερμοκρασία του μείγματος που επιστρέφει στην στήλη από τον αναθερμαντή και η θερμοκρασία του μείγματος από το δοχείο επαναρροής. Επίσης μετριέται και η θερμοκρασία εισόδου και εξόδου του θερμού diesel που χρησιμοποιείται για την αναθέρμανση του μείγματος του υγραερίου. Οι αισθητήρες μέτρησης ροής είναι τοποθετημένοι έτσι ώστε να μετράνε την ροή στην είσοδο της στήλης, την ροή από το δοχείο επαναρροής, καθώς και την ροή του diesel που χρησιμοποιείται στον αναθερμαντή. Η πίεση της στήλης μετριέται μόνο στην κορυφή της. Αντίστοιχοι αισθητήρες είναι τοποθετημένοι και στον αποαιθανιοποιητή. Στην έξοδο του αποβουτανιοποιητή μετριέται η περιεκτικότητα του υγραερίου σε C5, ενώ στην έξοδο του αποαιθανιοποιητή μετριέται η περιεκτικότητα σε C2.

Είναι προφανές πως υπάρχει μεγάλος αριθμός διαθέσιμων δεδομένων τα οποία μπορούν να χρησιμοποιηθούν με διάφορους τρόπους. Είναι σημαντικό όμως να σημειωθεί πως δεν είναι η δυνατός ο έλεγχος όλων των παραμέτρων της στήλης που μετρούνται από τους αισθητήρες. Συγκεκριμένα, οι παράμετροι που μπορούν να επηρεαστούν από τους μηχανικούς που είναι υπεύθυνοι της παραγωγικής διαδικασίας είναι η θερμοκρασία κορυφής των στηλών, η πίεση κορυφής και η ροή του μείγματος υγραερίου από τον δοχείο επαναρροής. Για τον λόγο αυτό, κρίθηκε σκόπιμο το νευρωνικό δίκτυο που αναπτύχθηκε για την προσομοίωση του συστήματος των δύο στηλών απόσταξης να δέχεται μόνο αυτά τα δεδομένα ως εισόδους. Η λογική πίσω από αυτήν την απόφαση είναι πως με αυτόν τον τρόπο δίνεται η δυνατότητα προσομοίωσης όποιων αλλαγών στην ποιότητα του υγραερίου βάση μεταβολών στο σύστημα που είναι όντως δυνατόν να πραγματοποιηθούν από το υπεύθυνο προσωπικό του διυλιστηρίου. Οι έξοδοι του νευρωνικού δικτύου είναι η περιεκτικότητα του υγραερίου σε C2 και C5, δηλαδή

ουσιών που θεωρούνται προσμείξεις στο υγραέριο και πρέπει να βρίσκονται εντός ορισμένων ορίων.

Το νευρωνικό δίκτυο πραγματοποιεί ακόμα προβλέψεις και για την κατανάλωση ενέργειας του συστήματος. Τόσο η στήλη αποβουτανιοποίησης όσο και η στήλη αποαιθανιοποίησης αξιοποιούν εναλλάκτες θερμότητας για την κάλυψη των ενεργειακών τους αναγκών. Δεν υπάρχει όμως άμεσος τρόπος για τον υπολογισμό της κατανάλωσης ενέργειας του συστήματος. Πρέπει λοιπόν να χρησιμοποιηθούν άλλα δεδομένα για τα οποία υπάρχουν μετρήσεις. Όπως αναφέρθηκε και παραπάνω, υπάρχουν διαθέσιμα δεδομένα για τις ροές του diesel που χρησιμοποιείται για την μεταφορά θερμότητας στους εναλλάκτες των δύο στηλών. Επιπλέον, υπάρχουν δεδομένα για τη θερμοκρασία που έχει το diesel στην είσοδο και στην έξοδο των εναλλακτών θερμότητας. Οι αναθερμαντές των στηλών απόσταξης βασίζονται στους εναλλάκτες θερμότητας για να πραγματοποιηθεί αύξηση της θερμοκρασίας του μείγματος του υγραερίου πριν αυτό επιστρέψει στην στήλη.

Είναι λοιπόν εφικτός ο προσδιορισμός των ενεργειακών απαιτήσεων του συστήματος ως απώλεια θερμικής ενέργειας του diesel που χρησιμοποιείται στους εναλλάκτες θερμότητας, σύμφωνα με τον νόμο της θερμιδομετρίας:

$$\dot{Q} = \dot{m}C_p\Delta T$$

Εξίσωση 1

όπου \dot{Q} ο ρυθμός μεταφοράς θερμότητας, \dot{m} ο ρυθμός μεταφοράς μάζας της ουσίας, C_p η ειδική θερμότητα της ουσίας και ΔT η διαφορά της θερμοκρασίας που έχει η ουσία μεταξύ της εισόδου και της εξόδου του εναλλάκτη θερμότητας. Η ουσία στην προκειμένη περίπτωση είναι το diesel. Αν και δεν υπάρχουν δεδομένα για τον ρυθμό μεταφοράς μάζας του diesel στο σύστημα, χρησιμοποιώντας την εξίσωση:

$$\rho = \frac{m}{V} = \frac{\dot{m}}{\dot{V}} \rightarrow \dot{m} = \rho \dot{V}$$

Εξίσωση 2

όπου ρ η πυκνότητα και \dot{V} ο ρυθμός μεταφοράς όγκου, η Εξίσωση 1 γίνεται:

$$\dot{Q} = \rho \dot{V} C_p \Delta T$$

Εξίσωση 2

Οι τιμές για το ρ και το C_p παρέχονται από το διυλιστήριο και σε συνδυασμό με τα δεδομένα για τις θερμοκρασίες εισόδου, εξόδου και ροής του diesel στον εναλλάκτη θερμότητας καθίσταται εφικτός ο υπολογισμός της κατανάλωσης ενέργειας του συστήματος.

Κεφάλαιο 5 ΚΑΤΑΣΚΕΥΗ ΜΟΝΤΕΛΟΥ

5.1. Προεπεξεργασία Δεδομένων

Τα δεδομένα που διατέθηκαν από το διυλιστήριο για την ανάπτυξη του μοντέλου καλύπτουν ένα χρονικό διάστημα δύο ετών. Οι αισθητήρες από τους οποίους συλλέχθηκαν τα δεδομένα πραγματοποιούσαν μία καταγραφή κάθε ένα λεπτό. Για να γίνει απομόνωση και συγκέντρωση μόνο των δεδομένων τα οποία θα ήταν χρήσιμα για την εκπαίδευση του τεχνητού νευρωνικού δικτύου χρειάστηκε τα δεδομένα να ελεγχθούν και να καθαριστούν. Με αυτόν τον τρόπο, αφαιρώντας δηλαδή δεδομένα τα οποία δεν είναι χρήσιμα στην πραγματικότητα για την εκπαίδευση του νευρωνικού δικτύου, εξασφαλίζεται καλύτερη ποιότητα των αποτελεσμάτων που θα παράγει το μοντέλο. Αρχικά τα δεδομένα δόθηκαν από το διυλιστήριο ως αρχεία Excel. Το κάθε αρχείο περιείχε τις μετρήσεις από έναν αισθητήρα καθώς και τη χρονική στιγμή που πραγματοποιήθηκε η καταγραφή σε μορφή «Unix time». Ο συνολικός αριθμός των αρχείων ήταν εννέα. Τα έξι από αυτά αφορούσαν τις εισόδους του μοντέλου, ενώ τα υπόλοιπα τρία τις εξόδους.

Κατά το πρώτο στάδιο της προεπεξεργασίας χρειάστηκε να γίνει έλεγχος για διπλές εγγραφές στα δεδομένα καθώς και για περιπτώσεις που οι αισθητήρες δεν είχαν καταγράψει κάποια τιμή. Εντοπίστηκαν αρκετές περιπτώσεις που οι αισθητήρες δεν είχαν πραγματοποιήσει κάποια μέτρηση. Οι περισσότερες από αυτές ήταν μεμονωμένες χρονικές στιγμές, πιθανότατα κατά τις οποίες κάποιος αισθητήρας λόγω σφάλματος δεν πραγματοποίησε την μέτρηση που θα έπρεπε. Υπήρξαν όμως και ορισμένες περιπτώσεις που οι αισθητήρες δεν είχαν καταγράψει τιμές για μεγαλύτερα χρονικά διαστήματα. Αυτές οι περιπτώσεις έπρεπε να μελετηθούν ξεχωριστά η κάθε μία ώστε να κριθεί αν οι χρονικές περίοδοι που έλειπαν από κάποιο αρχείο δεδομένων χρειαζόταν να αφαιρεθούν και από τα υπόλοιπα αρχεία ή αν θα έπρεπε να αντικατασταθούν οι τιμές που έλειπαν. Στις περιπτώσεις που κρίθηκε σκόπιμη η συμπλήρωση των τιμών που έλειπαν από κάποιο αρχείο δεδομένων, χρησιμοποιήθηκε η μέθοδος της γραμμικής παρεμβολής μεταξύ των τιμών των άκρων του χρονικού διαστήματος που έλειπε.

Στη συνέχεια, τα δεδομένα μελετήθηκαν πιο διεξοδικά ώστε να εντοπισθούν τυχόν άλλα προβλήματα. Παρατηρήθηκε πως σε ορισμένες περιπτώσεις κάποιοι από τους αισθητήρες είχαν καταγράψει τιμές οι οποίες ήταν αρνητικές. Τα μεγέθη που μετρούνταν όμως από τους αισθητήρες δεν ορίζονταν για αρνητικές τιμές, όπως για παράδειγμα η συγκέντρωση του C2 στο μείγμα του υγραερίου. Αφού λοιπόν εντοπίστηκαν όλες αυτές οι περιπτώσεις που είχαν πραγματοποιηθεί προβληματικές καταγραφές, αφαιρέθηκαν από τα αρχεία δεδομένων.

