



## مدلسازی یک فرآیند غیر خطی صنعتی با هیبرید اصل اول و شبکه های عصبی مصنوعی

محمود قاسمی<sup>۱</sup>، میر ابوالفضل مختاری<sup>۲\*</sup>

۱- کارشناسی ارشد، دانشکده مهندسی اتوماسیون ابزار دقیق، دانشگاه صنعت نفت، اهواز، ایران

۲- استادیار، دانشکده مهندسی و پرواز، دانشگاه امام علی (ع)، تهران، ایران

\*s.abolfazl.mokhtari@aut.ac.ir

ارسال: مرداد ۱۴۰۱ پذیرش: مرداد ۱۴۰۱

### چکیده

مدلسازی جعبه خاکستری توجه فزاینده‌ای را به خود جلب کرده است تا از داده‌ها برای بهبود درک فرآیند استفاده کند. رویه فعلی اغلب از مدل‌های جعبه سفید برای پیش‌بینی رفتارهای فرآیندی استفاده می‌کند. این مدل‌های مکانیکی مبتنی بر درک فیزیکی و مطالعات تجربی هستند، اما گاهی اوقات منجر به عدم تطابق مدل سیستم می‌شوند. مدل‌های جعبه سیاه می‌توانند به عنوان جایگزین عمل کنند، اما اغلب از تعمیم و تفسیرپذیری ضعیف رنج می‌برند. برای ترکیب این دو تکنیک، مدل‌های جعبه خاکستری برای استفاده از داده‌های فرآیند و در عین حال حفظ درجه‌ای از درک فیزیکی سیستم ایجاد می‌شوند. در این مقاله، رویکردی مبتنی بر مدل جعبه خاکستری برای یک راکتور شیبه‌سازی شده اعمال و آزمایش می‌شود. تمام بخش‌های شناخته شده فرآیند بر اساس اصول مدل‌های مکانیکی هستند و بخش‌های ناشناخته باقی مانده توسط مدل‌های جعبه سیاه متشکل از یک شبکه عصبی مدلسازی می‌شوند. استفاده از مدل‌های جعبه خاکستری می‌تواند سود عملیاتی را برای تمام شرایط در نظر گرفته افزایش دهد.

کلمات کلیدی: مدل‌سازی جعبه خاکستری، شبکه‌های عصبی مصنوعی، ویژگی‌های برون‌یابی، راکتور توام با مخزن دائم.

### ۱- مقدمه

در پروسه سیستم‌های مهندسی مدل‌سازی فرآیند یک امر مهم را به خود اختصاص می‌دهد. در اصل مدل‌سازی فرآیند یک رابط دانش در مورد فرآیند با یک نمایش ریاضی انتزاعی است [۱]. ماهیت دانش متنوع است و بنابراین روشهای مدل‌سازی به طور طبیعی می‌توانند با توجه به ماهیت دانش تقسیم شوند [۲-۳]. مدل‌های اصول اولیه، مدل‌های شفاف مکانیکی یا وابسته به پدیده‌ها می‌باشد که نمایانگر طبقه گسترده‌ای از مدل‌ها، معروف به مدل‌های جعبه سفید هستند. از طرفی مدل‌های داده محور که شفافیت کمتری نسبت به مدل‌های جعبه سفید دارند، به مدل‌های جعبه سیاه معروف هستند و صرفاً بر روی داده‌های فرآیند کار می‌کنند. طبقه بندی ریاضی که از نزدیک با فرآیند مرتبط است می‌تواند با توجه به فرم پارامتر کردن مدل انجام شود. مدل‌های پارامتری بر اساس پیش‌بینی دانش پروسه انجام می‌شود. در این مدل‌ها تعداد پارامترها ثابت است و بسته به سطح پیشرفت دانش ممکن است تعبیر فیزیکی یا تجربی داشته باشند [۴]. مدل‌های جعبه سفید به طور طبیعی در دسته مدل‌های پارامتری قرار می‌گیرند. در مقابل

، مدل های غیر پارامتری منحصرأ از داده ها تعیین می شوند. اصطلاح غیر پارامتری به این معنی نیست که این مدلها کاملاً فاقد پارامترها هستند بلکه تعداد و ماهیت پارامترها انعطاف پذیر بوده و از قبل توسط دانش ثابت نیستند [۴-۵].

در بین این دو حالت افقی، مدل سازی نیمه پارامتری ترکیبی (هیبریدی) قرار دارد که محور بررسی این مقاله است. بنابراین مدل های نیمه پارامتری ترکیبی می توانند به عنوان ساختار مدل های تعریف شوند که زیرمجموعه های پارامتری و غیر پارامتری را با هم ترکیب می کنند. کاربرد آنها برای پردازش مدل سازی از حوزه شبکه های عصبی تکامل یافته است، که اولین بار در سال ۱۹۹۲ توسط تامسون و کرامر گزارش شد [۶]. ایده اصلی، ایجاد ساختار مدل شبکه عصبی به همراه استفاده از دانش اصول اولیه بود. نتیجه این شد که وقتی با همان مقدار داده پردازش شبکه غیر پارامتری، فرایند آموزش مدل نیمه پارامتری انجام می شود، مدل نیمه پارامتری ترکیبی قادر به پیش بینی شرایط فرایند بهتر بود، همچنین قادر به درون یابی و برون یابی عمدتاً دقیق تر بود و تفسیر آن هم ساده تر از مدل های مبتنی بر شبکه های عصبی بود. روش های مختلف دیگری نیز که براساس ترکیب زیرمدل ها است وجود دارد. اصطلاح مدل سازی نیمه پارامتری، مدل سازی هیبریدی و یا جعبه خاکستری در دهه ۱۹۹۰ در شناسایی سیستم ها و کنترل ظاهر شد که برای توصیف این مدل با ترکیب اطلاعات قبلی عمدتاً اطلاعات ساختاری برگرفته از اصول اول، مدل پارامتری، مدل ریاضی و یا مدل های جعبه سفید با مدل های تجربی، مدل های غیر پارامتری، مدل های داده محور و یا مدل های جعبه سیاه انجام می شود [۷].

