

بهبود عملکرد مدل جعبه سفید یک پلنت دینامیکی غیرخطی با استفاده از رگرسیون بردار پشتیبان

بهینه شده به عنوان مدل جعبه سیاه

محمود قاسمی^۱، میر ابوالفضل مختاری^{۲*}

۱- کارشناسی ارشد، دانشگاه صنعت نفت، اهواز دانشگاه صنعت نفت Mahmudghasemi1995@gmail.com

۲- استادیار، دانشگاه افسری امام علی (ع)، تهران دانشگاه امام علی (ع) S.abolfazl.mokhtari@aut.ac.ir

*نویسنده مخاطب: میر ابوالفضل مختاری

چکیده

در مدل‌سازی فرآیندهای صنعتی، به دلیل توانایی مدل‌سازی رفتارهای غیرخطی سیستم‌های دینامیکی، علاقه زیادی به استفاده از روش‌های یادگیری ماشین وجود دارد. هدف از مدل‌سازی ترکیبی، استفاده از کارایی روش‌های مدل‌سازی مکانیکی ریاضی در کنار به کار گرفتن مزایای مدل‌سازی یادگیری ماشین است. مدل‌سازی جعبه خاکستری سعی می‌کند رفتارهای اساسی و زیربنایی سیستم را از معادلات مکانیکی موجود در سیستم استخراج کند و از ویژگی‌های مدل‌سازی داده محور برای رفتارهای پویا و دشوار سیستم استفاده کند. در این مقاله، نمونه ای از تکنیک‌های جعبه خاکستری بر اساس رگرسیون بردار پشتیبان تشریح شده است. بخش‌های شناخته‌شده سیستم با تکنیک‌های جعبه سفید مدل‌سازی می‌شوند و بخش‌های ناشناخته بر اساس مدل‌سازی جعبه سیاه هستند. روش ارائه شده برای یک راکتور مخزن همزن پیوسته اعمال می‌شود. نتایج به دست آمده در آرایش سریال و موازی مدل جعبه خاکستری با روش SVR معمولی، SVR بهینه‌سازی شده با الگوریتم ژنتیک و SVR بهینه‌سازی شده با بهینه‌سازی ازدحام ذرات مقایسه شد، که در آن یافته‌ها تایید کرد که تکنیک ارائه شده نسبتاً توانمندتر و قوی‌تر است. همچنین برای نشان دادن توانایی مدل پیشنهادی خواص برون‌یابی مدل مورد بررسی قرار گرفت.

واژه‌های کلیدی: رگرسیون ماشین بردار پشتیبان - مدل جعبه خاکستری - ویژگی‌های برون‌یابی - راکتور توام با همزن دائم - مدل‌سازی دینامیک غیرخطی

۱- مقدمه

یک فرآیند صنعتی شامل مجموعه ای از عملیات است که در آن ورودی‌های کم ارزش به خروجی‌های مورد نظر تبدیل می‌شوند [۱]. مهندسی کنترل فرآیند به دنبال به حداکثر رساندن کیفیت خروجی‌های فرآیند با دستکاری ورودی‌های فرآیند است. با این حال، اصول اساسی سیستم اغلب از قبل شناخته شده نیست و نیاز به آزمایش گسترده دارد. بیشتر اوقات سیستم ساده نیست و به جای یک ورودی و یک خروجی چندین متغیر وجود دارد [۲]-[۴]. با توجه به وجود اثرات و ویژگی‌های ناشناخته و همچنین عدم قطعیت‌های تصادفی در سیستم، استخراج یک مدل مناسب برای اهداف بعدی ما مانند کنترل، نظارت، بهینه‌سازی و ... بسیار مفید است [۵]، [۶].

برای توسعه یک مدل فرآیند را می‌توان به عنوان دانش تبدیل شده به شکل ریاضی در نظر گرفت. در فرآیندهای صنعتی قوانین تعادلی، مانند تعادل مواد و انرژی، یک چارچوب مدل‌سازی کاربردی کلی را نشان می‌دهند که باید با جزئیات فرآیندی خاص تکمیل شود و البته فرمول‌بندی این جزئیات خاص بسیار دشوار و زمانبر است. زیرا که همه جزئیات قابل مشاهده نیستند و دینامیک ذاتی سیستم و زمینه چند متغیره مدل‌سازی را در عمل پیچیده می‌کند [۷]-[۱۰].

یک روش مدل‌سازی متفاوت که عملکرد بالایی دارد و نیازی به دانش مکانیکی در مورد سیستم ندارد، مدل‌های داده محور هستند. این رویکرد صرفاً بر داده‌های تجربی متکی است و از ریاضیات برای توصیف داده‌ها و پیش‌بینی روابط آنها استفاده می‌کند. اما عیب این مدل‌سازی در مقایسه با مدل‌های مکانیکی، مدل‌های مبتنی بر داده هیچ تفسیر فیزیکی ندارند و کیفیت توصیفی آن‌ها فقط در مجاورت مناطقی که آموزش داده شده‌اند، خوب عمل می‌کنند [۱۱]، [۱۲].

