

Research on CNN–LSTM coupling model for chemical process early warning

Jingsong CUI^{1,2}, Bo JIA², Xuesheng LI², Yaru WANG², Haihang LI¹, Haining WANG^{1*}, Qifu BAO^{2*}

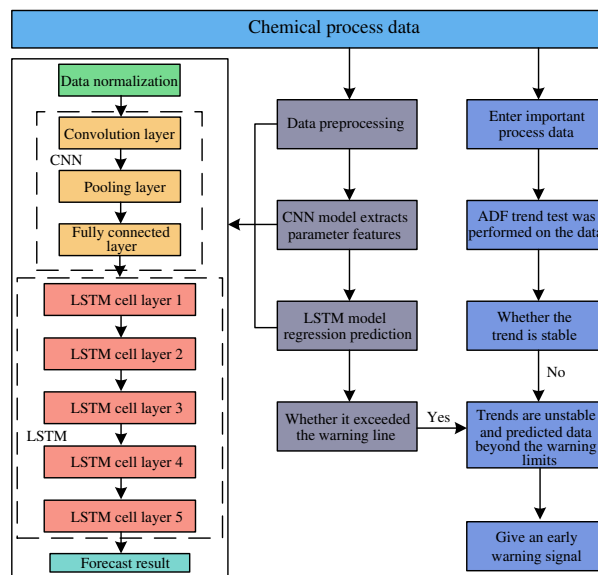
1. College of Quality and Safety Engineering, China Jiliang University, Hangzhou, Zhejiang 310018, China

2. Zhejiang Academy of Emergency Science and Technology, Hangzhou, Zhejiang 310061, China

Abstract: In consideration of the real-time, multi-dimensional, and nonlinear nature of chemical process parameters, as well as the complexity of chemical processes with numerous mutually interfering factors and single warning method, this work proposes an early warning method combining deep learning regression prediction and ADF (Augmented Dickey–Fuller) test. For monitoring and early warning analysis of over-temperature abnormal conditions in condensation reactions, convolutional neural network, and long short-term memory (CNN–LSTM) models are employed in this study to predict crucial process parameters for the next 400 s. Simultaneously, the ADF test is utilized to examine the trend of temperature time series parameters. When the result is an unstable trend and the CNN–LSTM model predicts that the temperature will

exceed the alarm threshold at a specific time point, security personnel will be alerted accordingly. The results showed that during the condensation reaction's over-temperature anomalies at feed rates of 700 and 800 kg/h, the CNN–LSTM model's regression forecasting for temperature metrics manifested R^2 values of 0.9827 and 0.9882. Correspondingly, the model elicits RMSE (Root Mean Square Error) values of 0.1425 and 0.1453, and MAE (Mean Absolute Error) values of 0.1184 and 0.1234. These indices testify to the model's exceptional fidelity and precision, surpassing the conventional LSTM model's predictive accuracy as reflected in its R^2 , RMSE, and MAE values. The ADF test results on the temperature time series data corroborate the presence of an unstable trend, aligning with the actual process behavior. By combining both methods, the early warning model is able to detect temperatures exceeding the alarm threshold 18 and 16 s earlier than the simulated alarm point, respectively, and issues a timely alert. The dual application of these methods provides a robust means of monitoring chemical process parameters, enabling the early detection of abnormal conditions in chemical processes and advancing the field of chemical process parameter monitoring.

Keywords: safety engineering; chemical processes; monitoring and warning; deep learning; ADF test



收稿: 2023–10–17, 修回: 2023–12–30, 网络发表: 2024–01–17; Received: 2023–10–17, Revised: 2023–12–30, Published online: 2024–01–17

基金项目: 国家自然科学基金青年项目(编号: 52106185); 浙江省科技重点研发计划项目(编号: 2021C03151)

作者简介: 崔劲松, 硕士研究生, 研究方向为化工过程数据分析与预警(安全工程专业), E-mail: 1357490734@qq.com; 通讯联系人, 王海宁, 教授, 从事工业安全理论与技术, E-mail: whnfyy@163.com; 包其富, 教授级高级工程师, 从事工业园区风险评价、化工过程安全技术研究等, E-mail: baoqifu@sina.com

引用格式: 崔劲松, 贾波, 李学盛, 等. 化工过程预警的 CNN–LSTM 耦合模型研究. 过程工程学报, 2024, 24(8): 937–945.