مدل سازی مکانیکی و مدل سازی داده محور دو رویکرد را تشکیل می دهند که در صفات آنها متفاوت است. توسعه یک مدل مکانیکی بارها دست و پا گیر، پر زحمت و پر هزینه است و نیاز به دانش دقیق در مورد روند پروسه دارد در حالی که رویکردهای مبتنی بر داده نسبتاً سریع، قابل اجرا و دانش کمتری نیاز دارند. عیب مدل های داده محور نیز در مقایسه با مدل های مکانیکی، به داده های غنی و معتری برای استخراج نیازمند است و کیفیت توصیفی آن فقط در مجاورت مناطقی که برای آن داده موجود است، خوب است. مدل سازی نیمه پارامتری ترکیبی می تواند مزایا و معایب مدل سازی کاملاً مکانیکی و غیر پارامتری را متعادل کند. در رابطه با این رویکردها می توان به چندین مزیت اشاره کرد، از قبیل دقت بالاتر برآورد، پیش بینی بهتر، خواص کالیبراسیون بهتر، خصوصیات برون یابی پیشرفته، توسعه مدل کارآمدتر و تفسیر بهتر [۴ و ۸-۹]. مزیت اصلی مدل جعبه خاکستری، انعطاف بیشتر این مدل برای حل مشکلات پیچیده است که یک عامل اصلی برای مهندسی سیستم های فرآیند محسوب می شود. مشکلات در استفاده از مدل های نیمه پارامتری ترکیبی بیشتر مربوط به اجرای ساختار مدل است و اگر مدل جعبه خاکستری به خوبی معماری نشده باشد، امکان وجود محدودیتهای مدل های مکانیکی یا غیر پارامتری در مدل این مدل هم وجود دارد. همچنین اگر در طراحی این مدل، مدل جعبه سیاه دیتای مناسبی نداشته باشد و به درستی عمل نکند، عملکرد مدل جعبه خاکستری ضعیف تر از مدل جعبه سیاه می شود [۱۰-۱۱].

در این مقاله مدل سازی جعبه خاکستری یک راکتور توام با همزن دائم در دو ساختار سریال و موازی آزمایش می شود. برای آشکار سازی دینامیک سیستم ورودی های اعمال شده از نوع سیگنال توالی باینری شبه تصادفی انتخاب می شوند. همچنین برای نشان دادن توانمندی مدل پیشنهادی، ویژگی های برون یابی آن با مدل جعبه سیاه شبکه عصبی مصنوعی مقایسه می شود.

## ۲- متدولوژی

### ۲-۱- ساختار مدل سازی جعبه خاکستری

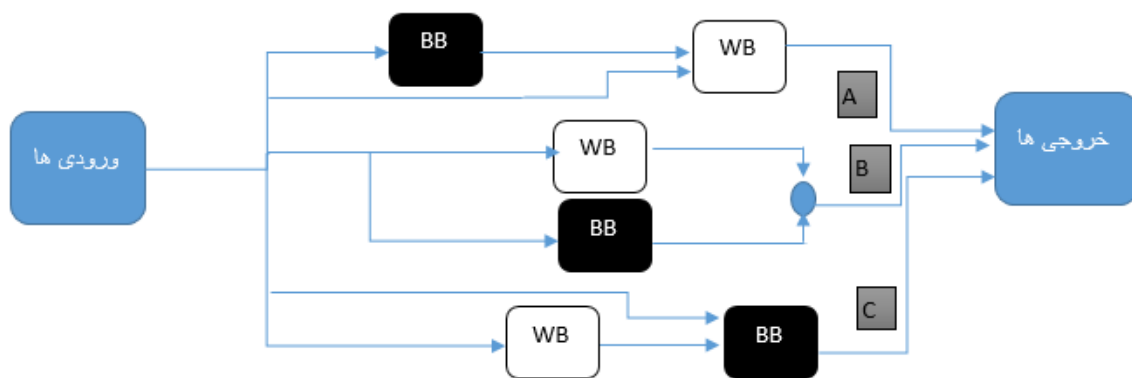
مدل سازی جعبه خاکستری از ترکیب دو مدل جعبه سفید و جعبه سیاه ایجاد می شود. به شکل ۱ مراجعه کنید به ساختار B موازی گفته می شود و ساختارهای A و C سری نامیده می شوند. با این حال در ساختار سری ترتیب مدل جعبه سیاه و سفید ممکن است قابل تعویض نباشد.

