Шахновський Аркадій, Квітка Олександр, Колюшко Олег. Розділ XVI. Нейромережеве моделювання та оптимізація технологічних режимів процесу виробництва полівінілхлориду. Штучний інтелект у науці : монографія / [авт. колектив]; за ред. Яцишина Андрія та Яцишин Анни. – Київ: ФОП Ямчинський О.В., 2025. – С. 212-222. ISBN 978-617-8830-09-0

РОЗДІЛ XVI. НЕЙРОМЕРЕЖЕВЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТА ОПТИМІЗАЦІЯ ТЕХНОЛОГІЧНИХ РЕЖИМІВ ПРОЦЕСУ ВИРОБНИЦТВА ПОЛІВІНІЛХЛОРИДУ

DOI: 10.33407/lib.NAES.id/748283

Шахновський Аркадій[1[0000-0003-2963-4026]], **Квітка Олександр**[1[0000-0003-4034-7052]],

Колюшко Олег[1[0009-0006-9379-6694]]

[1] Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського, Київ, Україна

AMShakhn@kpi.ua

Анотація. Робота присвячена дослідженням з підвищення ефективності процесів промислового синтезу полівінілхлориду суспензійною полімеризацією вінілхлориду. Виконано дослідження з побудови «температурної траєкторії» процесу суспензійного синтезу полівінілхлориду на основі стратегії «теплового удару», згідно до якого кінцева температура реакції підвищується, щоб підвищити швидкість реакції (зменшити тривалість) реакції. Відповідно з завданнями дослідження було проведено комплексний аналіз впливу технологічних параметрів (часу введення додаткових об'ємів мономеру-вінілхлориду та моменту теплового удару) на якість одержуваного полівінілхлориду. У результаті нейромережевого наближення даних активного експерименту та багатокритеріальної оптимізації визначено оптимальні значення технологічних факторів процесу, при яких досягаються найкращі показники якості полівінілхлориду в порівнянні з операціями, коли процес проводився у стандартному (ізотермічному) технологічному режимі.

Ключові слова: полівінілхлорид, підвищення ефективності, аналіз поверхонь відгуку, нейромережеве наближення даних, багатокритеріальна оптимізація, лексикографічний метод.

NEURAL NETWORK MODELING AND OPTIMIZATION OF TECHNOLOGICAL MODES IN POLYVINYL CHLORIDE PRODUCTION

Arcady Shakhnovsky[1[0000-0003-2963-4026], Oleksandr Kvitka[1[0000-0003-4034-7052],
Oleg Koliushko [1[0009-0006-9379-6694]
[1] Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute, Kyiv, Ukraine

Annotation. This study is dedicated to enhancing the efficiency of industrial polyvinyl chloride synthesis via the suspension polymerization of vinyl chloride. Research has been conducted on constructing the "temperature trajectory" of the suspension polymerization process based on the "thermal shock" strategy, according to which the final reaction temperature is increased to accelerate the reaction rate (reduce its duration). In accordance with the research objectives, a comprehensive analysis was carried out to assess the impact of technological parameters (the timing of additional vinyl chloride monomer introduction and the moment of thermal shock) on the quality of the obtained polyvinyl chloride. As a result of neural network approximation of active experimental data and multi-criteria optimization, the optimal values of technological factors were determined, ensuring the best quality indicators of polyvinyl chloride compared to operations conducted under the standard (isothermal) technological mode.

Keywords: Polyvinyl chloride, efficiency improvement, response surface analysis, neural network data approximation, multi-criteria optimization, lexicographic method.