Στη συνέχεια χρειάστηκε να πραγματοποιηθεί έλεγχος και αφαίρεση ακραίων τιμών από τα δεδομένα. Για τον εντοπισμό και την αφαίρεση ακραίων τιμών από τα δεδομένα εφαρμόστηκε η μέθοδος Interquartile Range (IQR). Σύμφωνα με αυτή τη μέθοδο, τα δεδομένα από έναν αισθητήρα τοποθετήθηκαν σε αύξουσα σειρά και χωρίστηκαν σε τεταρτημόρια. Στη συνέχεια εντοπίστηκαν τα σημεία Q1 και Q3. Το σημείο Q1 ορίζεται ως το σημείο που το 25% των συνολικών δεδομένων είναι χαμηλότερα από αυτό. Το σημείο Q3 ορίζεται ως το σημείο που το 75% των συνολικών δεδομένων είναι χαμηλότερα από αυτό. Έπειτα υπολογίστηκε το χάσμα μεταξύ των τεταρτημόριων $H = Q3 - Q1$. Οι τιμές που ήταν μικρότερες από $Q1 - 1.5 \cdot H$ και μεγαλύτερες από $Q3 + 1.5 \cdot H$ θεωρήθηκαν ακραίες τιμές και αφαιρέθηκαν από τα δεδομένα (Μπούρου, 2016). Τέλος, συγκεντρώθηκαν όλα τα δεδομένα που είχαν απομείνει και κανονικοποιήθηκαν χρησιμοποιώντας τον τύπο:

$$x_{norm} = \frac{x - \mu}{\sigma^2}$$

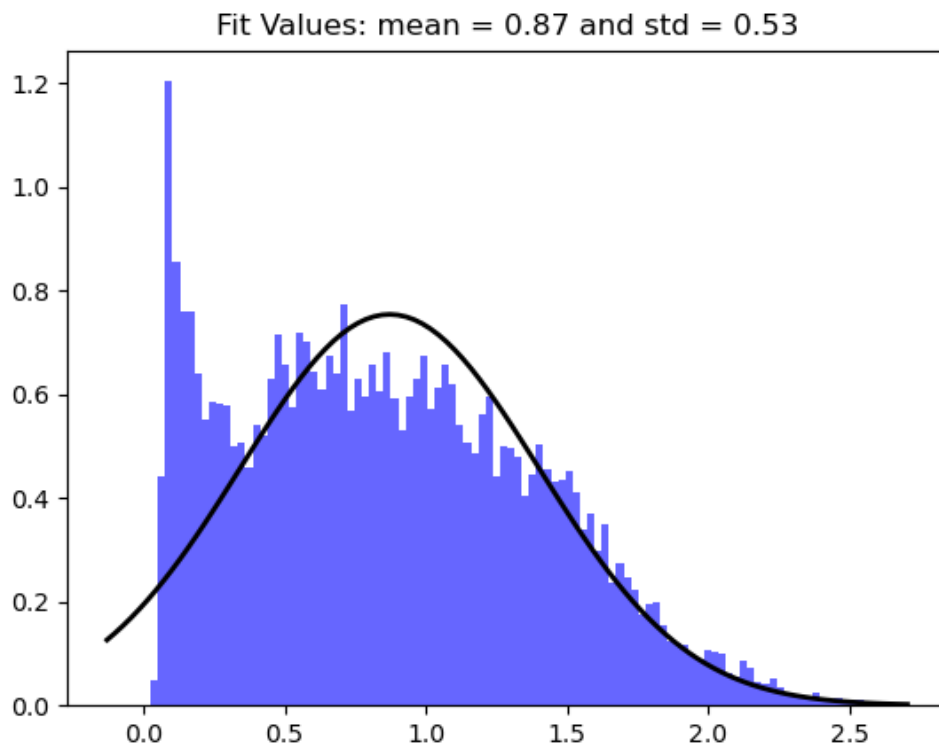
όπου μ η μέση τιμή και σ^2 η τυπική απόκλιση, ολοκληρώνοντας έτσι την προεπεξεργασία των δεδομένων. Παρακάτω παρουσιάζεται ένας πίνακας που δείχνει το εύρος των τιμών των καταγραφών που πραγματοποιήσαν οι αισθητήρες, μετά το στάδιο της προεπεξεργασίας και πριν την κανονικοποίησή τους.

Πίνακας 1 Στατιστικά μεταβλητών (1ο Μέρος)

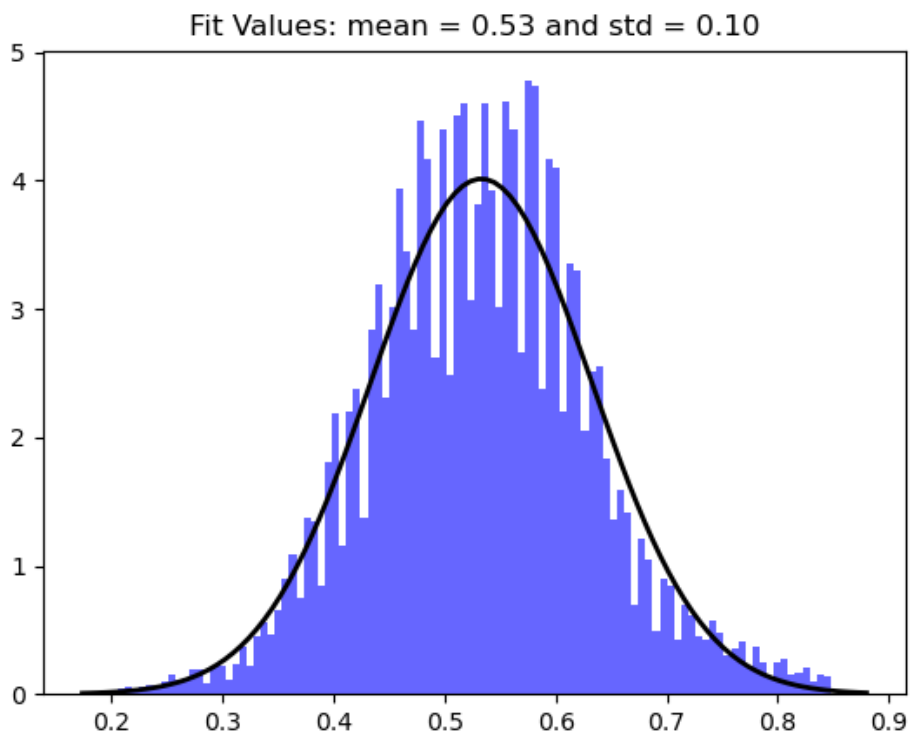
Μεταβλητή	Μονάδες Μέτρησης	Ελάχιστη Τιμή	Μέγιστη Τιμή
C2	% (mol/mol)	0.000001	2.576083
C5	% (mol/mol)	0.205657	0.847792
Κατανάλωση ενέργειας	kW	6,991.854748	12,239.689584
Θερμοκρασία αποβουτανιοποιητή	°C	67.078033	73.241722
Πίεση αποβουτανιοποιητή	(kg/cm ²)	10.923753	11.076466
Ροή από δοχείο επαναρροής αποβουτανιοποιητή	(m ³ /d)	2,568.512939	7,024.855957
Θερμοκρασία αποαιθανιοποιητή	°C	48.606201	76.712891
Πίεση αποαιθανιοποιητή	(kg/cm ²)	14.652692	17.007046
Ροή από δοχείο επαναρροής αποαιθανιοποιητή	(m ³ /d)	1,194.770386	5,810.434570

Πίνακας 2 Στατιστικά μεταβλητών (2ο Μέρος)

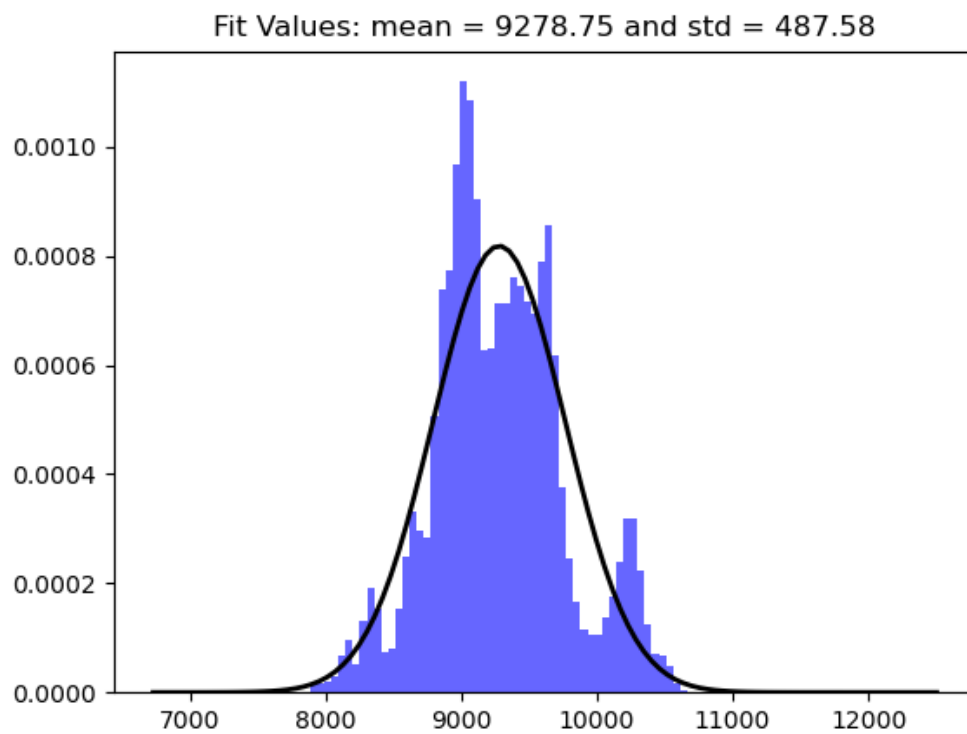
Μεταβλητή	Μονάδες Μέτρησης	Μέση Τιμή	Τυπική Απόκλιση
Περιεκτικότητα C2	% (mol/mol)	0.871639	0.529160
Περιεκτικότητα C5	% (mol/mol)	0.532895	0.099368
Κατανάλωση ενέργειας	kW	9278.747400	487.584040
Θερμοκρασία αποβουτανιοποιητή	°C	69.965294	0.903817
Πίεση αποβουτανιοποιητή	(kg/cm ²)	11.001515	0.028513
Ροή από δοχείο επαναρροής αποβουτανιοποιητή	(m ³ /d)	4608.951096	540.585705
Θερμοκρασία αποαιθανιοποιητή	°C	61.690278	3.894474
Πίεση αποαιθανιοποιητή	(kg/cm ²)	16.745669	0.348956
Ροή από δοχείο επαναρροής αποαιθανιοποιητή	(m ³ /d)	2209.702683	405.622933