### ۲-۱-۱- ساختار موازی

ساختار موازی B شکل (۱) معمولاً زمانی کاربرد دارد که یک مدل فرآیند (جعبه سفید) در دسترس باشد، اما عملکرد آن به دلایل دیگری به عنوان مثال مدل نشدن اثرات، غیرخطی بودن، رفتار دینامیکی محدود است. در این حالت ساختار موازی یک مدل غیر پارامتری می تواند منجر به تخمین کارآمد و قابل ملاحظه ای شود. البته قدرت پیش بینی مدل غیر پارامتری در ورودی هایی که آموزش نیافته اند، ضعیف است. رویکرد موازی به ویژه اگر اثرات خاصی در سیستم لحاظ نشده باشد جالب است. به عنوان مثال یک رفتار استاتیکی غیر خطی و یا دینامیکی خطی و بنابراین هر اثر را می توان با یک مدل جداگانه نشان داد [۶]. چندین روش برای ترکیب خروجی های مدل جعبه سفید و جعبه سیاه در ساختار موازی وجود دارد، که با این حال متداول ترین راه به صورت جمع خروجیها را انجام می شود و در این حالت مدل جعبه سیاه خطای باقیمانده (رزیدوآل) بین مدل جعبه سفید و داده های تجربی را پیش بینی می کند [۱۲].

#### ۲-۱-۲- ساختار سری

محبوب ترین ترکیب سری ساختار A، شکل (۱) است. در این ساختار مدل جعبه سفید معمولاً مدلی را به دست می آوریم که از قوانین اصول اولیه مانند قوانین بقا مثل ماده، تکانه، حرکت و انرژی بالانس برای پروسه های در دسترس مورد استفاده می شود. مدل های جعبه سیاه معمولاً اصطلاحات زیربنایی حرکت یا انتقال را تخمین می زند زیرا که ایجاد مدل معتبر و قابل قبول بسیار دشوارتر است. این ساختار سریال به ویژه هنگامی مناسب است که دانش دقیقی در مورد مکانیسم های اساسی در دسترس نباشد، اما داده های فرآیند کافی برای استنباط الگوهای ناشناخته وجود داشته باشد. همچنین مجموعه داده ها باید بزرگ و غنی از اطلاعات در مورد وضعیت فرآیند باشد با وجود اینکه هیچ تفسیر مستقیم فیزیکی نداشته باشد. با استفاده از این داده ها به عنوان ورودی به مدل غیر پارامتری امکان دارد که بتوان تخمین های سیستمیک را بهبود بخشید و آن را اجرا کرد [۱۳]. ساختار سری شکل (۱) C می تواند به عنوان جایگزینی برای ساختار موازی استفاده شود، یعنی پیش بینی های مدل جعبه سفید به عنوان ورودی برای مدل غیر پارامتری (جعبه سیاه) در نظر گرفته شود و باعث ایجاد پیوندی بین حالت های فرایند و پارامترهای مشخص کننده پروسه باشد. به طور کلی، مدل های ساختار C ترکیبی کاربردهای زیادی در مهندسی شیمی یا بیوشیمیایی پیدا نکردند، بلکه در مهندسی مکانیک بسیار کاربرد دارد [۱۲].

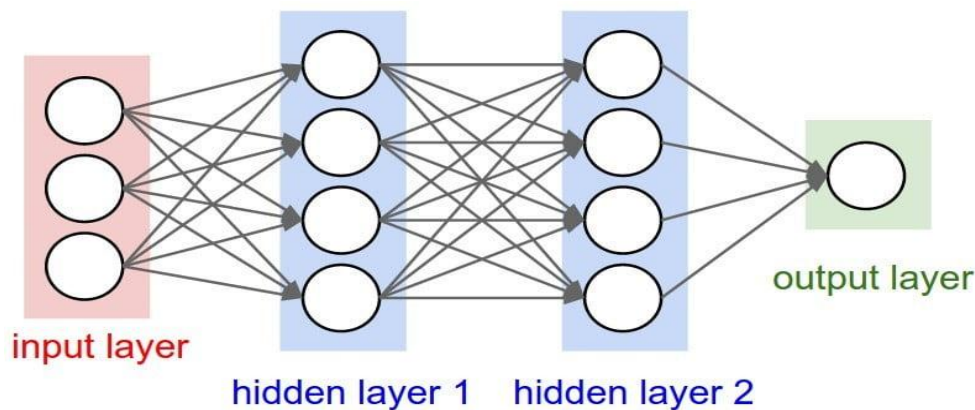


شکل ۱-۱ (A) ساختار سریال نوع ۱ (B) ساختار موازی (C) ساختار سریال نوع ۲

اینکه ساختار سری یا ساختار موازی مدل جعبه خاکستری مناسب تر است بستگی به مدل جعبه سفید دارد، زیرا اثر اساسی را بر مدل نهایی تحمیل می کند. فرضیات موجود در مدل جعبه سفید باعث ایجاد محدودیت در فضای مسئله می شود. وقتی ساختار مدل جعبه سفید دقیق نباشد، آرایش موازی می تواند عملکرد بهتری نسبت به سریال داشته باشد، زیرا مدل غیر پارامتری موازی می تواند عدم تطابق ساختاری مدل جعبه سفید را جبران کند. اما هنگامی که ساختار مدل جعبه سفید دقیق است از پیش بینی مدل سری انتظار می رود که به طور قابل توجهی بهتر از مدل موازی باشد [۱۴].