Вступ. Представлена робота присвячена дослідженням з підвищення ефективності процесів промислового синтезу полівінілхлориду суспензійною полімеризацією вінілхлориду. Актуальність таких досліджень зумовлена надзвичайно широким спектром використання полівінілхлориду (як матеріалу для виробництва віконних рам, труб, покрівлі; водонепроникних мембран та ізоляції кабелів, ламінату та інших настінних покриттів, шлангів, пляшок, блістерів ті інших видів упаковки, деталей автомобілів, декоративного оздоблення, медичного приладдя, як-то: мішки та трубки для переливання крові, крапельниці тощо, водонепроникного одягу, взуття, розподільчих коробок електромонтажу та інших деталей електричної арматури, конвеєрних стрічок,

спортивних товарів, іграшок і т.д.) та специфічністю процесів синтезу полівінілхлориду.

Аналіз літератури та постановка проблеми. Полімеризацію мономеру вінілхлориду у промисловості традиційно проводять в ізотермічному режимі. При цьому конструкція системи тепловідводу реакторів має забезпечувати відведення теплоти екзотермічного піку; аналіз часових характеристик швидкості відводу тепла при полімеризації вінілхлориду вказує на те, що повна потужність системи охолодження більшу частину часу протягом полімеризації залишається «в режимі простою» [1]. Отже, до підвищення ефективності реакції веде режим, в якому теплове навантаження піку екзотермічної реакції «розподіляється» на весь (скорочений) час полімеризації. При цьому, «стратегічними» факторами, які можна варіювати для контролю швидкості реакції є швидкість розкладання ініціатора та температура полімеризації. Так, у піонерській роботі [2] запропоновано температурно-програмовану процедуру суспензійної полімеризації мономеру вінілхлориду з постійною швидкістю для підвищення продуктивності; розрахункова температурна траєкторія передбачала зниження температури з 64 до 40 °С, після чого підтримувалася постійна температура 40 °С протягом певного періоду часу, з наступним підвищенням до 68 °С. Така температурна траєкторія забезпечила скорочення часу реакції (при дещо погіршених об’ємних властивостях продукту та кращій його термічній стабільності) порівняно з полівінілхлоридом, отриманим в ізотермічному реакторі. Автори [3] застосували аналогічний підхід, з іншою температурно-просторовою траєкторією. В цій роботі полімеризація вінілхлориду здійснюється в каскаді реакторів полімеризації з послідовним зменшенням температури по каскаду від 57 °С до 36 °С, при цьому загальний час реакції порівняно з традиційним ізотермічним реактором зменшився на 28%. Аналогічну ідеологію побудови оптимальної «температурної траєкторії» реакції полімеризації в часі застосовують автори [4, 5], та інші дослідники.

Автори пропонованого тут дослідження у побудові «температурної траєкторії» керуються підходом на основі так званого теплового удару [4], згідно

до якого кінцева температура реакції підвищується, щоб підвищити швидкість реакції (зменшити тривалість) реакції.

Результати дослідження. Метою даного дослідження є системний пошук значень технологічних факторів (час введення додаткового об'єму вінілхлориду, та момент теплового удару після початку реакції, хв), що забезпечили б оптимальну температурну траєкторію (табл. 1).

Таблиця 1

Технологічні фактори

Рівні варіювання	x_1 – час введення додаткового об'єму вінілхлориду, хв		x_2 – час теплового удару, хв	
	Натуральні значення	Кодовані значення	Натуральні значення	Кодовані значення
Нижній	160	-1	230	-1
Верхній	180	1	240	1

Про оптимальність режиму полімеризації в даному випадку дозволяють судити такі критерії якості полівінілхлориду як насипна густина, пористість і ступінь полімеризації (оцінювана за К-середнім), а також продуктивність (час реакції). Ще одна важлива група характеристик якості – розподіл часток за розмірами, – в даному випадку не розглядалася, оскільки попередні дослідження показували, що ніяких істотних змін за цим параметром при зміні названих технологічних факторів не спостерігалося.