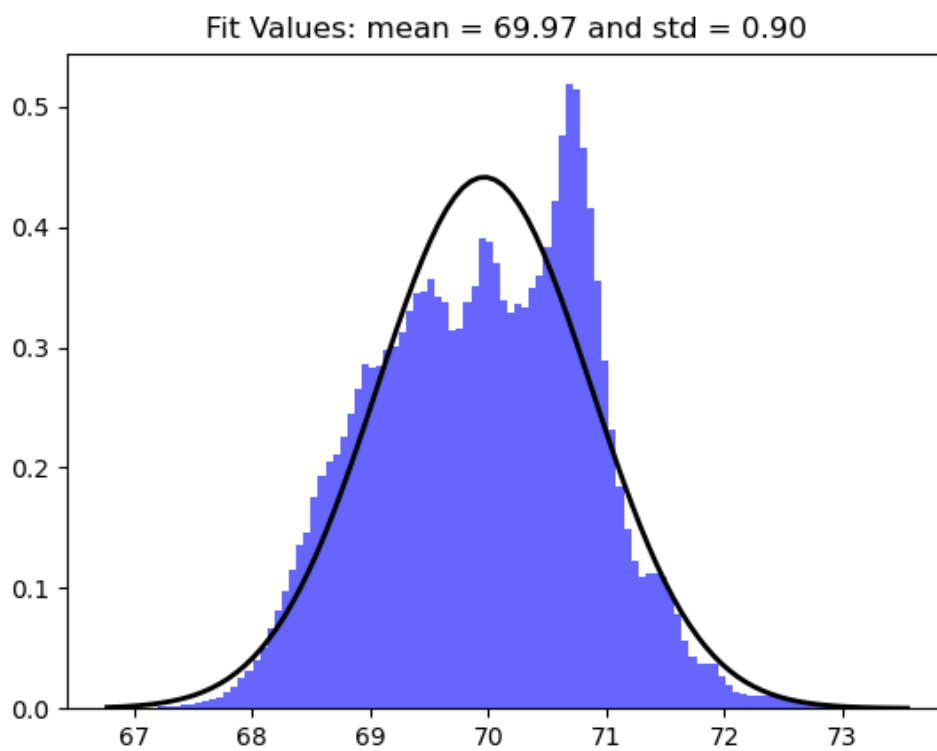
Σχήμα 5.1.1 Κατανομή δεδομένων Περιεκτικότητας C2



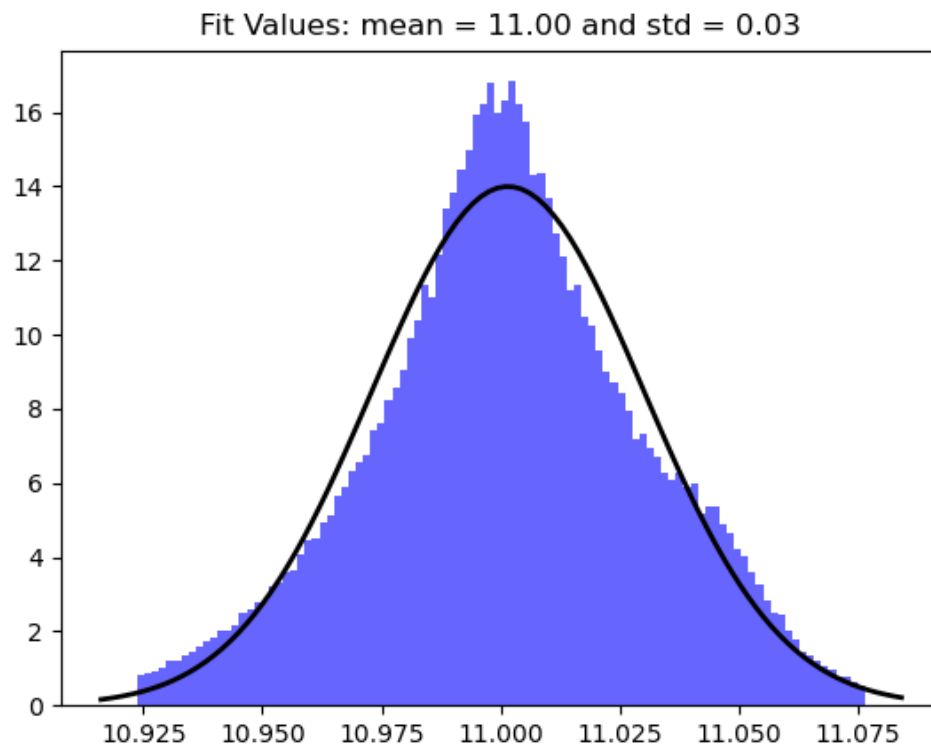
Σχήμα 5.1.2 Κατανομή δεδομένων Περιεκτικότητας C5



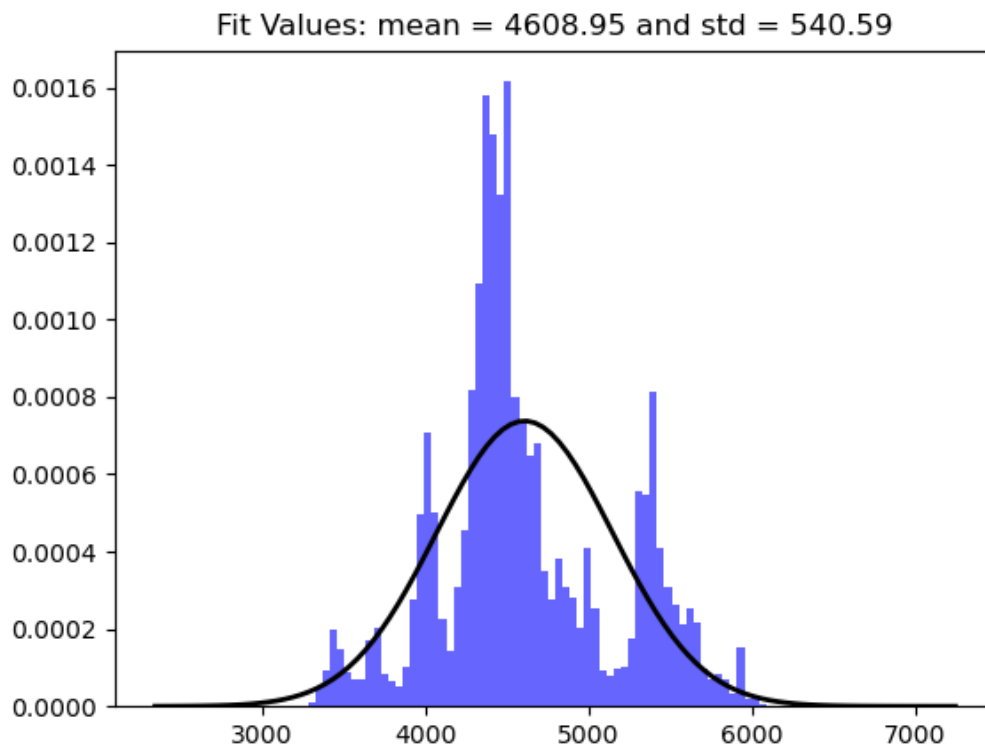
Σχήμα 5.1.3 Κατανομή δεδομένων Κατανάλωσης Ενέργειας



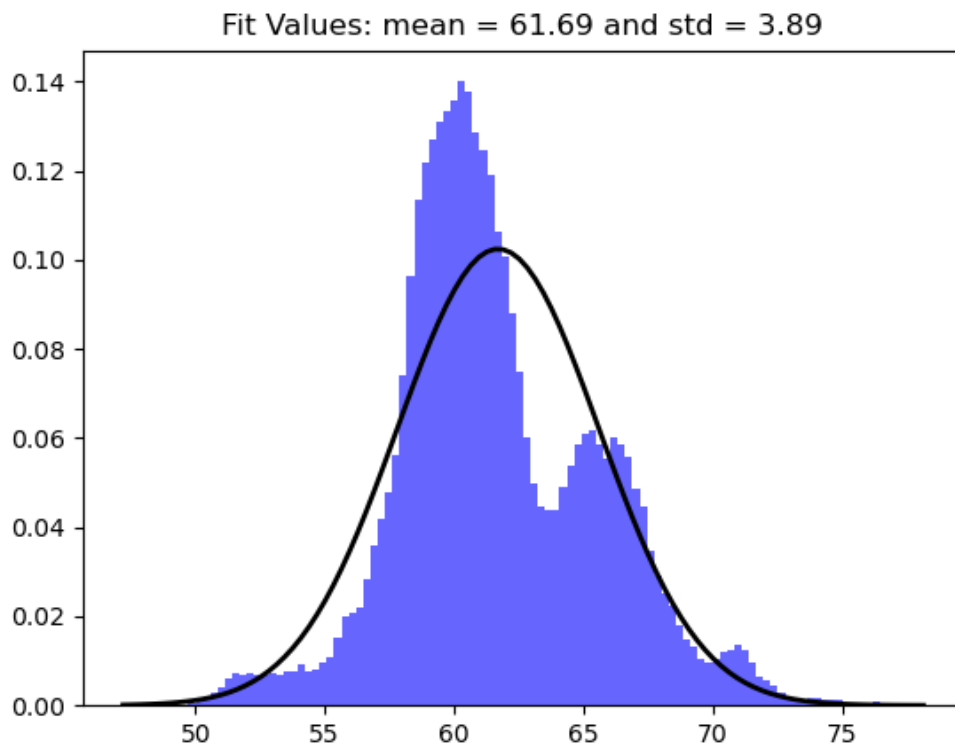
Σχήμα 5.1.4 Κατανομή δεδομένων Θερμοκρασίας Αποβουτανιοποιητή



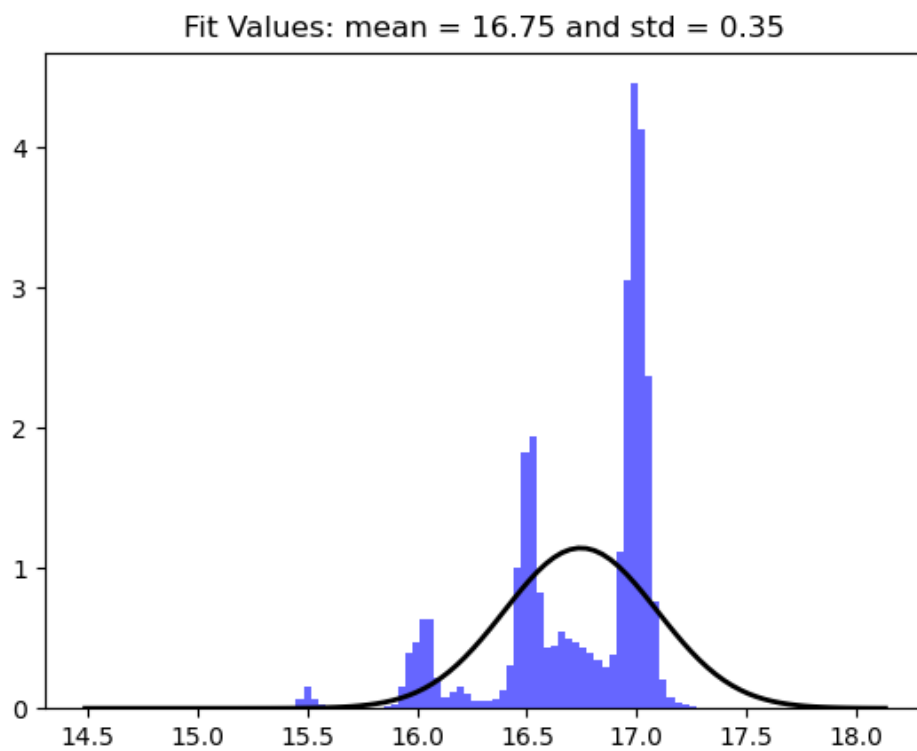
Σχήμα 5.1.5 Κατανομή δεδομένων Πίεσης Αποβουτανιοποιητή