Cui J S, Jia B, Li X S, et al. Research on CNN–LSTM coupling model for chemical process early warning (in Chinese). Chin. J. Process Eng., 2024, 24(8): 937–945, DOI: 10.12034/j.issn.1009-606X.223280.

化工过程预警的CNN-LSTM耦合模型研究

崔劲松^{1,2}, 贾波², 李学盛², 王亚茹², 李海航¹, 王海宁^{1*}, 包其富^{2*}

1. 中国计量大学质量与安全工程学院, 浙江 杭州 310018

2. 浙江省应急管理科学研究院, 浙江 杭州 310061

摘要: 针对化工过程参数的实时性、多维性、非线性, 以及化工流程复杂、互相干扰项多、预警方法单一等情况, 本工作提出了一种针对化工过程异常工况的深度学习回归预测与ADF (Augmented Dickey-Fuller)检验相耦合的预警模型。在对缩合反应的超温异常工况监测预警分析中, 使用卷积神经网络和长短期记忆网络(Convolution Neural Network-Long Short-Term Memory, CNN-LSTM)模型实现了对未来400 s内过程重要参数的预测。同时利用ADF检验, 对该时段的重要参数进行趋势检验。当结果为趋势不稳定, 并且CNN-LSTM模型预测到某时刻重要参数超过警戒线, 再对安全人员发出警报。结果表明, 本工作所提出的方法在检测到过程参数不平稳后, 分别以模型拟合优度(R^2)为0.9827和0.9882的情况下提前18和16 s预测到异常工况的发生, 从而实现化工过程异常工况的提前预警, 对实现化工过程安全运行进行了有利探索。

关键词: 安全工程; 化工过程; 监测预警; 深度学习; ADF检验

中图分类号: TQ086; TP18

文献标识码: A

文章编号: 1009-606X(2024)08-0937-09

1 前言

化工过程通常涉及易燃、易爆或有毒材料及高温高压等极端操作条件, 化工过程中的故障可能会导致灾难性的情况, 并造成人员健康、环境和经济的巨大损失, 影响制造业的可持续性^[1]。为了预防化工企业的重特事故发生, 国家应急管理部在2021年印发的《“工业互联网+危化安全生产”试点建设方案》中提出: 构建“工业互联网+危化安全生产”技术体系和应用生态系统, 提升安全生产风险感知评估、监测预警和响应处置能力, 排查化解潜在风险。所以, 对化工过程参数进行监测预警并且及时有效地通知安全管理人员, 对于保障企业的财产安全和员工的生命安全具有重要意义。

杨哲^[2]归纳了本质安全与化工过程之间的逻辑关系, 从风险管控与处置技术、风险感知与监测预警技术、基于过程强化的本质安全化工工艺技术这几个方面总结了化工过程安全的发展方向, 分析了化工过程安全的未来趋势。陈樑等^[3]首次用机器学习与三角模糊数结合, 对化工过程参数进行了预测, 并对结果进行了风险评估, 完成了对化工过程的风险预警。化工过程预警正在逐步与人工智能领域串联, 实现全参数信息采集和数据快速分析预警。胡瑾秋等^[4]提出基于最小二乘法的拟合-微分-再微分的化工间歇过程趋势分析方法, 实现了连续的间歇过程异常工况早期报警监测, 给化工异常过程趋势预警开阔了新的思路。肖飞扬等^[5]用并行长短期记忆网络和卷积神经网络(Parallel Long Short-Term

Memory Network and Convolutional Neural Network, PLSTM-CNN)模型进行化工生产过程故障检测, 最终的结果对于故障平均检测率和漏报率等指标明显优于传统循环神经网络。兰海平等^[6]用长短期记忆网络算法(Long Short-Term Memory, LSTM)模型对瓦斯浓度进行预测, 并且验证了准确性。但是单独的LSTM模型或卷积神经网络(Convolutional Neural Network, CNN)模型都需要大量的数据进行正确训练, 且单独模型对数据进行预测时, 方法较单一。

为了解决化工流程复杂、相互干扰项多、预警方法单一等问题, 本工作提出使用卷积神经网络和长短期记忆网络(Convolution Neural Network-Long Short-Term Memory, CNN-LSTM)深度学习回归预测模型与ADF (Augmented Dickey-Fuller)检验相耦合, 构成一个新的化工过程预警模型。CNN-LSTM模型不仅拥有可靠性强、快速提取数据特征和预测准确率高等优点, 而且还兼顾了化工过程数据的实时性、多维性、非线性, 使得预测结果更加理想。同时, 本工作引入了ADF检验, 用来检验化工过程重要参数是否处于趋势平稳状态, 如果趋势状态为不平稳, 再结合CNN-LSTM模型对过程重要参数回归预测的结果作出结论, 当两者皆为不安全状态时再报警, 保证化工生产安全稳定运行。最后将本工作所提方法使用在不同流速下的C6格氏试剂与丙酮化合物的缩合反应的异常工况中, 结果表明本工作中所提出的方法的预测效果更加优秀。