При вирішенні завдань, подібних до сформульованих вище, високу ефективність показав двоетапний підхід «регресія-оптимізація» [4, 6, 7]:

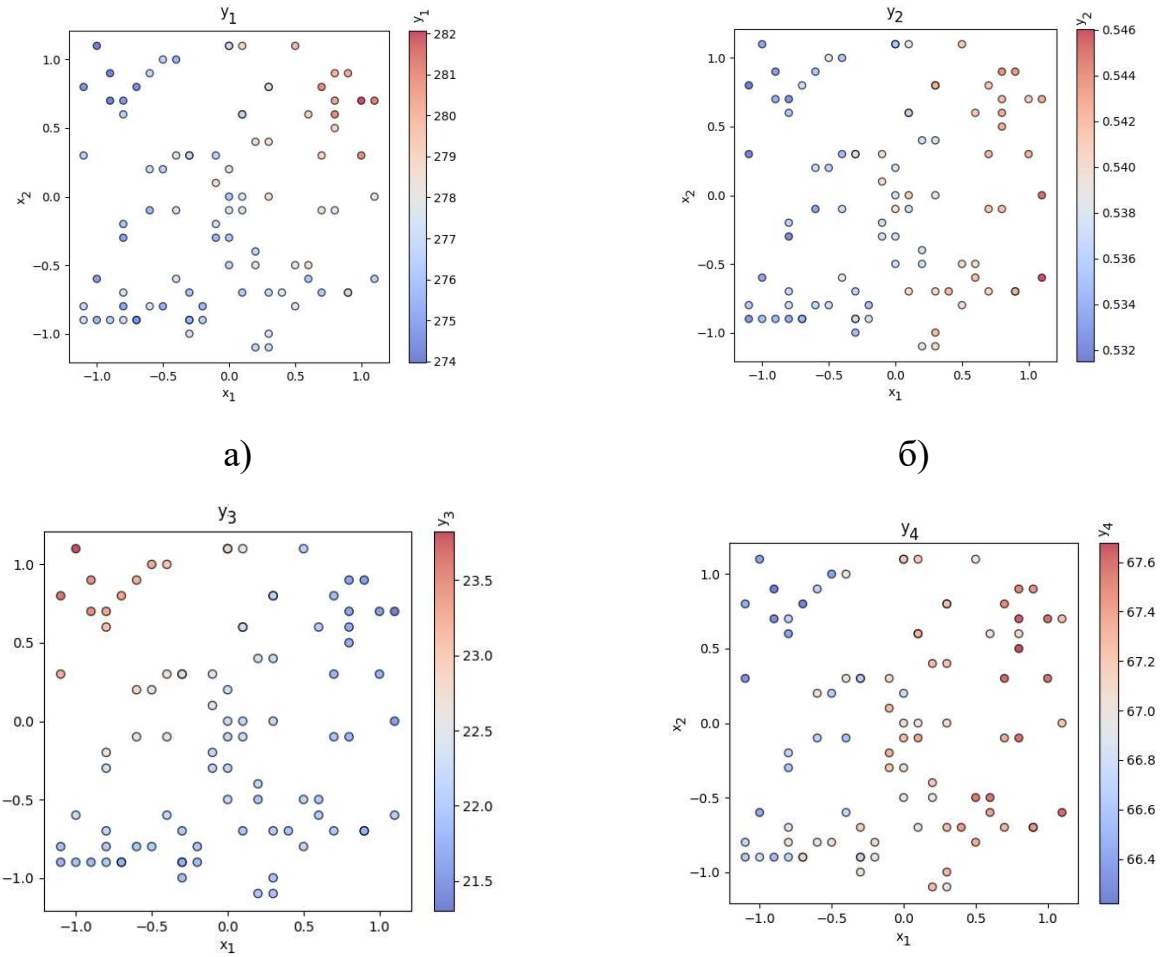
1. Функціональне наближення експериментальних значень критеріїв якості (як правило, статистичними методами планування експерименту).

2. Багатокритеріальна оптимізація з визначенням значень факторів, що відповідають компромісному оптимуму критеріїв оптимізації.