با ترکیب مدل‌سازی مکانیکی و مدل‌های صرفاً مبتنی بر داده، یک مدل ترکیبی به دست می‌آید برخی از مزایای این نوع مدل‌سازی عبارتند از: پیش‌بینی مدل بسیار دقیق‌تر از مدل‌های مکانیکی است و در مواردی که از تعداد نمونه‌های مشابه برای آموزش استفاده می‌شود مدل‌های جعبه خاکستری بهتر از مدل‌های مبتنی بر داده کار می‌کنند. همچنین هزینه ایجاد یک مدل جعبه خاکستری از مدل‌سازی مکانیکی کمتر است و ویژگی‌های برون‌یابی بسیار بهتر از مدل‌های مبتنی بر داده دارد. استفاده از مدل‌های ترکیبی برای نظارت و کنترل فرآیندها از زمان کشف ترویج شده است، به عنوان مثال [۱۳]-[۱۹].

مدل‌های GB به سه نوع معماری مدل به نام‌های موازی، سریالی و ترکیبی طبقه‌بندی می‌شوند. در ساختار موازی، مدل مکانیکی سعی می‌کند رفتار سیستم را به تصویر بکشد در حالی که مدل داده محور پیش‌بینی خطای رزیدو را که در مدل مکانیکی و داده‌های واقعی وجود دارد، توصیف می‌کند [۲۰]. ساختار سریال زمانی مناسب است که اگرچه دانش دقیقی در مورد مکانیسم‌های دشوار و اساسی برای توصیف ریاضی مدل وجود ندارد، اما تعداد کافی از داده‌های فرآیند برای استنتاج الگوهای زیربنایی وجود دارد [۲۱].

زیر برآورده شود: به حداکثر تعداد نسل رسیده باشد یا همان راه حل برای تعداد معینی از نسل ها تغییر نکرده باشد. (۴) مکانیسم الیتسم: به منظور محافظت از تکثیر کروموزوم نخبه، GA از تکنیک نخبه گرای استفاده می کند. این تکنیک، افراد $P\%$ را انتخاب می کند که دارای بیشترین ارزش تناسب اندام هستند تا به فرزندان نسل بعدی تبدیل شوند، در حالی که افراد باقی مانده عملیات ژنتیکی را که انتخاب، متقاطع و جهش هستند، اجرا می کنند. (۵) انتخاب: انتخاب روشی است که در آن کروموزوم های مناسب از جمعیت والدین برای نسل بعدی انتخاب می شوند. چند کروموزوم به طور تصادفی انتخاب می شوند تا مقادیر تناسب اندام خود را تولید کنند. کروموزوم هایی که بیشترین مقدار تناسب را دارند انتخاب خواهند شد. این مرحله تا زمانی تکرار می شود که تعداد کروموزوم های انتخاب شده با تعداد جمعیت یکسان شود. (۶) متقاطع: متقاطع یک تابع ژنتیکی است که برای تغییر برنامه ریزی یک کروموزوم یا کروموزوم از یک نسل به نسل دیگر استفاده می شود. (۷) جهش: جهش یک تکنیک تولید فعال کننده ژنتیکی است که برای حفظ گونه های ژنتیکی از یک نسل از جمعیت کروموزوم های الگوریتم ژنتیک به نسل دیگر استفاده می شود.

۲-۲-۲ بهینه سازی ازدحام ذرات

بهینه سازی ازدحام ذرات (PSO) یکی از روش های هوش جمعی و تکنیک های بهینه سازی است که در سال ۱۹۹۵ معرفی شد [۳۰]. فرض کنید اندازه جمعیت N است. برای ذره i ($0 \leq i \leq N$) در بعد فضای D ، موقعیت فعلی به صورت $x_i = (x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{iD})$ و سرعت فعلی به صورت $v_i = (v_{i1}, v_{i2}, \dots, v_{iD})$ در نظر گرفته می شود. در طول فرآیند بهینه سازی، سرعت و موقعیت هر ذره در هر مرحله با استفاده از معادلات ۲ و ۳ به روز می شود.

$$v_{i,j}(t+1) = wv_{i,j}(t) + c_1 R_{i,j}^1 (p_{i,j}(t) - x_{i,j}(t)) + c_2 R_{i,j}^2 (G_j(t) - x_{i,j}(t)) \quad (2)$$

$$x_i(t+1) = x_i(t) + v_i(t+1) \quad (3)$$

جایی که v_{ij} بعد j ام سرعت ذره i و x_{ij} بعد j ام موقعیت ذره i است. ضرایب c_1 ، c_2 و w وزن اینرسی نامیده می شود و می توان آن را یک عدد ثابت یا شتاب R^1 ، R^2 و دو عدد تصادفی با توزیع یکنواخت در بازه $[0, 1]$ هستند. w وزن اینرسی نامیده می شود و می توان آن را یک عدد ثابت یا یک تابع مثبت در نظر گرفت [۶۵]. $p_i(t)$ بهترین موقعیتی است که ذره تا به حال داشته است و $G(t)$ بهترین موقعیتی است که تاکنون توسط کل جمعیت به دست آمده است. $p_i(t)$ را می توان با استفاده از رابطه زیر محاسبه کرد:

$$(4)$$

$$P_i(t+1) = \begin{cases} p_i(t), & \text{if } f(x_i(t+1)) \geq f(p_i(t)) \\ x_i(t+1), & \text{if } f(x_i(t+1)) \leq f(p_i(t)) \end{cases}$$