2 模型与方法流程

2.1 CNN 原理

CNN 具有局部感知、权重共享、池化 3 个特征,即使面对大量数据的特征提取,CNN 也可以对数据进行多维

度分析,简化了多样本提取特征工作的过程^[7-9]。而 CNN 具有以上特点得益于其自身的结构,CNN 与一般的神经网络结构类似,都是由输入层、隐藏层和输出层所组成,但其中的隐藏层由卷积层、池化层、全连接层组成。CNN 结构示意图如图 1 所示。

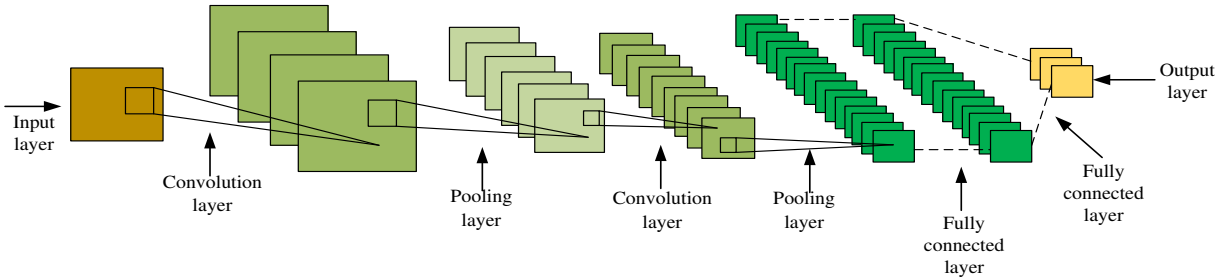


图 1 卷积神经网络结构示意图
Fig.1 Structure diagram of convolutional neural network

2.2 LSTM 原理

LSTM 是循环神经网络(Recurrent Neural Network, RNN)的一种特殊类型,LSTM 不仅具有 RNN^[10,11]的固有优势,并且 LSTM 中新增了遗忘门,通过遗忘门把与数据有关的重要信息记住,并将与数据无关的信息选择遗忘,科学地解决了神经网络中长序列依赖问题,并且改善了梯度消失的状况^[12-14]。

LSTM 的基本结构如图 2 所示,它由遗忘门、输入门和输出门组成。各门所涉及到的公式如下:

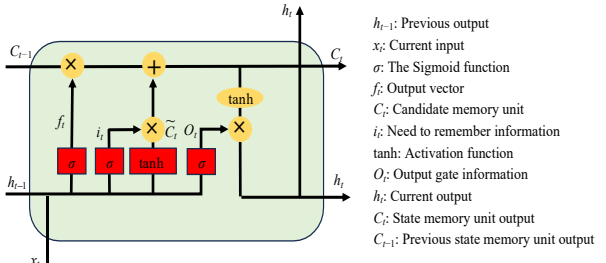


图 2 LSTM 网络结构
Fig.2 LSTM network structure

$$\begin{aligned} f_t &= \sigma(W_f \cdot [h_{t-1}, x_t] + b_f) & (1) \\ i_t &= \sigma(W_i \cdot [h_{t-1}, x_t] + b_i) & (2) \\ \tilde{C}_t &= \tanh(W_c \cdot [h_{t-1}, x_t] + b_c) & (3) \\ C_t &= f_t \cdot C_{t-1} + i_t \cdot \tilde{C}_t & (4) \\ O_t &= \sigma(W_o \cdot [h_{t-1}, x_t] + b_o) & (5) \\ h_t &= O_t \cdot \tanh(C_t) & (6) \end{aligned}$$

式中, σ 为 Sigmoid 激活函数,tanh 为 tanh 激活函数, C_{t-1} 与 h_{t-1} 通过遗忘门 f_t 、输入门 i_t 和输出门 O_t 后,得到了 t 时刻的单位状态 C_t 和单元输出 h_t , C_{t-1} 与 h_{t-1} 分别对应了上一时刻单元状态和上一时刻单元输出。