Проте в даному випадку до наведеного вище ефективного двоетапного алгоритму довелося внести суттєві зміни через особливості проведення експериментальних досліджень. В якості вихідних даних для наближення

функцій відгуку використовувалися результати активного експерименту несистематичного характеру (рис. 1).

На рис. 1 відображено експериментальні значення критеріїв оптимальності y_1-y_4 у проекціях на площину факторного простору x_1, x_2. Розташування точок на рис. 1, а-г – однакове для критеріїв y_1-y_4, і відповідає порядку проведення експерименту, тобто значенням x_1, x_2 для кожного з дослідів. Абсолютні значення функцій відгуку відображені кольоровим розподілом точок (дослідів).



а) б)

в) г)

Рис. 1. Експериментальні значення технологічних відгуків в факторному просторі:

а – тривалість реакції полімеризації (хв); б – насипна густина продукту (г/см^3); в – пористість продукту (частки); в – ступінь полімеризації (за К-середнім)

Відомо, що в теорії і практиці планування експерименту використовуються плани експерименту із чітко визначеною структурою (повний факторний

експеримент (ПФЕ), центральні композиційні плани (ЦКП), плани Бокса-Бенкена тощо); це дає важливі переваги у порівнянні з довільними таблицями значень факторів, зокрема: оптимальність розташування точок (системні плани дозволяють рівномірно розподілити точки експерименту в просторі факторів, що забезпечує максимальну інформацію про систему за мінімальної кількості дослідів), мінімізація кореляції між факторами та уникнення мультиколінеарності (і внаслідок цього – нестійких розрахунків регресійної моделі), економія ресурсів експериментатора (чітко структуровані експериментальні плани дозволяють мінімізувати кількість дослідів без втрати якості регресійної моделі).

Доступні авторам дані являють собою результати експериментів на дослідно-промисловій установці синтезу полівінілхлориду; експерименти відповідали вимогам та нормативам проведення активного експерименту, проте проводилися поза чітко структурованим планом експерименту. Внаслідок цього при спробі побудови експериментально статистичних моделей за наявними даними мала місце мультиколінеарність – виродженість інформаційної матриці системи, тобто метод найменших квадратів для визначення коефіцієнтів рівнянь регресії виявився незастосовним в своєму класичному вигляді. Застосування «обхідних методів» розрахунку визначника інформаційної матриці (зокрема, рідж-регресії) було визнано за недоцільне, оскільки при цьому не усувалися б основні проблеми мультиколінеарності – нестійкість коефіцієнтів регресії, низька точність прогнозів за моделями, можливість відбракування статистично значущих регресорів тощо.

З урахуванням зазначеного, було прийнято рішення відмовитися від функціонального наближення експериментальних значень відгуків регресійними моделями планування експерименту на користь нейромережевого наближення.

Дослідження порівняльної ефективності вказаних двох підходів до наближення експериментальних даних [8, 9] показує, що нейронні мережі показують більшу порівняльну ефективність для випадку нерівномірних або випадкових вибірок великого обсягу. При плануванні експерименту за класичними методами (повний факторний експеримент або центральний композиційний план і т.д.) точки в факторному просторі розміщуються рівномірно або за спеціальними алгоритмами

(наприклад, D-оптимальним), що дає змогу побудувати регресійну модель, яка задовільно описує поведінку системи в усьому просторі факторів. Однак, якщо експеримент проведено несистемно (як у випадку даного дослідження), деякі з областей факторного простору містять багато точок (надлишкові вимірювання), інші області майже не представлені (відсутність даних); між експериментальними точками в факторному просторі наявні значні проміжки, що робить регресійну модель нестабільною при прогнозуванні в цих зонах. Нейромережі ж завдяки особливостям своєї організації (зокрема, використанню регуляризації, адаптивності до складного розподілу точок) здатні виконувати гладке нелінійне наближення експериментальних даних, навіть якщо експериментальні точки розташовані нерівномірно.