جایی که f به عنوان صلاحیت بردار x در نظر گرفته می شود. همچنین بهترین موقعیت سراسری را می توان با استفاده از معادله ۵ محاسبه کرد:

$$G(t+1) = \arg \min_{p_i} f(p_i(t+1)), 1 \leq i \leq N \quad (5)$$

۳- مطالعه موردی

۲- متدولوژی

۲-۱- رگرسیون ماشین پشتیبان (SVR)

ماشین های بردار پشتیبان (SVMs) مجموعه ای از روش های یادگیری نظارت شده مرتبط هستند که در طبقه بندی داده ها و تحلیل رگرسیون با تجزیه و تحلیل داده ها و شناسایی الگوها استفاده می شوند. برخلاف شبکه های عصبی، ماشین های بردار پشتیبان مشکلی برای گیر کردن در حداقل های محلی تابع خطا نخواهند داشت. رایج ترین کاربرد SVM ها نام دارد که عملکرد تعمیم خوبی دارد [۲۳]، [۲۴]. SVR ها مزایای زیادی دارند، از جمله با نمونه های محدود داده، می توانند با موفقیت ساختار شبکه بهینه را با توجه به خطای تعمیم به دست آورند. با انتخاب پارامترهای صحیح در برخی موارد، می تواند عملکرد بهتری نسبت به رویکردهای آماری کلاسیک به دست آورد و به طور گسترده در فرآیندهای شیمیایی مورد استفاده قرار گرفته است [۲۵]. در SVR ها انتخاب تابع کرنل گام مهمی در تعیین فضای ویژگی است [۲۶]. در این مقاله به دلیل ماهیت غیرخطی و غیرقابل تفکیک داده ها، تابع پایه شعاعی (RBF) برای استفاده به عنوان تابع کرنل انتخاب شده است. RBF به صورت زیر تعریف می شود:

$$k(x, x^T) = \exp(-\|x - x^T\|^2 / 2KS^2) \quad (1)$$

که در آن KS یک ثابت است که عرض RBF را مشخص می کند. عملکرد SVR به شدت به تنظیم پارامترهایی از جمله پارامتر جریمه BC ، تابع ضرر غیر حساس $Epsilon$ و پارامتر تابع هسته KS بستگی دارد. سپس نحوه انتخاب این پارامترها یک مسئله اصلی برای اعمال SVR است. تکنیک های زیادی مانند الگوریتم ژنتیک (GA)، بهینه سازی ازدحام ذرات (PSO) و غیره پیشنهاد شده است [۲۷]. در این مقاله، GA و PSO برای تنظیم پارامترهای SVR و پیش بینی قابلیت اطمینان انجام شده اند.

۲-۲- بهینه سازی

یک مسئله بهینه سازی معمولاً شامل انتخاب مقادیر ورودی صحیح در محدوده مجاز برای کمینه یا حداکثر کردن یک تابع واقعی است. در بهینه سازی با انتخاب توابع هدف، هدف یافتن مقادیر بهترین موجود در میان حوزه ورودی است که این نظریه طیف وسیعی از ریاضیات کاربردی را پوشش می دهد. یک تابع هدف که باید با کمینه سازی یا حداکثر کردن بهینه می شد، مجموعه ای از متغیرهایی که می توان برای بهینه سازی هدف دستکاری کرد، و مجموعه ای از محدودیت هایی که برای متغیرها اعمال می شود و آنها را محدود می کند، سه عنصر اساسی مسائل بهینه سازی هستند [۲۸].

۲-۲-۱ بهینه سازی الگوریتم ژنتیک

الگوریتم ژنتیک مبتنی بر ایده های تکاملی داروین در انتخاب طبیعی است و یک الگوریتم جستجوی تطبیقی ابتکاری است. مراحل GA به شرح زیر است [۲۹]: (۱) مقداردهی اولیه: در ابتدای الگوریتم، جمعیت اولیه به طور تصادفی تولید می شود. اندازه جمعیت به سختی مشکل بستگی دارد، اما معمولاً شامل صدها راه حل ممکن است. (۲) ارزیابی: پس از مرحله اولیه سازی، هر کروموزوم با استفاده از یک تابع هدف تعریف شده توسط کاربر ارزیابی می شود. مقدار حاصل از این تابع برای هر رشته، نشانه ای از بهبود طراحی مشکل و احتمال ادامه وجود بازتولید در GA است. (۳) بررسی معیارهای پایان: الگوریتم در صورتی به نتیجه می رسد که یکی از دو شرط

(۱۱)

$$\frac{dT_{out}}{dt} = \left[\frac{q}{V} (T_{feed} - T_{out}) + \frac{UA}{V \rho C_p} (T_{coolant} - T_{out}) \right] + \frac{\Delta H}{\rho C_p} R_{order2}$$

جدول با قلم نازنین ۸ و عنوان آن با ۹ پرنگ وسط چین (حروف انگلیسی یک سایز کوچکتر) تایپ می‌شود. بهتر است جدول در داخل متن و در جایی که به آن ارجاع می‌شود، درج گردد. همه اعداد در جدول باید به صورت فارسی و وسط چین تایپ شوند. هر جدول را با یک سطر خالی فاصله از متن قبل و بعد آن قرار دهید. عرض کلی جدول باید برابر عرض متن باشد (۸۰ میلی‌متر). جدول ۱ منطبق با این دستورالعمل می‌باشد. لازم به ذکر است که باید از خطوط عمودی پرهیز شود و فقط خطوط افقی مشابه با نمونه استفاده گردد.