#### ۲-۲- شبکه های عصبی مصنوعی

شبکه های عصبی مصنوعی (ANN) یک ساختار محاسباتی است که از یک سیستم عصبی بیولوژیکی الهام گرفته شده است. همانطور که در شکل (۲) نشان داده شده است، یک شبکه های عصبی مصنوعی چند لایه از سیستمی از نورون ها یا گره های به هم پیوسته ساده تشکیل شده است [۲]. مدلی است که نگاهی غیرخطی بین بردارهای ورودی و خروجی را نشان می دهد. معماری یک شبکه های عصبی مصنوعی چند لایه متغیر است، اما، به طور کلی از چندین لایه نورون تشکیل شده است. نورون ها توسط پیوندهای وزنی به یکدیگر متصل می شوند که سیگنال ها می توانند از روی آنها عبور کنند. هر نورون ورودی های متعددی را از نورون های دیگر متناسب با وزن اتصال خود دریافت می کند و یک خروجی تولید می کند که ممکن است به چندین نورون دیگر منتشر شود. لایه ورودی هیچ نقش محاسباتی ایفا نمی کند بلکه صرفاً برای ارسال بردار ورودی به شبکه استفاده می شود. شبکه های عصبی مصنوعی توانایی یادگیری از طریق آموزش را دارا می باشد. آموزش به مجموعه ای از داده های آموزشی نیاز دارد، به عنوان مثال، مجموعه ای از بردارهای ورودی و خروجی. در طول آموزش، شبکه های عصبی مصنوعی بارها و بارها با داده های آموزشی روبه رو می شود، و وزن ها در شبکه تنظیم می شوند تا زمانی که نقشه ورودی-خروجی مورد نظر رخ دهد. پس از آموزش، از بردارهای ورودی که متعلق به جفت های آموزشی نیستند برای تست کردن سیستم لحاظ شده اند، سیستم را شبیه سازی کرده و بردار خروجی مربوطه را تولید می کنند. با انتخاب یک مجموعه مناسب از وزن و تابع انتقال، مشخص شد که شبکه عصبی مصنوعی می تواند هر تابعی را با دقت مناسبی تقریب بزند [۱۵].



شکل ۲- ساختار شبکه عصبی مصنوعی [۱۴]

### ۳- شرح فرایند

در فرآیندهای شیمیایی، راکتورها واحد مرکزی و موثری هستند که ورودی ها را به محصولات خروجی تبدیل می کنند. راکتورها بسته به نوعشان عملکردهای متفاوتی دارند، از جمله اینکه راکتور می تواند در مدل های پیوسته، دسته ای یا فید-بچ کار کند [۱۶]. یک راکتور مخزن همزن پیوسته (CSTR) برای روش های مختلف در چارچوب پیشنهادی استفاده می شود و یک مثال موردی در این کار می باشد. یک راکتور مخزن همزن پیوسته گرمازا را در نظر بگیرید که در آن واکنش  $A \rightarrow B$  در فاز مایع رخ می دهد. فلوی جریان خوراک ورودی و محصول خروجی مخزن با دبی یکسان در نظر گرفته شده است. برای تنظیم دما در راکتور، یک محیط خنک کننده که از طریق یک جکت در اطراف راکتور جریان می یابد، اعمال می شود. غلظت و دما باید در محدوده مورد نظر از طریق دستکاری ورودی کنترل شود. پس از اعمال موازنه جرم و انرژی، با فرض اینکه سرعت واکنش مرتبه اول است، معادله های دینامیکی زیر می باشد. (۴-۱) می تواند این فرآیند را توصیف کند [۵ و ۱۷].

$$R_1 = k_0 e^{-\frac{E}{RT}} C_{Aout} \quad (1)$$

$$R_2 = k_0 e^{-\frac{E}{RT}} C_{Aout}^2 \quad (2)$$

$$\frac{dC_{Aout}}{dt} = \frac{q}{V} (C_{Afeed} - C_{Aout}) - R_1 \quad (3)$$

$$\frac{dT_{out}}{dt} = \left[ \frac{q}{V} (T_{feed} - T_{out}) + \frac{UA}{V \rho C_p} (T_{coolant} - T_{out}) \right] + \frac{\Delta H}{\rho C_p} R_1 \quad (4)$$

مقادیر اسمی متغیرها و پارامترهای سیستم در جدول ۱ آمده است. معادله ۱ معادله نرخ واکنش مرتبه اول است. اولین ترم در معادلات (۳) و (۴) فلوی ورودی و فلوی خروجی هستند و ترم دوم تولید یا مصرف راکتور در اثر واکنش را توصیف می کند، که از تعادل جرم و انرژی در سراسر مرز سیستم به دست می آید. معادله (۵ و ۶) با نرخ واکنش مرتبه دوم برای استخراج داده های تجربی شبیه سازی شده، استفاده می شود.

$$\frac{dC_{Aout}}{dt} = \frac{q}{V} (C_{Afeed} - C_{Aout}) - R_2 \quad (5)$$

$$\frac{dT_{out}}{dt} = \left[ \frac{q}{V} (T_{feed} - T_{out}) + \frac{UA}{V \rho C_p} (T_{coolant} - T_{out}) \right] + \frac{\Delta H}{\rho C_p} R_2 \quad (6)$$