З урахуванням зазначеного, було виконано нейромережеве наближення експериментальних значень критеріїв якості. Архітектура використаної нейронної мережі:

- два нейрони вхідного шару (відповідно до кількості змінних x_1 *і* x_2);

- два прихованих шари: по 10 нейронів у кожному, функція активації – лінійна ReLU;

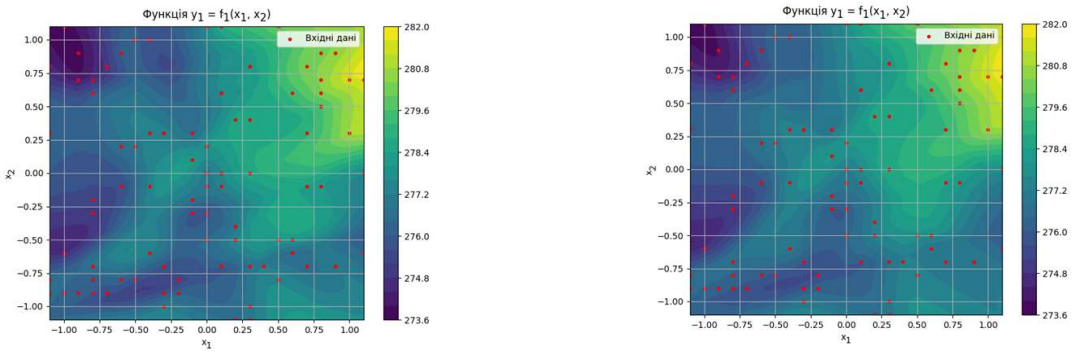
- чотири нейрони вихідного шару (відповідно до кількості змінних y_1, y_2, y_3, y_4), без активації (оскільки виконується апроксимація).

В якості функції втрат взято середньоквадратична похибка (mse), характерну для задач наближення.

Процедуру нейромережевого моделювання реалізовано мовою Python у середовищі PyCharm із використанням бібліотек TensorFlow [10] та допоміжних математичних бібліотек і бібліотек візуалізації. Для навчання мережі використано адаптивний алгоритм оптимізації (Adam). Кількість епох навчання – 200.

Для контролю якості наближення експериментальні дані було розділено на навчальну і тестову вибірку. Співвідношення між вибірками – стандартне: 80% – на навчальну вибірку і 20% експериментальних точок – на тестову вибірку.

Використання тестової вибірки дало змогу уникнути паразитних явищ перенавчання й надлишкової для даного набору експериментальних даних кількості нейронів у внутрішніх шарах мережі (рис. 2).