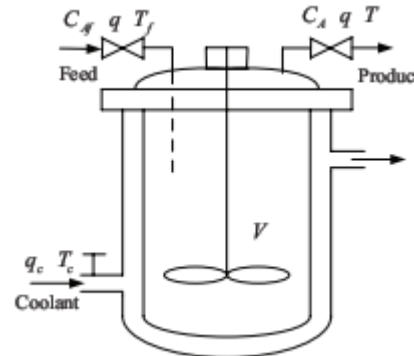
جدول ۱- پارامترها و مقادیر اسمی CSTR

واحد	مقدار	متغییر
M3 s-1	۱۰	نرخ جریان حجمی (q)
m3	۱۰	حجم CSTR (V)
J mol-1	-۵*۱۰۴	آنتالپی واکنش (ΔH)
W m-2 K-1	-۵*۱۰۴	مساحت و HTC کلی (UA)
kg m-3	۱۰۰۰	چگالی (ρ)
J kg-1 K-1	۰/۲۹۳	ظرفیت گرمایی کلی (Cp)
s-1	۷/۲*۱۰۱۰	عامل پیش نمایی (k0)
J mol-1	۸۷۵۰	انرژی فعال سازی یا ثابت گاز (E/R)

۳- نتایج و بحث

ورودی‌ها یا متغیرهای قابل دستکاری در سطوح مختلف برانگیختگی تغییر می‌کنند، که باعث تغییر پاسخ متغیرهای الگوریتم می‌شود و نشان می‌دهد که توجه بیشتری به حالت گذرا فرآیند می‌شود. سیگنال توالی شبه باینری تصادفی (PRBS) کل پویایی فرآیند را با استفاده از تغییرات مثبت و منفی در اطراف منطقه مورد نظر عملیاتی، ثبت می‌کند [۳۷]. سیگنال ورودی PRBS به صورت غلظت خوراک (CAf) (حول ۷۰ ±) از مقادیر حالت پایدار)، انحراف دمای خنک کننده کل (Tc) (در ۱۵ ± درصد حول مقادیر حالت پایدار) و انحراف دمای کل خوراک (Tf) (در ۱۵ ± درصد حول مقادیر حالت پایدار) در طول شبیه‌سازی‌هاست. این مقادیر برای ۳۶۰ ثانیه اول هر ۱ ثانیه ذخیره می‌شدند. شکل ۲ سیگنال‌های ورودی مورد استفاده برای جمع‌آوری داده‌ها را نشان می‌دهد.

راکتورها نقش مهمی در تولید و تبدیل محصولات فرآیند شیمیایی دارند [۳۲]. یک راکتور مخزن همزن پیوسته گرمازا (CSTR) به عنوان مثال موردی برای نشان دادن کارایی روش پیشنهادی استفاده می‌شود. در این راکتور محصول A در فاز مایع به محصول B تبدیل می‌شود. جریان خوراک ورودی و جریان محصول یکسان در نظر گرفته می‌شوند. یک ژاکت در اطراف راکتور برای کنترل دمای راکتور استفاده می‌شود. دمای تغذیه و غلظت ورودی A و دمای جریان ژاکت ورودی به عنوان ورودی‌های دستکاری شده برای دستیابی به خروجی مورد نظر اعمال می‌شود. دما و غلظت محصول A خروجی‌های سیستم هستند. با غلظت خروجی A، غلظت B به راحتی به دست می‌آید [۳۳]، [۳۴]. پس از اعمال تعادل انرژی و جرم، معادله ۱-۳ به عنوان اولین مدل اصلی به دست می‌آید. معادله ۱ عبارت معادله نرخ است، اولین عبارت‌ها در معادلات (۲) و (۳) جریان ورودی و خروجی است و اصطلاح دوم تولید یا مصرف راکتور در اثر واکنش را توصیف می‌کند. معادلات ۴-۶ با نرخ واکنش مرتبه دوم برای استخراج داده‌های فرآیند شبیه‌سازی شده استفاده می‌شود [۳۵]. مقادیر اسمی پارامترها و متغیرهای سیستم در جدول ۱ آورده شده است.



شکل ۱- نمودار شماتیک CSTR [۳۵]

$$R_{Order1} = k_0 e^{-\frac{E}{RT}} C_{Aout} \quad (۶)$$

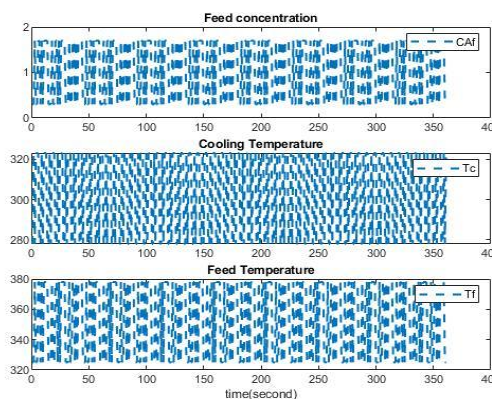
$$\frac{dC_{Aout}}{dt} = \frac{q}{V} (C_{Afeed} - C_{Aout}) - R_{order1} \quad (۷)$$

$$\frac{dT_{out}}{dt} = \left[\frac{q}{V} (T_{feed} - T_{out}) + \frac{UA}{V \rho C_p} (T_{coolant} - T_{out}) \right] + \frac{\Delta H}{\rho C_p} R_{order1}$$

$$R_{order2} = k_0 e^{-\frac{E}{RT}} C_{Aout}^2 \quad (۹)$$

$$\frac{dC_{Aout}}{dt} = \frac{q}{V} (C_{Afeed} - C_{Aout}) - R_{order2} \quad (۱۰)$$