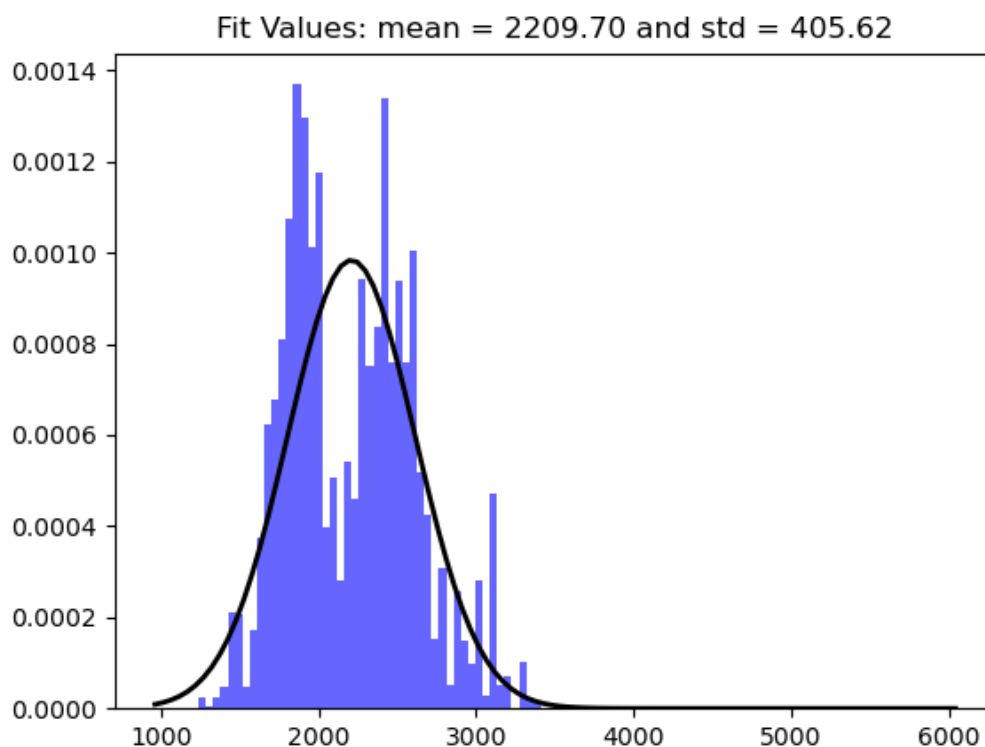
Σχήμα 5.1.6 Κατανομή δεδομένων Ανάρρου Αποβουτανιοποιητή



Σχήμα 5.1.7 Κατανομή δεδομένων Θερμοκρασίας Αποαιθανισποιητή



Σχήμα 5.1.8 Κατανομή δεδομένων Πίεσης Αποαιθανισποιητή



Σχήμα 5.1.9 Κατανομή δεδομένων Ανάρρου Αποαιθανιοποιητή

5.2. Ανάπτυξη νευρωνικού δικτύου

Παρακάτω θα αναλυθεί η διαδικασία επιλογής και ανάπτυξης του τεχνητού νευρωνικού δικτύου με τις καλύτερες επιδόσεις στην μοντελοποίηση του συστήματος των δύο στηλών απόσταξης. Για να επιτευχθούν οι καλύτερες επιδόσεις, χρειάστηκε να βρεθεί εκείνη η αρχιτεκτονική του δικτύου η οποία δίνει το μικρότερο σφάλμα σε δεδομένα τα οποία δεν έχουν χρησιμοποιηθεί κατά την εκπαίδευση του νευρωνικού δικτύου. Στόχος είναι να βρεθεί ο βέλτιστος αριθμός κρυφών επιπέδων καθώς και ο αριθμός των νευρώνων σε κάθε επίπεδο. Για τις ανάγκες της παρούσας εργασίας κρίθηκε πως η μέθοδος δοκιμής και σφάλματος επαρκούσε για την βελτιστοποίηση της αρχιτεκτονικής του δικτύου ενώ για την αξιολόγησή του χρησιμοποιήθηκε η μέθοδος «train – validation - test split».

Σύμφωνα με την μέθοδο αξιολόγησης «train-validation-test split», το αρχικό σετ δεδομένων εκπαίδευσης του δικτύου χωρίζεται σε 3 μέρη. Το training σετ αποτελείται από το 80% των συνολικών δεδομένων, ενώ το test σετ αποτελείται από το υπόλοιπο 20%. Το validation σετ αποτελείται από το 20% των δεδομένων του training σετ. Το training σετ χρησιμοποιείται από το μοντέλο κατά τη διαδικασία της εκπαίδευσης για τον καθορισμό των παραμέτρων του δικτύου (βάρη, πόλωση). Το δεύτερο σετ, το validation, χρησιμοποιείται κατά την εκπαίδευση του δικτύου ώστε να αξιολογηθούν οι παράμετροι του δικτύου και να μεταβληθούν καταλλήλως ώστε να επιτευχθούν οι βέλτιστες παράμετροι και άρα τα μικρότερα σφάλματα στις προβλέψεις του δικτύου. Το τρίτο και τελευταίο σετ, το test σετ, χρησιμοποιείται μετά το πέρας της εκπαίδευσης του δικτύου ώστε να διαπιστωθεί η ικανότητα του δικτύου να πραγματοποιεί καλές προβλέψεις βάση δεδομένων τα οποία δεν έχουν χρησιμοποιηθεί κατά την εκπαίδευση.

Όσον αφορά στην μέθοδο εύρεσης της βέλτιστης αρχιτεκτονικής του τεχνητού νευρωνικού δικτύου, η διαδικασία ξεκινά με μια διάταξη δικτύου η οποία περιλαμβάνει ένα μόνο κρυφό επίπεδο το οποίο αποτελείται από 2 νευρώνες. Στη συνέχεια το νευρωνικό δίκτυο εκπαιδεύεται χρησιμοποιώντας τα δεδομένα train και test. Τέλος υπολογίζεται η ρίζα του μέσου τετραγωνικού σφάλματος (Root mean squared error – RMSE) πάνω στα validation δεδομένα για κάθε μεταβλητή εξόδου και αυτές οι τιμές καταγράφονται ώστε να βρεθεί η αρχιτεκτονική εκείνη που παράγει το μικρότερο σφάλμα. Η διαδικασία επαναλαμβάνεται, διπλασιάζοντας τους νευρώνες στο κρυφό επίπεδο έως ότου ο αριθμός των νευρώνων γίνει 256. Τότε, προστίθεται ένα επιπλέον κρυφό επίπεδο το οποίο έχει 2 νευρώνες και η διαδικασία συνεχίζεται ακολουθώντας την ίδια λογική. Επίσης, με αντίστοιχο τρόπο εξετάζονται και αρχιτεκτονικές στις οποίες συνυπάρχουν παράλληλα κρυφά επίπεδα τα οποία δεν συνδέονται μεταξύ τους. Αξίζει να σημειωθεί πως εξαιτίας του πεπερασμένου αριθμού δοκιμών των οποίων μπορούν να γίνουν ώστε να εξακριβωθεί η βέλτιστη αρχιτεκτονική του δικτύου, υπάρχει ενδεχόμενο τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται στην εργασία να αντιπροσωπεύουν ένα τοπικό ελάχιστο και όχι το βέλτιστο δυνατό αποτέλεσμα στον χώρο των σφαλμάτων (Michalopoulos et al., 2001.).

Οι υπερπαραμέτροι (hyperparameters) του μοντέλου ορίστηκαν και αυτές βάση δοκιμής και σφάλματος. Η τιμή του ρυθμού μάθησης ορίστηκε να είναι 0.001 και το batch size που χρησιμοποιήθηκε για την εκπαίδευση της τελικής αρχιτεκτονικής

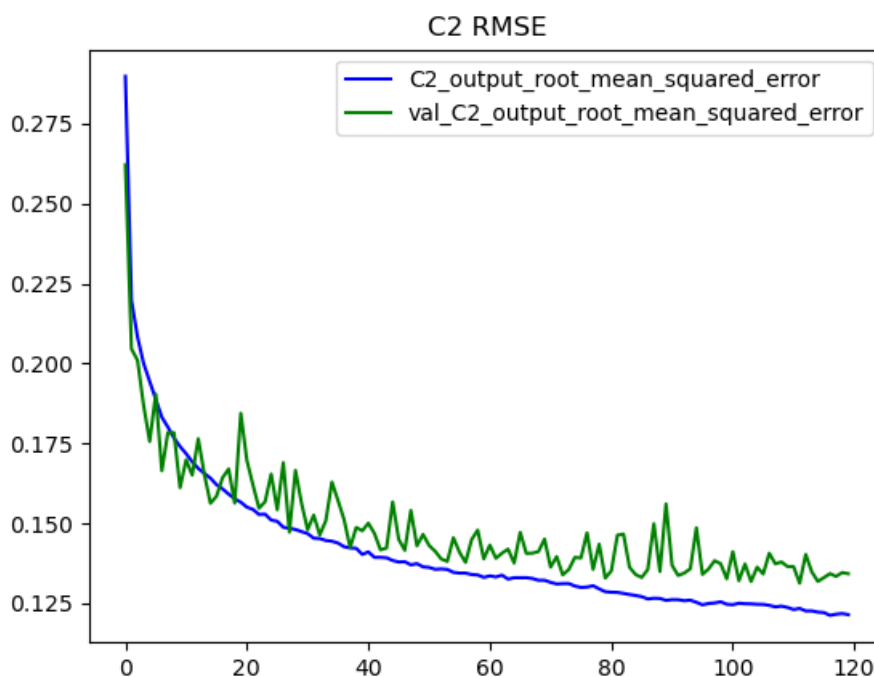
του τεχνητού νευρωνικού δικτύου ήταν 512. Οι δύο αυτές υπερπαράμετροι έχουν μεγάλη επίδραση στον συνολικό χρόνο εκπαίδευσης του δικτύου. Οι τιμές τους ορίστηκαν έτσι ώστε το μοντέλο να μπορεί να παράγει καλά αποτελέσματα χωρίς να απαιτούνται υπερβολικά μεγάλα χρονικά διαστήματα για την εκπαίδευσή του. Γενικά, μεγαλύτερες τιμές batch size οδηγούσαν σε μικρότερους χρόνους εκπαίδευσης του τεχνητού νευρωνικού δικτύου. Το μειονέκτημα αυτής της μεθόδου είναι ότι το μεγαλύτερο batch size είχε ως αποτέλεσμα μεγαλύτερα σφάλματα στις προβλέψεις του νευρωνικού δικτύου.