2.3 预警模型构建

2.3.1 CNN-LSTM 模型

本工作提出用 CNN-LSTM^[15-17]模型对化工过程重要参数进行预测。化工过程中的重要参数是指在化工生产过程中,对于产品质量、工艺控制 and 安全性等方面起到关键作用的参数。

首先利用 CNN 的卷积层对过程参数进行特征提取,获取化工反应过程参数的多个特征向量。随后将提

取出来的多个特征向量输入 LSTM 的网络结构中,LSTM 能够挖掘包含时间维度的隐藏故障特征。最后经过 LSTM 结构层的 3 个门的顺序作业将最终结果传递到输出层,CNN-LSTM 结构与关系如图 3 所示。

以化工过程重要参数为预测目标建立预测模型,根据模拟软件中的数据相关性程度来选取与化工过程重要参数相关性较高的参数作为模型的输入,以此建立模型,具体步骤如下:

(1) 数据预处理。本工作选择某次缩合反应的超温异常工况中所有的相关反应参数作为样本,其中反应器温度为重要参数。首先对样本数据进行归一化处理,以消除不同量纲和量级所带来的影响,归一化处理的函数选取 mapminmax 函数,该函数将数据映射到了一个新的固定空间,归一化区间选择[1,2]。这样的转换有助于改善算法的数值稳定性和收敛速度。

(2) 确定模型参数。在构建模型时,应该确保模型初始的输入数据与最后的输出数据的数据维度保持一致。模型的参数具体数值首先根据人工经验确定,然后

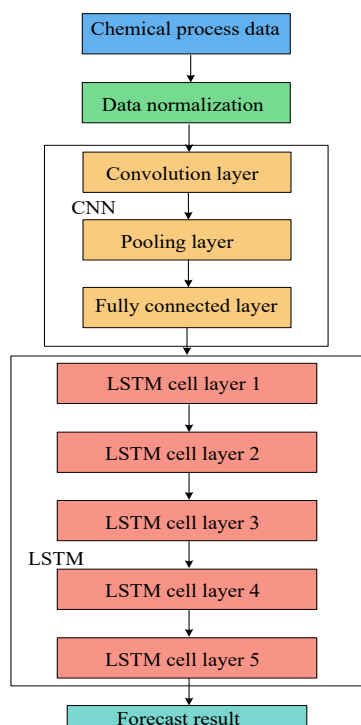


图3 CNN-LSTM神经网络预测模型结构图

Fig.3 CNN-LSTM neural network prediction model structure

再对数据的验证集进行检验,根据验证集最优结果确定最终参数。为了使化工过程数据得到更好地利用,CNN输入层的神经元个数设置为3个,分别对应与反应器温度相关的同一反应器的气相流量、压力、出气量,CNN包含两层卷积层,卷积核的尺寸大小为 2×1 ,第一层的卷积核中的神经元数量为4个,第二层为8个,模型采用Rectified Linear Unit (ReLU)激活函数,可以改善梯度消失问题,同时采用了包含5层单元的LSTM结构,并且使用了Adam梯度下降算法,它可以快速收敛并且对初始学习率的选择不是很敏感。模型迭代次数设置为300次,初始学习率为0.01,学习率下降因子为0.5,最后的输出层由单一神经元组成,用以预测反应器的温度。

(3) 运行预测模型。利用CNN-LSTM模型对该异常工况的重要参数进行回归预测,验证结果是否超过报警线。

2.3.2 模型评价指标

为了更准确地衡量所提预测模型的优越性,用均方根误差(RMSE)、平均绝对误差(MAE)、拟合优度(R^2)评估模型的预测结果。其中RMSE是一种用于衡量预测模型误差的统计量,它计算了观测值与预测值之间的差异,并给出了一个衡量预测精度的指标,RMSE的值越小预测效果越好;MAE是衡量预测值与真实值之间差异的一种统计量,它通常用于评估模型的预测准确度,特别是在回归分析中,MAE的值越小,模型的预测能力

越好; R^2 是用于衡量统计模型拟合数据程度的指标,通常用于评估回归模型的拟合程度, R^2 的值越接近1,表示模型对数据的拟合过程越好。RMSE, MAE和 R^2 一起使用,以便更全面地评估模型的预测能力。具体公式如下:

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (y_i - \hat{y}_i)^2} \quad (7)$$

$$\text{MAE} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m |\hat{y}_i - y_i| \quad (8)$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^m (\hat{y}_i - \bar{y})^2}{\sum_{i=1}^m (y_i - \bar{y})^2} \quad (9)$$