میانگین مربعات خطا (RMSE) و میانگین خطای مطلق (MAE) نشان می‌دهند [۲۸]. از این جداول می‌توان دریافت که نزدیکترین مقدار R2 به یک و کمترین مقادیر RMSE و MAE به صفر با استفاده از آرایش سریال FP-SVRPSO به دست آمده است. به عنوان مثال مدل FP-SVRPSO در حالت سری برای خروجی غلظت مقادیر خطای R2، RMSE و MAE را به ترتیب برابر ۰/۰۰۲۸، ۰/۰۰۲۴ و ۰/۹۹۹۹ و همچنین برای خروجی دما ۰/۰۶۲۶، ۰/۰۴۶۱ و ۱/۰۰۰ به دست آمده است. علاوه بر این، نتایج نشان می‌دهند که اگرچه FP-SVRPSO و FP-SVRGA نزدیک به یکدیگر عمل می‌کنند، FP-SVR قابل اعتماد نیست و عملکرد SVR به شدت به پارامترهای آن وابسته است. از شکل ۴ و شکل ۵ می‌توان دریافت که مدل FP-SVRPSO خروجی‌ها را با دقت خوبی پیش بینی می‌کند. به طوری که نمودار آبی رنگ دیتاهای واقعی فرایند و نمودار نارنجی رنگ مدل تخمین زده شده را نشان می‌دهد. شکل ۴ و ۵ نشان می‌دهند خروجی‌های غلظت و دما به خوبی توانسته‌اند دیتاهای واقعی را برای مدل جعبه خاکستری پیشنهادی دنبال نمایند.

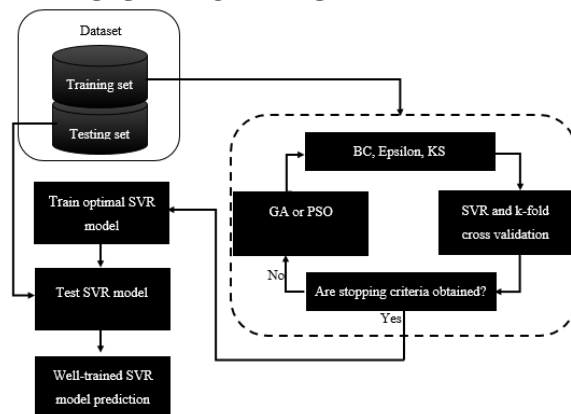


شکل ۲- سیگنال‌های ورودی PRBS: غلظت تغذیه (CA)، دمای خنک کننده (Tc) و دمای تغذیه (Tf)

برای ساختار سریال مدل GB، 1895 نمونه تولید می‌شود که ۱۷۰۶ نمونه (۹۰ درصد) برای آموزش و اعتبار سنجی استفاده می‌شود و بقیه ۱۸۹ نمونه به عنوان نمونه آزمایش استفاده می‌شود. GA و PSO برای جستجوی پارامترهای بهینه شده در SVR اعمال می‌شوند. پس از یک سری محاسبات، GA و PSO می‌توانند مقادیر بهینه را بگیرند. نمودار جهت بهینه‌سازی پارامترهای SVR (KS, BC, Epsilon) با بهینه‌سازی ازدحام ذرات و الگوریتم ژنتیک در شکل ۳ نشان داده شده است. پس از پیش پردازش داده‌ها، داده‌های آموزشی به حلقه بهینه‌سازی ارسال می‌شود. در این حلقه از الگوریتم GA یا PSO برای بهینه‌سازی پارامترهای SVR استفاده می‌شود. پس از به دست آمدن معیارهای توقف، الگوریتم از حلقه خارج شده و پارامترهای بهینه به SVR تحویل داده می‌شود. سپس مجموعه داده‌های تست اعمال می‌شود و نتایج پیش بینی می‌شود.

جدول ۲- پارامترهای SVR

پارامترهای SVR	SVR Trail & Error		
	سریال	موازی CA	موازی T
BC	۱۰۵	۱۰۵	۱۰۵
Epsilon	۰/۰۷	۰/۰۷	۰/۰۷
KS	۱۸/۵	۱۸/۵	۱۸/۵
پارامترهای SVR	SVRPSO		
	سریال	موازی CA	موازی T
BC	۱۷۳/۰۸۷	۲۲/۱۱۳۹	۲۸/۹۶۶۸
Epsilon	۰/۰۱	۰/۴۹۶۰	۰/۲۴۷۶
KS	۱/۳۰۵۹	۰/۶۲۹۹	۰/۴۸۱۵
پارامترهای SVR	SVRGA		
	سریال	موازی CA	موازی T
BC	۴۲/۹۱۶۴	۵/۸۹۷۵	۶۸/۳۲۴۳
Epsilon	۰/۰۱	۰/۲۹۹۲	۰/۱۸۶۸
KS	۱/۲۹۵۵	۷/۶۵۹۴	۱/۰۵۵۰