Παρά το γεγονός αυτό, χρησιμοποιήθηκαν μεγάλες τιμές batch size κατά την εκπαίδευση του δικτύου ώστε να υπάρξει μια αρχική εικόνα σχετικά με τις επιδόσεις κάποιας αρχιτεκτονικής. Δηλαδή, όταν δοκιμαζόταν κάποια καινούρια αρχιτεκτονική, η πρώτη δοκιμή γινόταν με μεγάλη τιμή batch size και αν τα σφάλματα που δίνονταν από το νευρωνικό δίκτυο ήταν ικανοποιητικά ή ενθαρρυντικά, τότε η συγκεκριμένη αρχιτεκτονική εξεταζόταν διεξοδικότερα, μεταβάλλοντας πλέον την τιμή του batch size ώστε να παραχθεί το μικρότερο δυνατό σφάλμα. Με αυτόν τον τρόπο μειώθηκε σημαντικά ο απαιτούμενος χρόνος για την εξέταση όλων των αρχιτεκτονικών που μελετήθηκαν. Ο βελτιστοποιητής (optimizer) που χρησιμοποιήθηκε για την εκπαίδευση του δικτύου είναι ο RMSprop, ο οποίος χρησιμοποιείται πολύ συχνά στη βιβλιογραφία για την αντιμετώπιση προβλημάτων παρεμβολής (regression). Η τιμή βάσης την οποία βελτιστοποιήθηκε το δίκτυο ήταν η RMSE, η οποία αποτελεί το πιο δημοφιλές μέτρο αξιολόγησης τεχνητών νευρωνικών δικτύων που επιλύουν προβλήματα παρεμβολής.

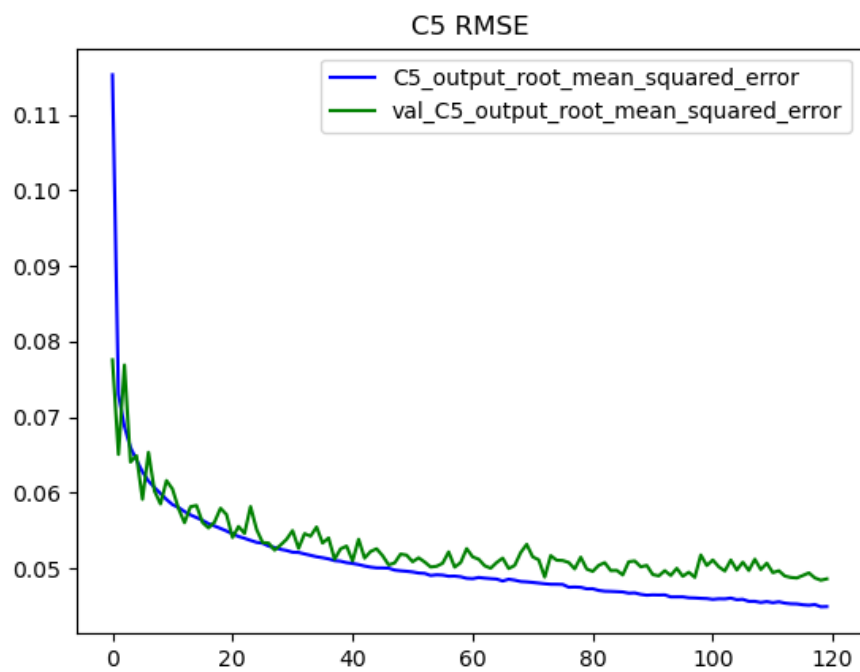
Τέλος, για τον έλεγχο του αριθμού των εποχών (epochs) για τις οποίες θα εκπαιδευόταν το δίκτυο, χρησιμοποιήθηκαν οι μέθοδοι «πρόωρος τερματισμός» (early stop) και «σημείο ελέγχου» (checkpoint). Ο πρόωρος τερματισμός της εκπαίδευσης του νευρωνικού δικτύου είναι μια μέθοδος που χρησιμοποιείται ώστε να σταματήσει η διαδικασία της εκπαίδευσης σε περίπτωση που περάσει ένας προκαθορισμένος αριθμός εποχών εκπαίδευσης χωρίς να σημειωθεί βελτίωση των σφαλμάτων που παράγει το δίκτυο. Η μέθοδος του σημείου ελέγχου χρησιμοποιείται διότι τα σφάλματα του νευρωνικού δικτύου στο τέλος της εκπαίδευσής του δεν είναι απαραίτητως τα καλύτερα που έχουν επιτευχθεί. Ιδιαίτερα αν το δίκτυο εκπαιδεύεται για μεγάλο αριθμό εποχών, υπάρχει πάντα ο κίνδυνος της υπερπροσαρμογής (overfitting) του δικτύου στα δεδομένα που

εκπαιδεύεται. Υπερπροσαρμογή του δικτύου στα δεδομένα καλείται το φαινόμενο εκείνο κατά το οποίο το τεχνητό νευρωνικό δίκτυο προσαρμόζει τα βάρη και τις πολώσεις του με τέτοιο τρόπο που του επιτρέπει να πραγματοποιεί πολύ καλές προβλέψεις πάνω στα δεδομένα με τα οποία εκπαιδεύεται εις βάρος της ικανότητας του δικτύου να γενικεύει. Δηλαδή όταν χρησιμοποιούνται νέα δεδομένα ως είσοδοι στο δίκτυο, αυτό αποτυγχάνει στο να πραγματοποιήσει ικανοποιητικές προβλέψεις. Υπάρχει λοιπόν ανάγκη για αποθήκευση του καλύτερου σφάλματος που επιτυγχάνεται, το οποίο όμως μπορεί να σημειωθεί πριν ολοκληρωθεί η διαδικασία της εκπαίδευσης. Συνδυαστικά, αυτές οι μέθοδοι έχουν ως αποτέλεσμα την πρόωρη διακοπή της εκπαίδευσης του δικτύου και ταυτόχρονα την αποθήκευση των παραμέτρων οι οποίες έχουν δώσει τα καλύτερα αποτελέσματα μοντελοποίησης πριν διακοπεί η εκπαίδευση.

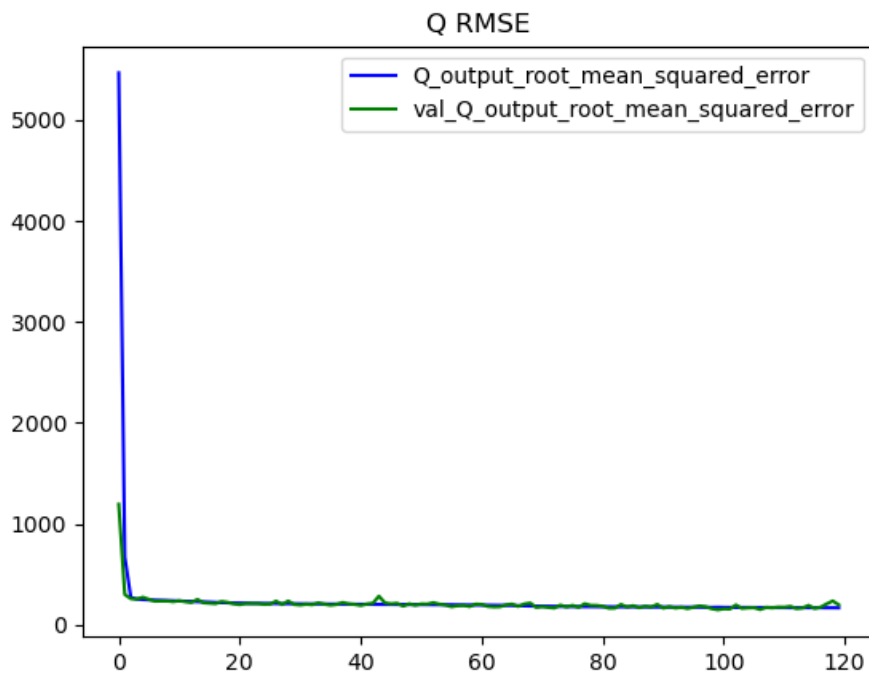
Στα παρακάτω σχήματα παρουσιάζεται οι τιμές του RMSE για το Train και το Validation σετ κατά την διαδικασία της εκπαίδευσης του δικτύου. Φαίνεται πως όσο περισσότερες εποχές εκπαίδευσης περνάνε, τόσο μειώνεται το σφάλμα του δικτύου.