جدول ۱- پارامترها و مقادیر اسمی CSTR

متغیر	مقدار	واحد
نرخ جریان حجمی (q)	۱۰	M <sup>3</sup> s <sup>-1</sup>
حجم CSTR (v)	۱۰	m <sup>3</sup>
آنتالپی واکنش (ΔH)	-۵×۱۰ <sup>۴</sup>	J mol <sup>-1</sup>
مساحت و HTC کلی (UA)	-۵×۱۰ <sup>۴</sup>	W m <sup>-2</sup> K <sup>-1</sup>
چگالی (ρ)	۱۰۰۰	kg m <sup>-3</sup>
ظرفیت گرمایی کلی (Cp)	۰/۲۹۳	J kg <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup>
عامل پیش نمایی (k0)	۷/۲×۱۰ <sup>۱۰</sup>	s <sup>-1</sup>
انرژی فعال سازی با ثابت گاز (E/R)	۸۷۵۰	J mol <sup>-1</sup>

#### ۴- نتیجه و بحث

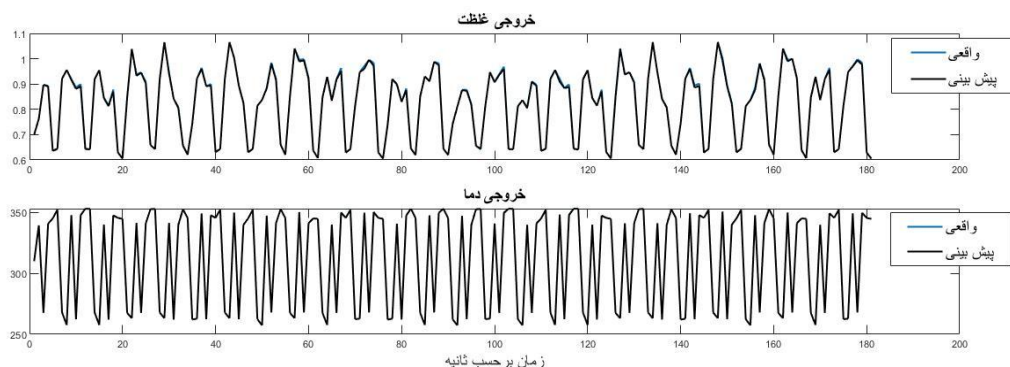
متغیرهای قابل دستکاری سیستم در سطوح مختلف تحریک تغییر می کنند، که باعث تغییر پاسخ متغیرهای الگوریتم می شود و نشان می دهد که توجه بیشتری به حالت گذرا فرآیند می شود. سیگنال توالی باینری شبه تصادفی (PRBS) کل پویایی فرآیند را با استفاده از تغییرات مثبت و منفی در اطراف منطقه مورد نظر عملیاتی، ثبت می کند [۱۹]. سیگنال ورودی به صورت سیگنال توالی باینری شبه تصادفی ارائه می شود، به طوری که غلظت خوراک (C<sub>Af</sub>) با ۱۵ ± درصد انحراف از مقادیر حالت پایدار، انحراف دمایی کل خنک کننده (T<sub>c</sub>) در ۱۵ ± درصد تحمل مقادیر حالت پایدار و انحراف دمایی کل خوراک (T<sub>f</sub>) در ۱۵ ± درصد انحراف از مقادیر حالت پایدار در طول شبیه سازی ها در نظر گرفته شده اند. این مقادیر برای ۳۶۰ ثانیه اول هر ۱ ثانیه ذخیره می شدند.

برای ساختار سریال مدل GB، 1895 نمونه تولید می شود که از ۱۷۰۶ نمونه (۹۰ درصد) برای آموزش و اعتبار سنجی استفاده می شود و بقیه ۱۸۹ نمونه به عنوان نمونه آزمایش استفاده می شود. مدل های هیبریدی جعبه خاکستری که در بالا توضیح داده شد برای مثال موردی CSTR با هدف تجزیه و تحلیل عملکرد آنها در بین خودشان و همچنین با مدل جعبه سیاه و شناسایی یک مدل قوی آزمایش می شوند. جدول ۳ که به ترتیب مربوط به غلظت و دمایی خروجی سیستم هستند. برای تجزیه و تحلیل عملکرد سیستم،

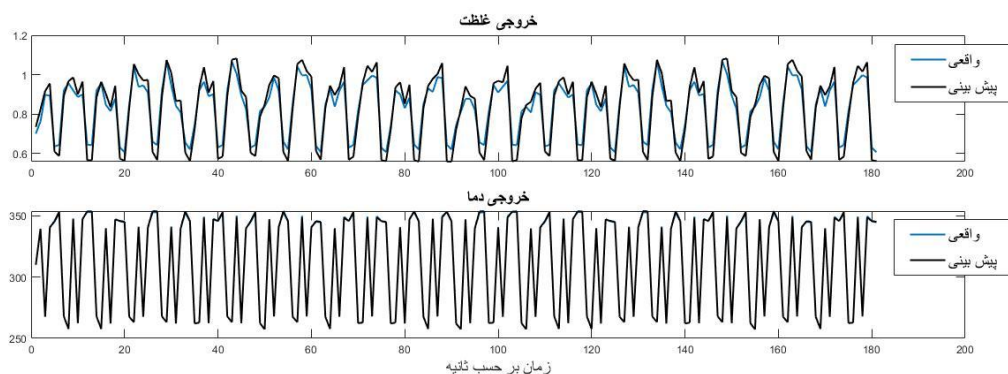
این جداول مقادیر مختلفی را از جمله ضریب تعیین  $R^2$  و ریشه میانگین مربعات خطا (RMSE) و میانگین خطای مطلق (MAE) را نشان می‌دهند [۲۰]. نتایج نشان می‌دهد که ساختار سریال مدل جعبه خاکستری بهترین عملکرد یعنی کمترین RMSE و MAE و نزدیکترین مقدار  $R^2$  به یک را دارد. شکل (۳) و (۴) ساختار سریال و موازی مدل جعبه خاکستری برای خروجی های غلظت و دما را نمایش می‌دهد.