جدول ۳- عملکرد خروجی غلظت CSTR با مدل جعبه خاکستری

	FP_SVR	FP_SVRPSO	FP_SVRGA	
	سری موازی	سری موازی	سری موازی	
RMSE	۰/۰۲۲۳	۰/۰۲۲۳	۰/۰۲۲۳	۰/۰۰۳۲
MAE	۰/۰۱۶۴	۰/۰۱۶۴	۰/۰۱۶۳	۰/۰۰۲۷
R2	۰/۹۹۵۶	۰/۹۹۵۶	۰/۹۹۹۹	۰/۹۹۹۹

شکل ۳- بهینه‌سازی پارامترهای SVR با استفاده از GA و PSO

مدل‌های هیبریدی GB که در بالا توضیح داده شد برای مثال موردی CSTR با هدف تجزیه و تحلیل عملکرد آنها در بین خود و همچنین با مدل BB و شناسایی یک مدل قوی آزمایش می‌شوند. جدول ۲ مقدار بهینه پارامتر SVR را برای مدل سازی GB با استفاده از دو الگوریتم فراابتکاری و آزمون و خطا نشان می‌دهد. نتایج مدل GB پیشنهادی شامل رگرسیون بردار پشتیبان معمولی (FP_SVR)، رگرسیون بردار پشتیبان بهینه سازی شده با PSO (FP_SVRPSO) و رگرسیون بردار پشتیبان بهینه سازی شده با GA (FP_SVRGA) در جدول ۳ و جدول ۴ که مربوط به خروجی غلظت و خروجی دما است، به ترتیب مقایسه شده است. برای تحلیل عملکرد سیستم، این جداول مقادیر مختلفی را برای ضریب تعیین R2، ریشه

جدول ۴- عملکرد خروجی دما CSTR با مدل جعبه خاکستری

	FP_SVR	FP_SVRPSO	FP_SVRGA	
	سری موازی	سری موازی	سری موازی	
RMSE	۰/۰۳۶۱	۰/۳۱۲۷	۰/۰۶۲۶	۰/۰۶۰۳۲
MAE	۰/۰۲۰۲	۰/۴۶۲۴	۰/۲۳۱۰	۰/۰۴۴۸
R2	۰/۹۹۹۷	۰/۹۹۹۳	۰/۹۹۹۸	۱/۰۰۰

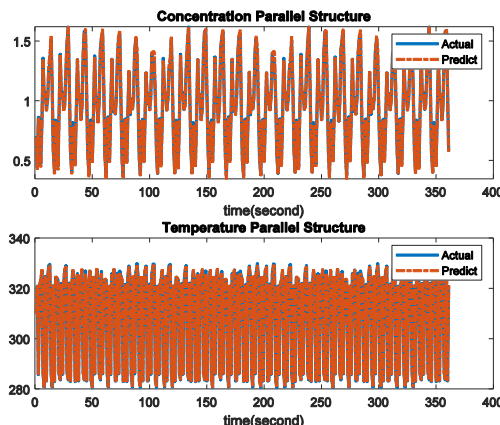
به صفر و نزدیک ترین R2 به یک عملکرد بهتری نشان داد. همچنین مشاهده می شود که عملکرد SVR به شدت به پارامترهای وابسته است و مدل FP-SVR که پارامترهای آن با آزمون و خطا تخمین زده شده بود قابل اعتماد نیست. عملکرد مدل های FP-SVRGA و FP-SVRPSO نزدیک به یکدیگر و قابل قبول بود و نشان می دهد که الگوریتم ژنتیک و الگوریتم بهینه سازی ازدحام ذرات به خوبی عمل کرده اند.

جدول ۲- معادل فارسی کلمات و علائم انگلیسی در مراجع

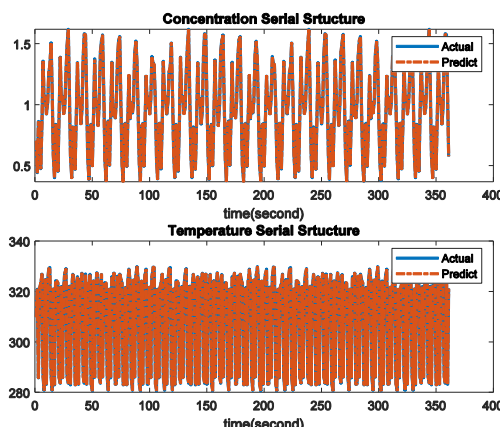
فارسی	انگلیسی
دمای تغذیه	Tf
غلظت تغذیه	Cf
دمای خنک کننده	Tc
مدل اصل اول یا مکانیکی	FP
رگرسیون بردار پشتیبان	SVR
الگوریتم ژنتیک	GA
الگوریتم ازدحام ذرات	PSO
مدل جعبه خاکستری	GB
مدل جعبه سیاه	BB
مدل جعبه سفید	WB