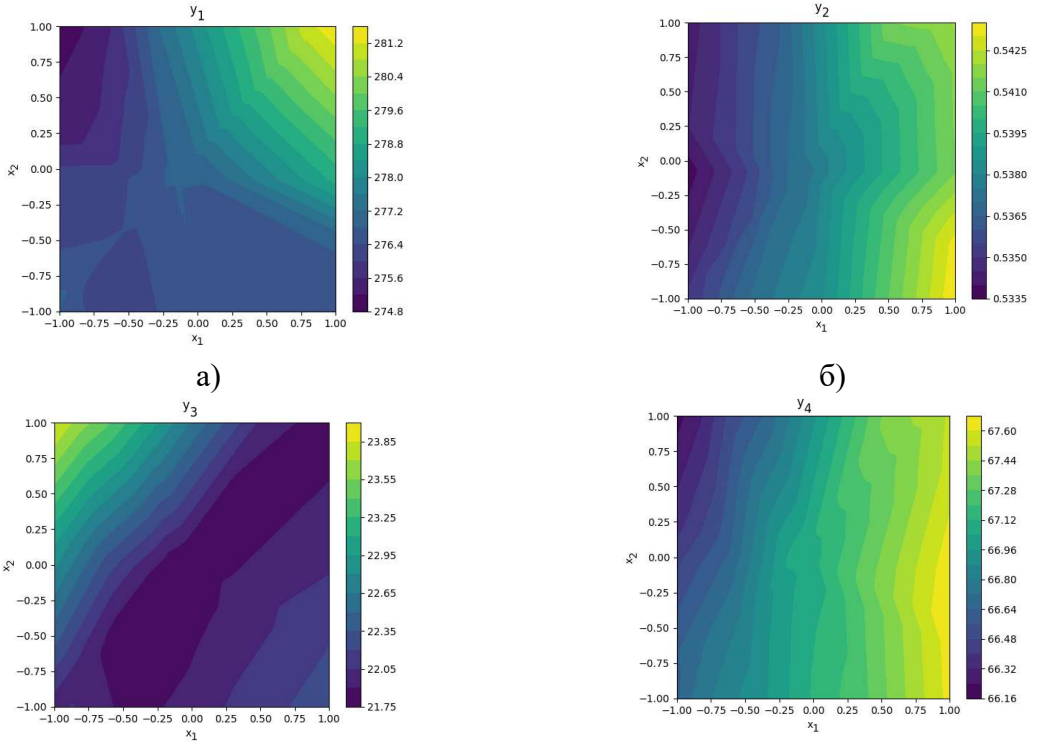


а) б)

Рис. 2. Надлишкова деталізація поверхні нейромережевого відгуку (для критерію y_1 – насипна густина продукту) та явище перенавчання:

а – 400 нейронів у внутрішніх шарах мережі; б – 200 нейронів у внутрішніх шарах мережі.

Прийняття рішень за результатами наближення експериментальних даних передбачало аналіз модельованих поверхонь відгуку (рис. 3) та багатокритеріальну оптимізацію із визначенням значень технологічних факторів, що відповідають компромісному оптимальному значенню функцій відгуку.



а) б)

в) г)

Рис. 3. До аналізу нейромодельованих поверхонь технологічних відгуків:

а – тривалість реакції полімеризації (хв); б – насипна густина продукту (г/см^3); в –пористість продукту (частки); в – ступінь полімеризації

Внаслідок конфліктуючого характеру критеріїв оптимальності, узагальнений критерій оптимальності, отриманий адитивною лінійною згорткою критеріїв y_1-y_4 (рис. 4), виявився неефективним.

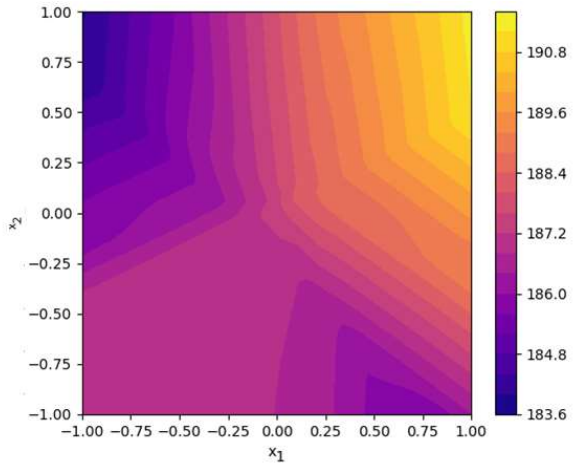


Рис. 4. Графічна інтерпретація узагальненого критерію оптимальності, отриманого адитивною лінійною згорткою

Також, було визнано за недоцільне використання до багатокритеріальної оптимізації в даному випадку підходу на основі функції бажаності (через ускладненість використання нейромережевих моделей в якості часткових критеріїв бажаності).