Σχήμα 5.2.1 Εξέλιξη RMSE του C2 κατά την διαδικασία της εκπαίδευσης



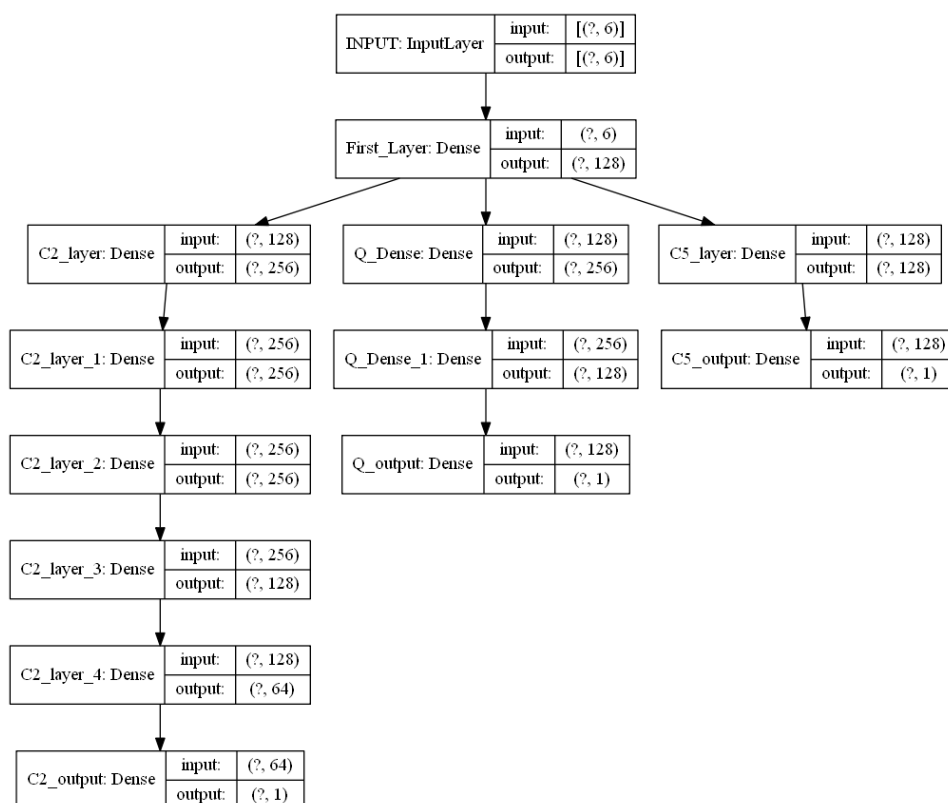
Σχήμα 5.2.2 Εξέλιξη RMSE του C5 κατά την διαδικασία της εκπαίδευσης



Σχήμα 5.2.3 Εξέλιξη RMSE της κατανάλωσης ενέργειας κατά την διαδικασία της εκπαίδευσης

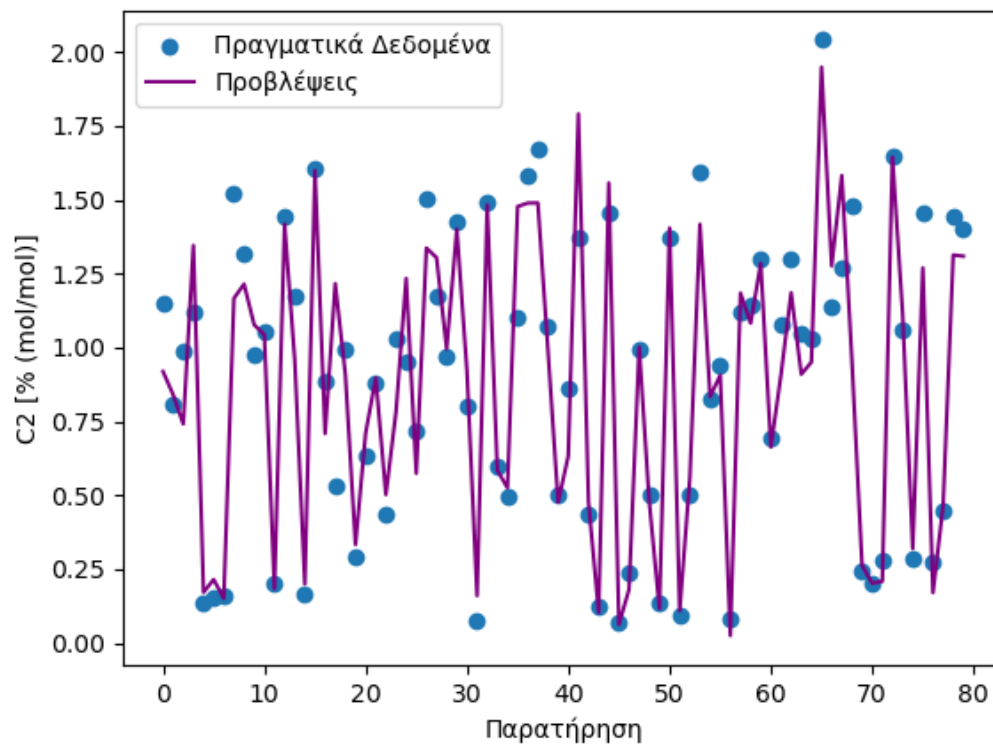
Κεφάλαιο 6 ΠΑΡΟΥΣΙΑΣΗ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ

Η τελική αρχιτεκτονική που επιλέχθηκε για το τεχνητό νευρωνικό δίκτυο παρουσιάζεται στο Σχήμα 4.2.1. Για τις ανάγκες του προβλήματος επιλέχθηκε αρχιτεκτονική στην οποία υπάρχουν παράλληλα κρυφά επίπεδα τα οποία δεν συνδέονται μεταξύ τους. Όπως φαίνεται και στην εικόνα, κάθε ένας από τους 3 κλάδους του δικτύου έχει έναν κόμβο εξόδου, καθώς ο κάθε κλάδος πραγματοποιεί προβλέψεις για μία μόνο μεταβλητή από τις τρεις που προβλέπονται. Η αρχιτεκτονική τέτοιου είδους δεν συναντάται συχνά. Ο λόγος για τον οποίο δομείται έτσι το νευρωνικό δίκτυο είναι για να είναι δυνατή η καλύτερη προσαρμογή των παραμέτρων του δικτύου (βάρη, πόλωση) ώστε να παράγονται καλύτερες προβλέψεις για την κάθε μεταβλητή. Παρατηρείται πως οι κλάδοι δεν έχουν τον ίδιο αριθμό κρυφών επιπέδων μεταξύ τους. Αυτό σχετίζεται με το πόσο εύκολο ή δύσκολο ήταν για τον νευρωνικό δίκτυο να αναγνωρίσει τις σχέσεις μεταξύ των εισόδων και των εξόδων του συστήματος. Λίγα επίπεδα κρυφών νευρώνων υποδηλώνουν ευκολότερη συσχέτιση των εισόδων και των εξόδων.

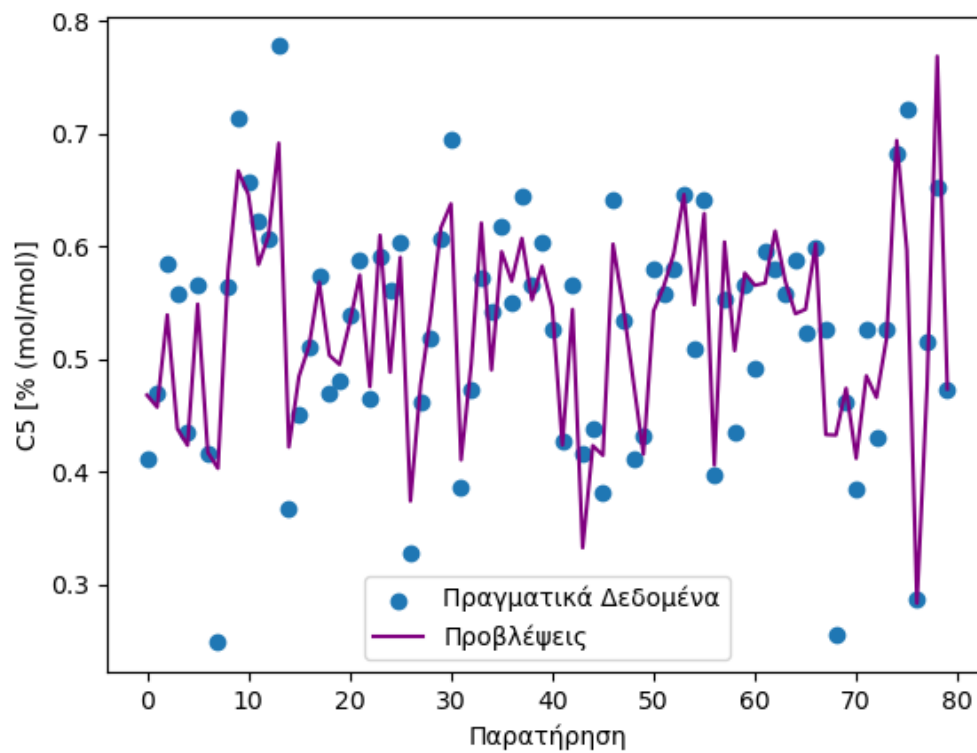


Σχήμα 5.2.1 Τελική αρχιτεκτονική τεχνητού νευρωνικού δικτύου

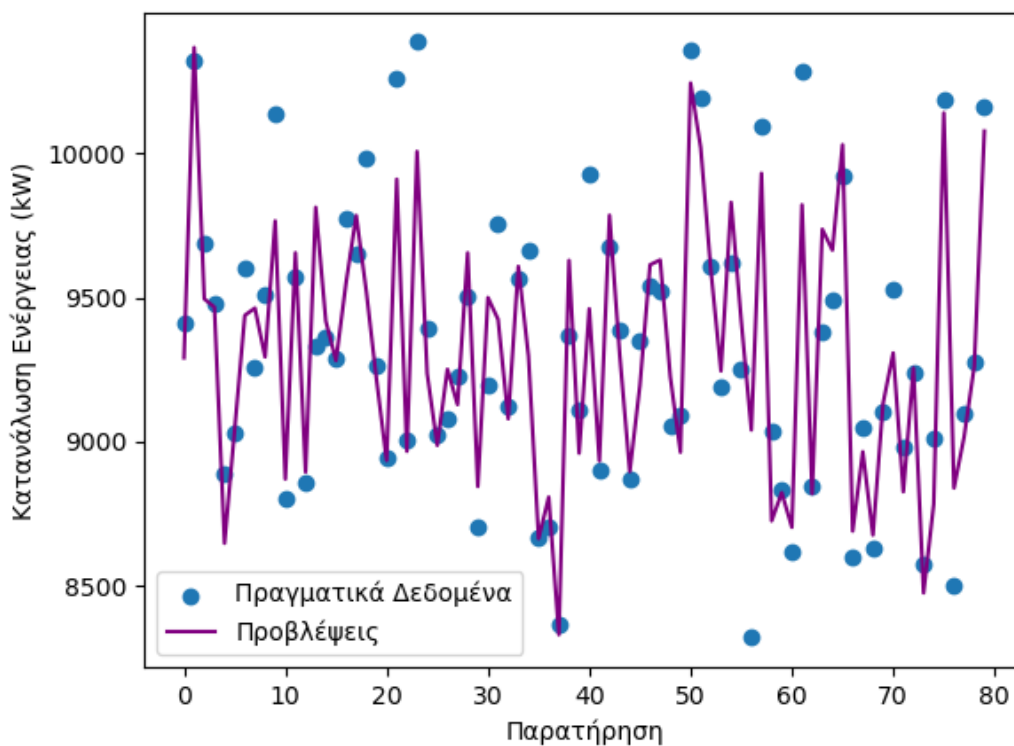
Παρακάτω παρουσιάζονται μερικά διαγράμματα στα οποία φαίνεται η αποτελεσματικότητα του μοντέλου στο να προσομοιώνει το σύστημα των δύο στηλών απόσταξης. Στα Σχήματα 5.2.2, 5.2.3 και 5.2.4 απεικονίζονται οι προβλεπόμενες από το νευρωνικό δίκτυο τιμές για τις περιεκτικότητες σε C2 και C5 καθώς για την κατανάλωση ενέργειας του συστήματος σε σχέση με τις πραγματικές τιμές. Οι προβλέψεις γίνονται πάνω στο test σετ, το οποίο είναι το σετ εκείνο που δεν έχει χρησιμοποιηθεί κατά την εκπαίδευση του τεχνητού νευρωνικού δικτύου. Παρατηρείται από αυτά τα γραφήματα πως οι προβλέψεις που παράγει το νευρωνικό δίκτυο είναι πολύ κοντά στις πραγματικές τιμές.