۲- مراجع

- [1] C. W. Ng and M. A. Hussain, "Hybrid neural network - prior knowledge model in temperature control of a semi-batch polymerization process," *Chem. Eng. Process. Process Intensif.*, vol. 43, no. 4, pp. 559-570, 2004, doi: 10.1016/S0255-2701(03)00109-0.
- [2] E. Akkari, S. Chevallier, and L. Boillereaux, "A 2D non-linear 'grey-box' model dedicated to microwave thawing: Theoretical and experimental investigation," *Comput. Chem. Eng.*, vol. 30, no. 2, pp. 321-328, 2005, doi: 10.1016/j.compchemeng.2005.09.008.
- [3] F. Larachi and C. Olsen, "Hybrid First-Principle / Neural Network Correlations for Thermoelectric Transport Coefficients in Gold-Silver Solutions from Bulk to Nanometer Scale," vol. 5, no. December 2012, pp. 16-25, 2013.
- [4] K. Worden *et al.*, "Identification of pre-sliding and sliding friction dynamics: Grey box and black-box models," *Mech. Syst. Signal Process.*, vol. 21, no. 1, pp. 514-534, 2007, doi: 10.1016/j.ymsp.2005.09.004.
- [5] J. A. Wilson and L. F. M. Zorzetto, "A generalised approach to process state estimation using hybrid artificial neural network/mechanistic models," *Comput. Chem. Eng.*, vol. 21, no. 9, pp. 951-963, 1997.
- [6] E. Molga and R. Cherbański, "Hybrid first-principle-neural-network approach to modelling of the liquid-liquid reacting system," *Chem. Eng. Sci.*, vol. 54, no. 13-14, pp. 2467-2473, 1999.
- [7] M. J. Willis and M. von Stosch, "Simultaneous parameter identification and discrimination of the nonparametric structure of hybrid semi-parametric models," *Comput. Chem. Eng.*, vol. 104, pp. 366-376, 2017, doi:



شکل ۴- عملکرد ساختار موازی مدل جعبه خاکستری FP-SVRPSO برای دو خروجی دما و غلظت



شکل ۵- عملکرد ساختار سریال مدل جعبه خاکستری FP-SVRPSO برای دو خروجی دما و غلظت

۱- نتیجه گیری

در بسیاری از فرآیندهای شیمیایی، اندازه گیری حالت های مهم و عملیات اساسی سیستم دشوار است و به هزینه و زمان زیادی نیاز دارد. به همین دلیل، معمول است که سیستم را با در نظر گرفتن مفروضات و محدودیت هایی برای فرآیند و نوشتن معادلات موازنه جرم و انرژی توجیه کنیم. این مفروضات و محدودیت ها بیشتر به حالت های غیرخطی و رفتار سیستم دینامیکی مربوط می شوند. اگر بستری فراهم شود که علاوه بر معادلات مکانیکی حاکم بر سیستم، رفتارهای سخت زیربنایی و حالت های سخت سیستم را نیز توجیه کند، گام بزرگی در جهت مدل سازی فرآیندها برداشته خواهد شد. اگر رفتار کلی فرآیند توسط مدل جعبه سفید تعیین شود و رفتارهای پویا و غیرخطی فرآیند که شناسایی آنها توسط مدل جعبه سفید دشوار است توسط مدل جعبه سیاه مشخص شود، می توان به این هدف دست یافت. در این مقاله یک CSTR، به عنوان یک مثال موردی پر کاربرد نشان داده شد که اگر میزان تولید یا مصرف راکتور توسط SVR بهینه سازی شده تخمین زده شود، بهبود عملکرد در مدل کلی سیستم وجود خواهد داشت. ساختار سریال و موازی مدل جعبه خاکستری مقایسه شدند و برای این مورد، آرایش سریال FP-SVRPSO با نزدیک ترین RMSE و MAE