جدول ۲- معیارهای سنجش خطا مدل جعبه سفید و ساختار سریال و موازی مدل جعبه خاکستری

معیار سنجش	خروجی غلظت			خروجی دما		
	ساختار موازی	ساختار سریال	جعبه سفید	ساختار موازی	ساختار سریال	جعبه سفید
RMSE	۰/۰۴۹۵	۰/۰۰۳۶	۰/۰۷۶۰	۰/۴۶۸۳	۰/۱۵۷۹	۰/۷۶۹۳
MAE	۰/۰۴۳۵	۰/۰۰۲۳	۰/۰۵۴۳	۰/۳۱۳۶	۰/۰۷۹۸	۰/۴۷۷۸
$R^2$	۰/۸۷۱۰	۰/۹۹۹۳	۰/۸۳۳۰	۰/۹۹۹۹	۱/۰۰۰۰	۰/۹۹۷۹



شکل ۳- ساختار سریال مدل جعبه خاکستری خروجی های غلظت و دما

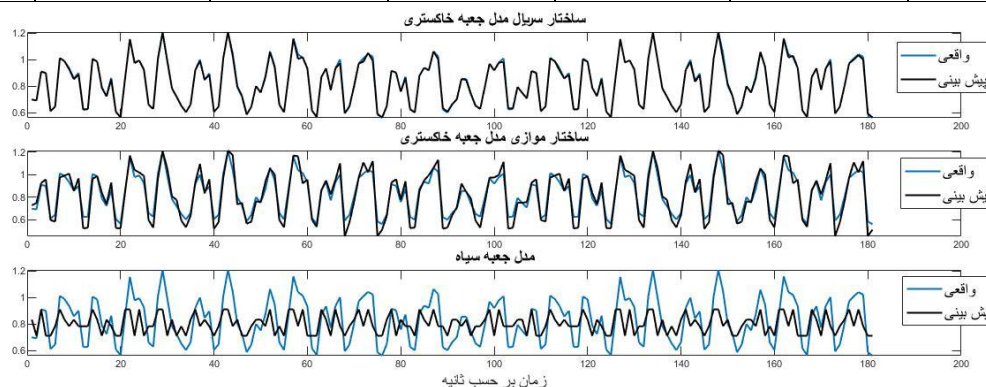


شکل ۴- ساختار موازی مدل جعبه خاکستری خروجی های غلظت و دما

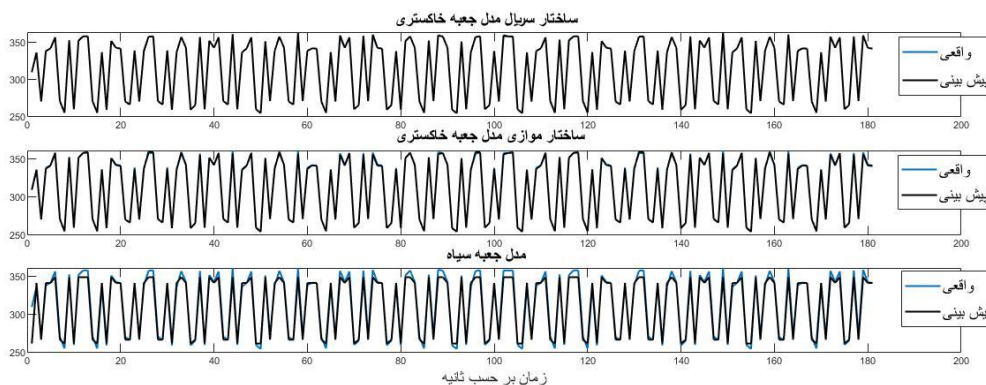
قابلیت های برون یابی ساختار سریال و موازی مدل جعبه خاکستری و مدل جعبه سیاه شبکه عصبی مصنوعی آزمایش شد و مقادیر RMSE و MAE و  $R^2$  مربوطه در جدول ۳ خلاصه شده است. برای این کار، در مجموعه داده آزمایشی، غلظت خوراک و دمای خوراک همه به ۱۵ درصد فراتر از مقادیر حداقل و حداکثر مربوطه در داده های آموزشی تعمیم داده شدند. نتایج برون یابی آشکار می سازد که عملکرد مدل سریال قابل قبول تری به نسبت ساختار موازی دارد. همچنین مطابق انتظار مدل های دارای ساختار جعبه خاکستری عملکرد جلوتری از مدل جعبه سیاه دارد. زیرا مدل های نزدیکی بیشتری به ساختار واقعی پروسه دارد علاوه بر این مدل های جعبه سیاه به شدت به داده هایی که در فرآیند آموزش دیده اند متکی هستند، تعجب آور نیست که بینیم با دور شدن ورودی ها از محدوده ای که برای آن آموزش داده شده، عملکرد بدتر می شود. شکل (۵) و (۶) ویژگی های برون یابی ساختار سریال و موازی مدل جعبه خاکستری و همچنین مدل جعبه سیاه شبکه عصبی مصنوعی را برای خروجی های دما و غلظت را نمایش می‌دهد.