Σχήμα 5.2.2 Πραγματικές μετρήσεις και προβλέψεις για την περιεκτικότητα σε C2

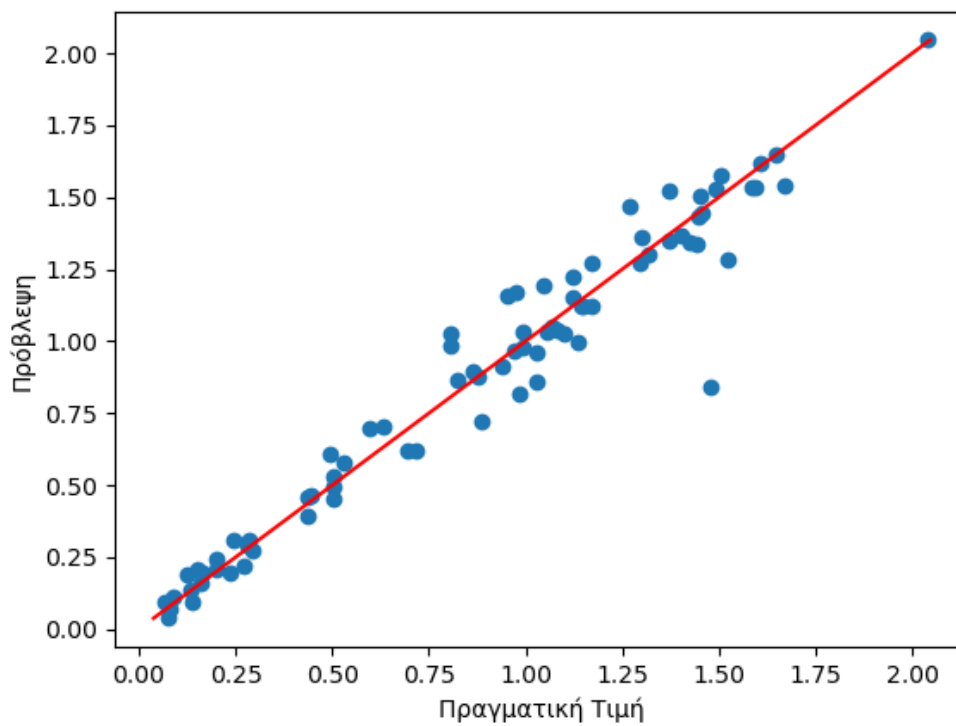


Σχήμα 5.2.3 Πραγματικές μετρήσεις και προβλέψεις για την περιεκτικότητα σε C5

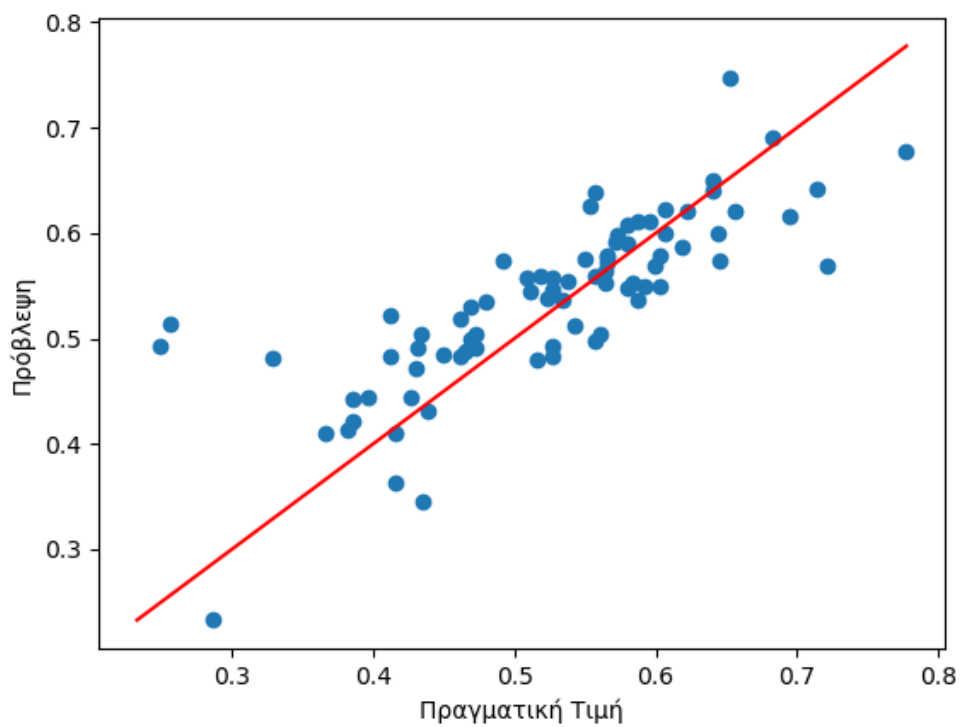


Σχήμα 5.2.4 Πραγματικές μετρήσεις και προβλέψεις για την κατανάλωση ενέργειας

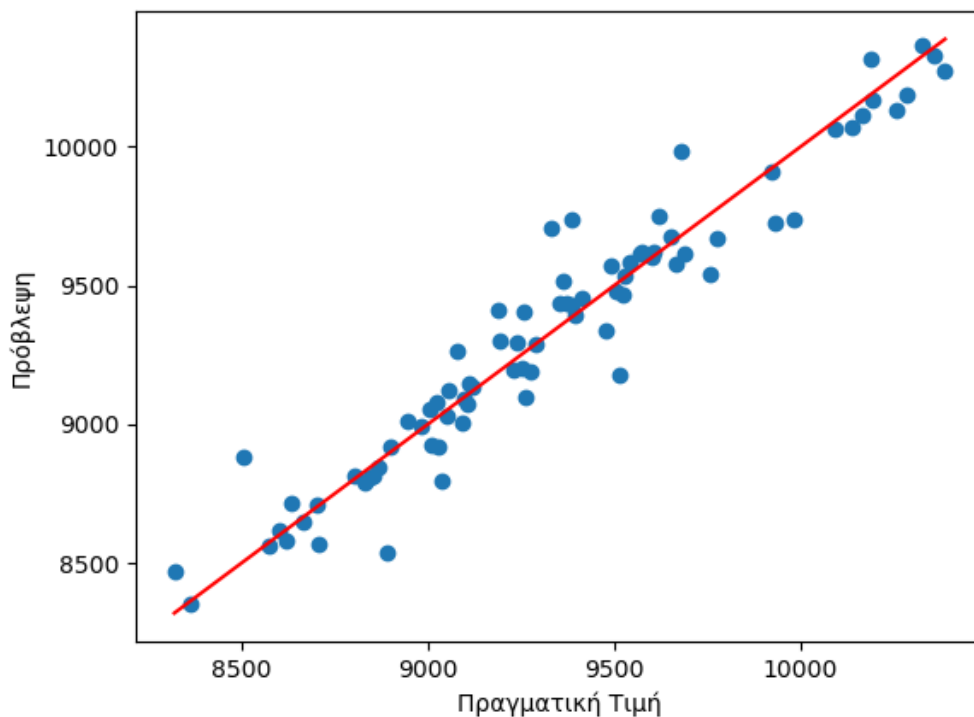
Στα διαγράμματα 5.2.5, 5.2.6 και 5.2.7 φαίνεται ξανά η σχέση των προβλεπόμενων τιμών και των πραγματικών, αυτήν την φορά από μια άλλη οπτική. Όσο πιο κοντά στην κόκκινη ευθεία βρίσκεται μια μπλε κουκίδα, τόσο καλύτερη είναι η πρόβλεψη που έχει κάνει το μοντέλο.



Σχήμα 5.2.5 Πραγματικές μετρήσεις και προβλέψεις για την περιεκτικότητα σε C2



Σχήμα 5.2.6 Πραγματικές μετρήσεις και προβλέψεις για C5



Σχήμα 5.2.7 Πραγματικές μετρήσεις και προβλέψεις για κατανάλωση ενέργειας

Στους Πίνακες 3, 4 και 5 φαίνονται τα σφάλματα για κάθε μεταβλητή. Συγκεκριμένα, παρουσιάζονται το μέσο απόλυτο σφάλμα (Mean Absolut Error – MAE) και η ρίζα του μέσου τετραγωνικού σφάλματος (RMSE). Τα σφάλματα εμφανίζονται για το train, το validation και το test σετ.

Πίνακας 3 Σφάλματα νευρωνικού δικτύου πάνω στο Train σετ

Τύπος Σφάλματος	Train σετ		
	C2	C5	Q
MAE	0.014814	0.003829	14,251.953125
RMSE	0.121713	0.061881	119.381546

Πίνακας 4 Σφάλματα νευρωνικού δικτύου πάνω στο Validation σετ

Τύπος Σφάλματος	Validation σετ		
	C2	C5	Q
MAE	0.016668	0.003839	14,300.367187
RMSE	0.129107	0.061966	119.584144

Πίνακας 5 Σφάλματα νευρωνικού δικτύου πάνω στο Test σετ

Τύπος Σφάλματος	Test σετ		
	C2	C5	Q
MAE	0.017055	0.003910	14,405.863281
RMSE	0.130594	0.062537	120.024429

Παρατηρείται πως οι τα σφάλματα και οι προβλέψεις που παράγονται χρησιμοποιώντας τα δεδομένα από το training σετ είναι καλύτερα από αυτά των άλλων δύο σετ. Αυτό είναι αναμενόμενο καθώς μέσω των δεδομένων του training σετ έχουν καθοριστεί τα βάρη και οι πολώσεις του μοντέλου βάση της μεθοδολογίας εκπαίδευσης ενός τεχνητού νευρωνικού δικτύου. Το γεγονός πως τα σφάλματα του test σετ είναι παραπλήσια με αυτά του train σετ υποδηλώνει πως το μοντέλο μπορεί να παράγει καλές προβλέψεις για καινούρια δεδομένα και άρα υπάρχει επαρκής ικανότητα γενίκευσης.