Таблиця 2

Розрахункові оптимальні значення технологічних факторів

x_1 – час введення додаткового об'єму вінілхлориду, хв		x_2 – час теплового удару, хв	
Кодовані значення	Натуральні значення	Кодовані значення	Натуральні значення
0,43	174,3	0,00	235

В якості інструменту багатокритеріальної оптимізації було застосовано метод поступок (лексикографічний метод) з ранжуванням критеріїв в порядку нумерації і величиною поступки 10 %. Результати пошуку оптимального режиму процесів промислового синтезу полівінілхлориду представлено у табл. 2 (значення технологічних факторів) та табл. 3.

Таблиця 3

Очікувані значення технологічних відгуків

y_1 – час реакції (хв)	y_2 – насипна густина (г/см^3)	y_3 – пористість	y_4 – ступінь полімеризації
277,9	0,5	22,0	67,2

Висновки. Відповідно з завданнями дослідження було проведено комплексний аналіз впливу технологічних параметрів (часу введення додаткових об'ємів мономеру-вінілхлориду та моменту теплового удару) на якість одержуваного полівінілхлориду. У результаті нейромережевого наближення даних активного експерименту та багатокритеріальної оптимізації було встановлено, що оптимальними значеннями факторів є: час введення додаткового об'єму ВХ – 174,3 хв., час теплового удару – 235 хв, при яких досягаються найкращі показники якості полівінілхлориду в порівнянні з операціями, коли процес проводився у стандартному (ізотермічному) технологічному режимі.

Представлене дослідження виконано в рамках науково-дослідних проєктів «Комп'ютерне моделювання та оптимізація сталих технологічних схем водного господарства» (номер державної реєстрації 0124U002127) та «Удосконалення технологій промислової водопідготовки з використанням штучних нейронних мереж» (номер державної реєстрації: 0124U001966).

Список джерел

1. Saeki, Y., & Emura, T. (2002). Technical progresses for PVC production. Progress in Polymer Science, 27(10), 2055–2131. doi:10.1016/s0079-6700(02)00039-4

2. Feldman, D., Macoveanu, M., & Robila, G. (2006). Suspension Polymerization of Vinyl Chloride with Programmed Temperature: Morphological Characteristics and Thermal Stability of Polyvinyl Chloride). Journal of Macromolecular Science: Part A - Chemistry. 11. 1333-1348. 10.1080/00222337708061329.

3. Longeway, G., & Witenhafer, D. (2000). Increasing PVC suspension polymerization productivity by using temperature-programmed reactions. Journal of Vinyl & Additive Technology. 6. 100-103. 10.1002/vnl.10231.

4. Tacidelli, A., Alves, J., Vasconcelos, L., & Brito, R. (2009). Increasing PVC suspension polymerization productivity – An industrial application. Chemical Engineering and Processing: Process Intensification, 48(1), 485–492. doi:10.1016/j.cep.2008.06.007

5. Darvishi, R., & Shahi, A. (2019). The effects of initiators mixture on suspension polymerization of vinyl chloride and its comparison with other productivity-enhancing

procedures. International Journal of Plastics Technology. 23. 1-18. 10.1007/s12588-019-09243-6.

6. Danylkovych, A., Lishchuk, V., & Shakhnovsky, A. (2020). Improvement of structure determining qualitative characteristics of hydrophobized velour. Fibres and Textiles. 27(3), 41-48.

7. Danylkovych, A., Lishchuk, V., Sanginova, O., & Shakhnovsky, A. (2023). Optimization of rawhide collagen defibrillization process. Vlákna a textile. 30(3), 3-12. https://doi.org/10.15240/tul/008/2023-3-001.

8. Kumar, U. (2005). Comparison of neural networks and regression analysis: A new insight. Expert Systems with Applications, 29(2), 424–430. doi:10.1016/j.eswa.2005.04.03

9. Nor, M., Safuan, H., Shab, N., Asrul, M., Abdullah, A., Mohamad, N., & Lee, M. (2017). Neural network versus classical time series forecasting models. doi:10.1063/1.4982865

10. TensorFlow. Time series forecasting tutorial. URL: https://www.tensorflow.org/tutorials/structured_data/time_series

* * *