- [22] 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, pp. 2005–2008, 2020, doi: 10.3390/pr8020243.
- [23] G. Hu, Z. Mao, D. He, and F. Yang, "Hybrid modeling for the prediction of leaching rate in leaching process based on negative correlation learning bagging ensemble algorithm," *Comput. Chem. Eng.*, vol. 35, no. 12, pp. 2611–2617, 2011.
- [24] H. Liang, J. Zou, Z. Li, M. J. Khan, and Y. Lu, "Dynamic evaluation of drilling leakage risk based on fuzzy theory and PSO-SVR algorithm," *Futur. Gener. Comput. Syst.*, vol. 95, pp. 454–466, 2019.
- [25] P. Wang, C. Yang, X. Tian, and D. Huang, "Adaptive nonlinear model predictive control using an on-line support vector regression updating strategy," *Chinese J. Chem. Eng.*, vol. 22, no. 7, pp. 774–781, 2014.
- [26] N. Cristianini and J. Shawe-Taylor, *Support Vector Machines and other kernel-based learning methods*. Cambridge, 2004.
- [27] W. Chen, M. Hasanipناه, H. Nikafshan Rad, D. Jahed Armaghani, and M. M. Tahir, "A new design of evolutionary hybrid optimization of SVR model in predicting the blast-induced ground vibration," *Eng. Comput.*, vol. 37, no. 2, pp. 1455–1471, 2021, doi: 10.1007/s00366-019-00895-x.
- [28] G. C. Onwubolu and B. V. Babu, *New optimization techniques in engineering*, vol. 141. Springer, 2013.
- [29] J. H. Holland, *Adaptation in natural and artificial systems: an introductory analysis with applications to biology, control, and artificial intelligence*. MIT press, 1992.
- [30] R. Eberhart and J. Kennedy, "A new optimizer using particle swarm theory," in *MHS'95. Proceedings of the sixth international symposium on micro machine and human science*, 1995, pp. 39–43.
- [31] S.-F. Yuan and F.-L. Chu, "Fault diagnostics based on particle swarm optimisation and support vector machines," *Mech. Syst. Signal Process.*, vol. 21, no. 4, pp. 1787–1798, 2007.
- [32] N. Patel, J. Nease, S. Aumi, C. Ewaschuk, J. Luo, and P. Mhaskar, "Integrating Data-Driven Modeling with First-Principles Knowledge," *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 59, no. 11, pp. 5103–5113, 2020, doi: 10.1021/acs.iecr.0c00418.
- [33] D. Ghosh, E. Hermonat, P. Mhaskar, S. Snowling, and R. Goel, "Hybrid Modeling Approach Integrating First-Principles Models with Subspace Identification," *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 58, no. 30, pp. 13533–13543, 2019, doi: 10.1021/acs.iecr.9b00900.
- [34] H. J. Kim and K. S. Chang, "Hybrid neural network approach in description and prediction of dynamic behavior of chaotic chemical reaction systems," *Korean J. Chem. Eng.*, vol. 17, no. 6, pp. 696–703, 2000.
- [35] Z. Jianzhong and W. Qingchao, "Hammerstein model identification of continuous stirred tank reactor based on least squares support vector machines," *2009 Chinese Control Decis. Conf. CCDC 2009*, pp. 2858–2862, 2009, doi: 10.1109/CCDC.2009.5191576.
- [36] Y. Chen and M. Ierapetritou, "A framework of 10.1016/j.compchemeng.2017.05.005.
- [8] K. McBride, E. I. Sanchez Medina, and K. Sundmacher, "Hybrid Semi-parametric Modeling in Separation Processes: A Review," *Chemie Ing. Tech.*, vol. 92, no. 7, pp. 842–855, 2020.
- [9] V. V. Nair, H. Dhar, S. Kumar, A. K. Thalla, S. Mukherjee, and J. W. C. Wong, "Artificial neural network based modeling to evaluate methane yield from biogas in a laboratory-scale anaerobic bioreactor," *Bioresour. Technol.*, vol. 217, pp. 90–99, 2016, doi: 10.1016/j.biortech.2016.03.046.
- [10] G. Zahedi, A. Elkamel, A. Lohi, A. Jahanmiri, and M. R. Rahimpour, "Hybrid artificial neural network—First principle model formulation for the unsteady state simulation and analysis of a packed bed reactor for CO₂ hydrogenation to methanol," *Chem. Eng. J.*, vol. 115, no. 1–2, pp. 113–120, 2005.
- [11] D. C. Psychogios and L. H. Ungar, "A hybrid neural network-first principles approach to process modeling," *AIChE J.*, vol. 38, no. 10, pp. 1499–1511, 1992, doi: 10.1002/aic.690381003.
- [12] F. Luis and G. Moncayo, "No 主観的健康感を中心とした在宅高齢者における健康関連指標に関する共分散構造分析Title."
- [13] T. Bohlin, "A case study of grey box identification," *Automatica*, vol. 30, no. 2, pp. 307–318, 1994, doi: 10.1016/0005-1098(94)90032-9.
- [14] M. L. Thompson and M. A. Kramer, "Modeling chemical processes using prior knowledge and neural networks," *AIChE J.*, vol. 40, no. 8, pp. 1328–1340, 1994, doi: 10.1002/aic.690400806.
- [15] D. S. Lee, C. O. Jeon, J. M. Park, and K. S. Chang, "Hybrid neural network modeling of a full-scale industrial wastewater treatment process," *Biotechnol. Bioeng.*, vol. 78, no. 6, pp. 670–682, 2002, doi: 10.1002/bit.10247.
- [16] H. A. B. Te Braake, H. J. L. Van Can, and H. B. Verbruggen, "Semi-mechanistic modeling of chemical processes with neural networks," *Eng. Appl. Artif. Intell.*, vol. 11, no. 4, pp. 507–515, 1998, doi: 10.1016/s0952-1976(98)00011-6.
- [17] M. S. F. Bangi and J. S. II Kwon, "Deep hybrid modeling of chemical process: Application to hydraulic fracturing," *Comput. Chem. Eng.*, vol. 134, p. 106696, 2020, doi: 10.1016/j.compchemeng.2019.106696.
- [18] S. Estrada-Flores, I. Merts, B. De Ketelaere, and J. Lammertyn, "Development and validation of 'grey-box' models for refrigeration applications: A review of key concepts," *Int. J. Refrig.*, vol. 29, no. 6, pp. 931–946, 2006, doi: 10.1016/j.ijrefrig.2006.03.018.
- [19] 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," *AIChE J.*, vol. 42, no. 12, pp. 3403–3418, 1996, doi: 10.1002/aic.690421211.
- [20] M. L. Thompson and M. A. Kramer, "Modeling chemical processes using prior knowledge and neural networks," *AIChE J.*, vol. 40, no. 8, pp. 1328–1340, 1994.
- [21] V. Cherkassky and F. M. Mulier, *Learning from data: concepts, theory, and methods*. John Wiley & Sons, 2007.

- hybrid model development with identification of plant-model mismatch,” *AIChE J.*, vol. 66, no. 10, 2020, doi: 10.1002/aic.16996.
- [37] E. S. Yadav and T. Indiran, “PRBS based model identification and GPC PID control design for MIMO Process,” *Mater. Today Proc.*, vol. 17, pp. 16–25, 2019, doi: 10.1016/j.matpr.2019.06.396.
- [38] M. S. Zaghoul, 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,” *J. Environ. Chem. Eng.*, vol. 8, no. 3, p. 103742, 2020.