Κεφάλαιο 7 ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ – ΠΡΟΤΑΣΕΙΣ

Στα πλαίσια της παρούσας διπλωματικής εργασίας κατασκευάστηκε ένα τεχνητό νευρωνικό δίκτυο με σκοπό την πρόβλεψη της κατανάλωσης ενέργειας καθώς και των εξόδων ενός συστήματος στηλών απόσταξης καθαρισμού υγραερίου. Οι προβλέψεις αυτές γίνονται βάση των ελέγξιμων μεταβλητών εισόδου του συστήματος. Τα δεδομένα πάνω στα οποία εκπαιδεύτηκε το νευρωνικό δίκτυο προήλθαν από το τμήμα της γραμμής παραγωγής υγραερίου ενός διυλιστηρίου που πραγματοποιεί τις διεργασίες της αποβουτανιοποίησης και αποαιθανιοποίησης, οι οποίες αποσκοπούν στον καθαρισμό του υγραερίου από διάφορες προσμίξεις.

Οι προβλέψεις που παράγει το νευρωνικό δίκτυο είναι ικανοποιητικές σε βαθμό που καθίσταται δυνατή η χρήση του τεχνητού νευρωνικού δικτύου για την προσομοίωση του συστήματος των δύο στηλών είτε για την έγκαιρη αναγνώριση σφαλμάτων κατά την παραγωγική διαδικασία του υγραερίου, τροφοδοτώντας το μοντέλο με δεδομένα από τις χημικές διεργασίες σε πραγματικό χρόνο, είτε για πειραματικές δοκιμές στο σύστημα, για την περαιτέρω μελέτη της επίδρασης που έχουν μεταβολές των ελέγξιμων μεταβλητών του συστήματος επί του τελικού προϊόντος, χωρίς να υπάρχει κίνδυνος υποβάθμισης της ποιότητας του τελικού προϊόντος. Τα σφάλματα που παράγει το νευρωνικό δίκτυο πάνω στα διάφορα σετ δεδομένων είναι παραπλήσια, γεγονός που υποδηλώνει πως το δίκτυο έχει την ικανότητα να πραγματοποιεί χρήσιμες προβλέψεις και για καινούρια δεδομένα.

Η επιλογή ενός τεχνητού νευρωνικού δικτύου για την μοντελοποίηση του συστήματος αποτέλεσε καλή επιλογή. Το δίκτυο είναι ικανό να αναγνωρίσει τις σχέσεις μεταξύ των εισόδων και των εξόδων του συστήματος χωρίς να απαιτείται καμία γνώση για τις φυσικές και χημικές αρχές που διέπουν το σύστημα, απλοποιώντας έτσι σημαντικά την μοντελοποίηση ενός ισχυρά μη-γραμμικού συστήματος. Ακόμα, το γεγονός ότι το νευρωνικό δίκτυο μπορεί να παράγει τις ζητούμενες προβλέψεις μέσα σε πολύ μικρό χρόνο, το καθιστά ιδανική επιλογή για ενσωμάτωση σε συστήματα που χρησιμοποιούνται για την παρακολούθηση και τον έλεγχο των εν λόγω διαδικασιών σε πραγματικό χρόνο.

Το συγκεκριμένο μοντέλο θα μπορούσε μελλοντικά να αναπτυχθεί περαιτέρω με σκοπό τη διεύρυνση των δυνατοτήτων του. Μία εφαρμογή η οποία αποτελεί πιθανό πεδίο μελέτης είναι η ανάπτυξη ενός «soft αισθητήρα». Ένας soft αισθητήρας αποτελεί ένα σύστημα το οποίο παρέχει τη δυνατότητα μέτρησης και καταγραφής μεγεθών τα οποία είτε είναι αδύνατο να μετρηθούν λόγω της έλλειψης κατάλληλων αισθητήρων, είτε υπάρχει πολύ μικρή αξιοπιστία στις μετρήσεις των συμβατικών αισθητήρων (Pani, Amin, & Mohanta, 2016). Ένα τέτοιο σύστημα απαιτεί δεδομένα από άλλους αισθητήρες βάση των οποίων στη συνέχεια, μετά από κατάλληλη επεξεργασία, πραγματοποιούνται προβλέψεις για τα μεγέθη που είναι επιθυμητό να μετρηθούν. Το τεχνητό νευρωνικό δίκτυο δουλεύει ήδη με έναν τέτοιο τρόπο. Θα μπορούσαν μελλοντικά να χρησιμοποιηθούν και τα δεδομένα από τους υπόλοιπους αισθητήρες του διυλιστηρίου για να αναπτυχθεί ένας soft αισθητήρας. Η έρευνα στο πεδίο των αισθητήρων τέτοιου μπορεί να αποβεί χρήσιμη τόσο για τον τομέα της βιομηχανίας όσο και για την περαιτέρω κατανόηση και βελτιστοποίηση των soft αισθητήρων.

BIBΛΙΟΓΡΑΦΙΚΕΣ ΑΝΑΦΟΡΕΣ

- Abdullah, Z., Aziz, N., & Ahmad, Z. (2007). Nonlinear modelling application in distillation column. *Chemical Product and Process Modeling*, 2(3).
- Bansal, V., Perkins, J. D., Pistikopoulos, E. N., Ross, R., & Van Schijndel, J. M. G. (2000). Simultaneous design and control optimisation under uncertainty. *Computers & Chemical Engineering*, 24(2-7), 261-266.
- Brizuela, E., Uria, M., & Lamanna, R. (1996, August). Predictive control of a multi-component distillation column based on neural networks. In *Proceedings of International Workshop on Neural Networks for Identification, Control, Robotics and Signal/Image Processing* (pp. 270-278). IEEE.
- Can, Ü., Jimoh, M., Steinbach, J., & Wozny, G. (2002). Simulation and experimental analysis of operational failures in a distillation column. *Separation and Purification Technology*, 29(2), 163-170.
- Chang, J. S., Lu, S. C., & Chiu, Y. L. (2007). Dynamic modeling of batch polymerization reactors via the hybrid neural-network rate-function approach. *Chemical Engineering Journal*, 130(1), 19-28.
- Chen, L., Hontoir, Y., Huang, D., Zhang, J., & Morris, A. J. (2004). Combining first principles with black-box techniques for reaction systems. *Control Engineering Practice*, 12(7), 819-826.
- Cubillos, F., Callejas, H., Lima, E. L., & Vega, M. P. (2001). Adaptive control using a hybrid-neural model: Application to a polymerisation reactor. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, 18, 113-120.
- Diehl, M., Findeisen, R., Schwarzkopf, S., Uslu, I., Allgöwer, F., Bock, H. G., Gilles, E.D. & Schlöder, J. P. (2003). An efficient algorithm for nonlinear model predictive control of large-scale systems. Part II: Experimental evaluation for a distillation column. *Automatisierungstechnik*, 51(1), 22-29.
- Eikens, B., Karim, M. N., & Simon, L. (2001). Combining neural networks and first principle models for bioprocess modeling. In *Application of neural networks and other learning technologies in process engineering* (pp. 121-148).
- Henson, M. A. (1998). Nonlinear model predictive control: current status and future directions. *Computers & Chemical Engineering*, 23(2), 187-202.
- Kister, H. Z. (2011). *Distillation troubleshooting*. John Wiley & Sons

- Michalopoulos, J., Papadokonstadakis, S., Arampatzis, G., & Lygeros, A. (2001). Modelling of an industrial fluid catalytic cracking unit using neural networks. *Chemical Engineering Research and Design*, 79(2), 137-142.
- Michelsen, F. A., & Foss, B. A. (1996). A comprehensive mechanistic model of a continuous Kamyr digester. *Applied mathematical modelling*, 20(7), 523-533.
- Norquay, S. J., Palazoglu, A., & Romagnoli, J. A. (1999). Application of Wiener model predictive control (WMPC) to an industrial C2-splitter. *Journal of Process Control*, 9(6), 461-473.
- Nugroho, S., Nazaruddin, Y. Y., & Tjokronegoro, H. A. (2004, July). Non-linear identification of aqueous ammonia binary distillation column based on simple Hammerstein model. In *2004 5th Asian Control Conference (IEEE Cat. No. 04EX904)* (Vol. 1, pp. 118-123). IEEE.
- Pani, A. K., Amin, K. G., & Mohanta, H. K. (2016). Soft sensing of product quality in the debutanizer column with principal component analysis and feed-forward artificial neural network. *Alexandria Engineering Journal*, 55(2), 1667-1674.
- Pearson, R. K. (1995). Nonlinear input/output modelling. *Journal of Process Control*, 5(4), 197-211.
- Ramli, N. M., Hussain, M. A., Jan, B. M., & Abdullah, B. (2014). Composition prediction of a debutanizer column using equation based artificial neural network model. *Neurocomputing*, 131, 59-76.
- Sun, C., & Hahn, J. (2005). Reduction of stable differential-algebraic equation systems via projections and system identification. *Journal of process control*, 15(6), 639-650.
- Troudi, H., Ghiss, M., Ellejmi, M., & Tourki, Z. (2019). CFD simulation of multicomponent mixture within a packed Deethanizer column. *Heat and Mass Transfer*, 55(9), 2605-2622.
- van Lith, P. F., Betlem, B. H., & Roffel, B. (2003). Combining prior knowledge with data driven modeling of a batch distillation column including start-up. *Computers & chemical engineering*, 27(7), 1021-1030.
- Wankat, P. C. (2015). Decreasing costs of distillation columns with vapor feeds. *Chemical Engineering Science*, 137, 955-963.

- Yu, X. H. (2003, June). A Neuromorphic Controller for a Distillation Column. In *2003 4th International Conference on Control and Automation Proceedings* (pp. 679-682). IEEE.
- Zhu, Y. (1999, June). Distillation column identification for control using Wiener model. In *Proceedings of the 1999 American Control Conference (Cat. No. 99CH36251)* (Vol. 5, pp. 3462-3466). IEEE.
- Μπούρου, Δ. (2016). Στατιστική ανάλυση δεδομένων με ακραίες και ελλιπούς τιμές (Doctoral dissertation).
- Χαβατζόπουλος, Π. Μ. (2011). Χρήση παρατηρητή, βασισμένου σε νευρωνικά δίκτυα, για αναγνώριση φαινομένου "wing rock" σε δελταπτερυγα αεροσκάφη 80 μοιρών. (Bachelor's thesis)