جدول ۳ - خطای برون‌یابی مدل جعبه سفید و ساختار سریال و موازی مدل جعبه خاکستری خروجی های غلظت و دما

معیار سنجش	خروجی دما			خروجی غلظت		
	ساختار موازی	ساختار سریال	جعبه سیاه	ساختار موازی	ساختار سریال	جعبه سیاه
RMSE	۰/۰۶۰۵	۰/۰۰۸۰	۰/۱۴۵۳	۱/۰۳۵۹	۰/۳۷۶۱	۶/۲۲۳۸
MAE	۰/۰۴۹۴	۰/۰۰۴۰	۰/۱۲۵۱	۰/۷۳۶۳	۰/۱۴۲۸	۴/۳۸۰۱
R <sup>2</sup>	۰/۸۷۶۹	۰/۹۹۷۹	-۲/۹۱۵۴	۰/۹۹۹۴	۰/۹۹۹۹	۰/۹۷۵۸



شکل ۵- عملکرد برون‌یابی خروجی غلظت ساختار سریال و موازی مدل جعبه خاکستری و مدل جعبه سیاه



شکل ۶- عملکرد برون‌یابی خروجی دما ساختار سریال و موازی مدل جعبه خاکستری و مدل جعبه سیاه

### ۵- نتیجه گیری

در بسیاری از فرآیندهای شیمیایی، اندازه‌گیری حالت‌های مهم و عملیات اساسی سیستم دشوار است و نیاز به هزینه و زمان زیادی دارد. به همین دلیل، معمول است که سیستم را با در نظر گرفتن مفروضات و محدودیت‌هایی برای فرآیند و نوشتن معادلات موازنه جرم و انرژی توجیه کنیم. این مفروضات و محدودیت‌ها بیشتر به حالت‌های غیرخطی و رفتار سیستم دینامیکی مربوط می‌شوند. اگر بستری فراهم شود که علاوه بر معادلات مکانیکی حاکم بر سیستم، رفتارهای سخت زیربنایی و حالت‌های سخت سیستم را نیز توجیه کند، گام بزرگی در جهت مدل‌سازی فرآیندها برداشته خواهد شد. این کار چارچوبی را نشان می‌دهد که شامل کاربرد مدل‌های جعبه خاکستری برای ارائه یک پیش‌بینی دقیق و سازگار مدل است. سپس مدل‌های جعبه سفید اصلی به روش‌های مناسب برای تشکیل ساختارهای سریالی و موازی مدل‌های جعبه خاکستری استفاده می‌شوند. این چارچوب برای یک پروسه شیمیایی CSTR اعمال می‌شود. نقاط قوت و ضعف ساختارهای مدل مختلف از طریق مقایسه RMSE، MAE، R<sup>2</sup> مورد بحث قرار گرفت. نتایج نشان می‌دهد که مدل پیشنهادی می‌تواند به بهبود دقت پیش‌بینی کلی سیستم‌های پیچیده کمک کند به طوری که ساختار سریال مدل جعبه خاکستری کمترین RMSE و MAE و نزدیکترین R<sup>2</sup> به یک را دارد. ساختار سریال و موازی مدل جعبه خاکستری مورد بررسی قرار داده شد و نتایج نشان داد زمانی که مدل جعبه سفید جاسازی شده در مدل جعبه خاکستری دقیق باشد ساختار سریال عملکرد بهتری از ساختار موازی خواهد داشت. همچنین ویژگی‌های برون‌یابی مدل جعبه



خاکستری و جعبه سیاه مقایسه شد که عملکرد ساختار سریال مدل جعبه خاکستری بهترین عملکرد را داشت. مدل جعبه سیاه عملکرد رضایت بخشی نداشت که نشان از این دارد که مدل جعبه سیاه فقط حول و حوش دیتاهایی که آموزش دیده اند عملکرد مناسبی دارد.

## ۶- مراجع

1. C.W. Ng, and M.A. Hussain, "Hybrid Neural Network-Prior Knowledge Model in Temperature Control of a Semi-Batch Polymerization Process", *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, Vol. 43, No. 4, 2004, pp. 559–570.
2. J.A. Wilson , and L.F.M. Zorzetto, "A Generalised Approach to Process State Estimation Using Hybrid Artificial Neural Network/Mechanistic Models", *Computer and Chemical Engineering*, Vol. 21, No. 9, 1997, pp. 951–963.
3. E. Molga, and R. Cherbański, "Hybrid First-Principle-Neural-Network Approach to Modelling of the Liquid–Liquid Reacting System", *Chemical Engineering and Science*, Vol. 54, No. 13–14, 1999, pp. 2467–2473.
4. H. J. L. Van Can, C. Hellinga , K. C. A. M. Luyben, J. J. Heijnen, and H. A. B. Te Braake,, "Strategy for Dynamic Process Modeling Based on Neural Networks in Macroscopic Balances", *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, Vol. 42, No. 12, 1996, pp. 3403–3418.
5. H.J. Kim, and K. S. Chang, "Hybrid Neural Network Approach in Description and Prediction of Dynamic Behavior of Chaotic Chemical Reaction Systems", *Korean Journal of Chemical Engineering*, Vol. 17, No. 6, 2000, pp. 696–703.
6. M.L. Thompson, and M. A. Kramer, "Modeling Chemical Processes Using Prior Knowledge and Neural Networks", *AIChE Journal*, Vol. 40, No. 8, 1994, pp. 1328–1340.
7. M.S.F. Bangi, and J. S.-I. Kwon, "Deep Hybrid Modeling of Chemical Process: Application to Hydraulic Fracturing", *Computer and Chemical Engineering*, Vol. 134, 2020, p. 106696.
8. N. Asprien , R. Böttcher, R. Pack, M.E. Stavrou, J. Höller, J. Schwientek, M. Bortz, "Gray-Box Modeling for the Optimization of Chemical Processes", *Chemie Ingenieur Technik*, Vol. 91, No. 3, 2019, pp. 305–313.
9. Von Stosch, Oliveira, M., R., J. Peres, and S.F.de Azevedo, "Hybrid Semi-Parametric Modeling in Process Systems Engineering: Past, Present and Future", *Computer Chemical Engineering*, Vol. 60, 2014, pp. 86–101.
10. T. Bohlin, "A Case Study of Grey Box Identification", *Automatica*, Vol. 30, No. 2, 1994, pp. 307–318.
11. H. A. Braake, H. J. L. Van Can, and H. B. Verbruggen, "Semi-Mechanistic Modeling of Chemical Processes with Neural Networks", *Engineering Application of Artificial Intelligent*, Vol. 11, No. 4, 1998, pp. 507–515.
12. I. Ahmad, A. Ayub, M. Kano, and I. I. Cheema, "Gray-Box Soft Sensors in Process Industry: Current Practice, and Future Prospects in Era of Big Data", *Processes*, Vol. 8, No. 2, 2020, pp. 2005–2008.
13. V. Cherkassky, and F.M. Mulier, *Learning from Data: Concepts, Theory, and Methods*, 2nd Edition, John Wiley & Sons, 2007.
14. M. S. F. Bangi, and J.S.II Kwon, "Deep Hybrid Modeling of Chemical Process: Application to Hydraulic Fracturing", *Computer and Chemical Engineering*, Vol. 134, 2020, p. 106696.
15. A. Mamudu, Khan, F. S. Zendehboudi, and S. Adedigba, "A Hybrid Intelligent Model for Reservoir Production and Associated Dynamic Risks", *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, Vol. 83, 2020, p. 103512.
16. N. Patel, Nease, J., S. Aumi, C. Ewaschuk , J. Luo, and P. Mhaskar, "Integrating Data-Driven Modeling with First-Principles Knowledge", *Industrial Engineering Chemical Research*, Vol. 59, No. 11, 2020, pp. 5103–5113.
17. D. Ghosh, E. Hermonat, P. Mhaskar, S. Snowling, and R. Goel, "Hybrid Modeling Approach



Integrating First-Principles Models with Subspace Identification", Industrial Engineering Chemical Research, Vol. 58, No. 30, 2019, pp. 13533–13543.

18. Y. Chen, and M. Ierapetritou, "A Framework of Hybrid Model Development with Identification of Plant-Model Mismatch", AIChE Journal, Vol. 66, No. 10 2020.

19. E.S. Yadav, and T. Indiran, "PRBS Based Model Identification and GPC PID Control Design for MIMO Process", Matererial Today Process, Vol. 17, 2019, pp. 16–25.

20. M.S. Zaghloul, R.A. Hamza, O. T. Iorhemen,, and J. H. Tay , "Comparison of Adaptive Neuro-Fuzzy Inference Systems (ANFIS) and Support Vector Regression (SVR) for Data-Driven Modelling of Aerobic Granular Sludge Reactors", Journal of Environment Chemical Engineering, Vol. 8, No. 3, 2020, p. 103742.

## پیوست (۱)

فهرست نمادها و نشانه‌ها	
CSTR	راکتور توام با همزن دائم
ANN	شبکه عصبی مصنوعی
WB	مدل جعبه سفید
BB	مدل جعبه سیاه
GB	مدل جعبه خاکستری
R	نرخ واکنش
q	نرخ جریان حجمی ( $M^3 s^{-1}$ )
V	حجم ( $m^3$ )
$\Delta H$	آنتالپی واکنش ( $J mol^{-1}$ )
UA	مساحت و HTC کلی ( $W m^{-2} K^{-1}$ )
$\rho$	چگالی ( $kg m^{-3}$ )
$C_p$	ظرفیت گرمایی کلی ( $J kg^{-1} K^{-1}$ )
$k_0$	عامل پیش‌نمایی ( $s^{-1}$ )
$E/R$	انرژی فعال‌سازی با ثابت گاز ( $J mol^{-1}$ )
$R^2$	ضریب تعیین
RMSE	ریشه میانگین مربعات خطا
MAE	میانگین خطای مطلق