式中, m 代表预测的总次数, y_i 代表实际值, $\hat{y}_i$ 代表预测值, $\bar{y}$ 代表平均值。

2.3.3 ADF 检验

在对化工过程重要参数进行回归预测的同时,本工作引入了ADF检验^[18-20],用于验证时序参数的趋势性,当ADF检验为趋势不稳定并且CNN-LSTM模型预测到超温点的时间,再发出预警。

一阶AR模型如公式(10)所示:

$$y_t = c + \alpha y_{t-1} + u_t \quad (10)$$

其中, y_t 为时间序列变量, α 为 y_{t-1} 的参数, c 为位移项, u_t 为白噪声。DF检验原假设与备择假设为: $H_0: \alpha = 1; H_1: \alpha < 1$ 或 $H_0: \phi = 0; H_1: \phi < 0$ 。DF检验有如下三种情形:

$$\Delta y_t = \phi y_{t-1} + u_t \quad (11)$$

$$\Delta y_t = c + \phi y_{t-1} + u_t \quad (12)$$

$$\Delta y_t = c + \gamma t + \phi y_{t-1} + u_t \quad (13)$$

检验原则为公式(11)~(13)中 y_{t-1} 的参数 ϕ 是否为0。

若不拒绝原假设 H_0 , y_t 为含单位根的非平稳时间序列。若拒绝原假设 H_0 ,公式(11)和(12)中 y_t 为平稳时间序列;公式(13)中 y_t 为趋势平稳序列。这种单位根检验过程被称为DF检验。

但是化工过程参数具有动态性,通常伴随异常小幅度波动,DF检验遇到这种情况则会判断过程中存在非平稳项,显然这样会增加误报警的概率,也不适用于化工过程。所以,针对化工过程参数的动态性、时序性与非线性,应该使用更适合趋势项检验的ADF检验。ADF检验原假设与备择假设为: $H_0: \rho = 0; H_1: \rho < 0$ 。ADF检验也有如下三种情形:

$$\Delta y_t = \rho y_{t-1} + \sum_{i=1}^{p-1} \phi_i \Delta y_{t-i} + u_t \quad (14)$$

$$\Delta y_t = c + \rho y_{t-1} + \sum_{i=1}^{p-1} \phi_i \Delta y_{t-i} + u_t \quad (15)$$

$$\Delta y_t = c + \gamma t + \rho y_{t-1} + \sum_{i=1}^{p-1} \phi_i \Delta y_{t-i} + u_t \quad (16)$$

检验原则为公式(14)~(16)中 y_{t-1} 的参数 ρ 是否为0。

其中, $\rho = (\sum_{i=1}^p \alpha_i - 1)$, $\phi_i = -\sum_{j=i+1}^p \alpha_j$, 公式(14)为不含有截距项与趋势项的方程, 公式(15)为含有截距项的方程, 公式(16)为含有截距项与趋势项的方程。

在进行 ADF 检验时使用 Eviews 软件, 其中有三种模式“Intercept”, “Trend and intercept”和“None”分别对应了式(15), (16)和(14), 滞后项大小根据数据的多少由软件自动确认, 其中滞后项是指在建立单位根检验模型时所引入的滞后分差项, 正确的滞后项大小可以确保检验结果的准确性和可靠性。先对“Trend and intercept”模式进行检验, 再对“Intercept”模式进行检验, 最后对“None”模式进行检验, 得到三种模式检验的 t 统计量值 (t -statistic) 和 P 值 (Probability Value, P -value), 其中 P 值为

概率值, 通过 P 值是否小于 0.05 来判断 H_0 假设是否成立的依据, t -statistic 是用于衡量时间序列数据中单位根的存在程度。如果 3 个公式皆接受原假设, 则对比三种情况下的赤池信息准则 (Akaike Information Criterion, AIC)、汉南-奎因准则 (Hannan-Quinn criterion, HQ)、施瓦茨准则 (Schwarz Criterion, SC) 的值, 三种准则计算公式如下:

$$AIC = 2k - 2 \ln^L \quad (17)$$

$$HQ = 2k \ln^{1/n} - 2 \ln^L \quad (18)$$

$$SC = k \ln^n - 2 \ln^L \quad (19)$$

其中, k 是参数量, L 是模型最大似然估计值, n 是样本大小。

选择最小值个数最多的情况, 若结果中“Trend and intercept”模式的最小值个数最多, 即可判断该序列为趋势不平稳数据。其他趋势判断准则见图 4。

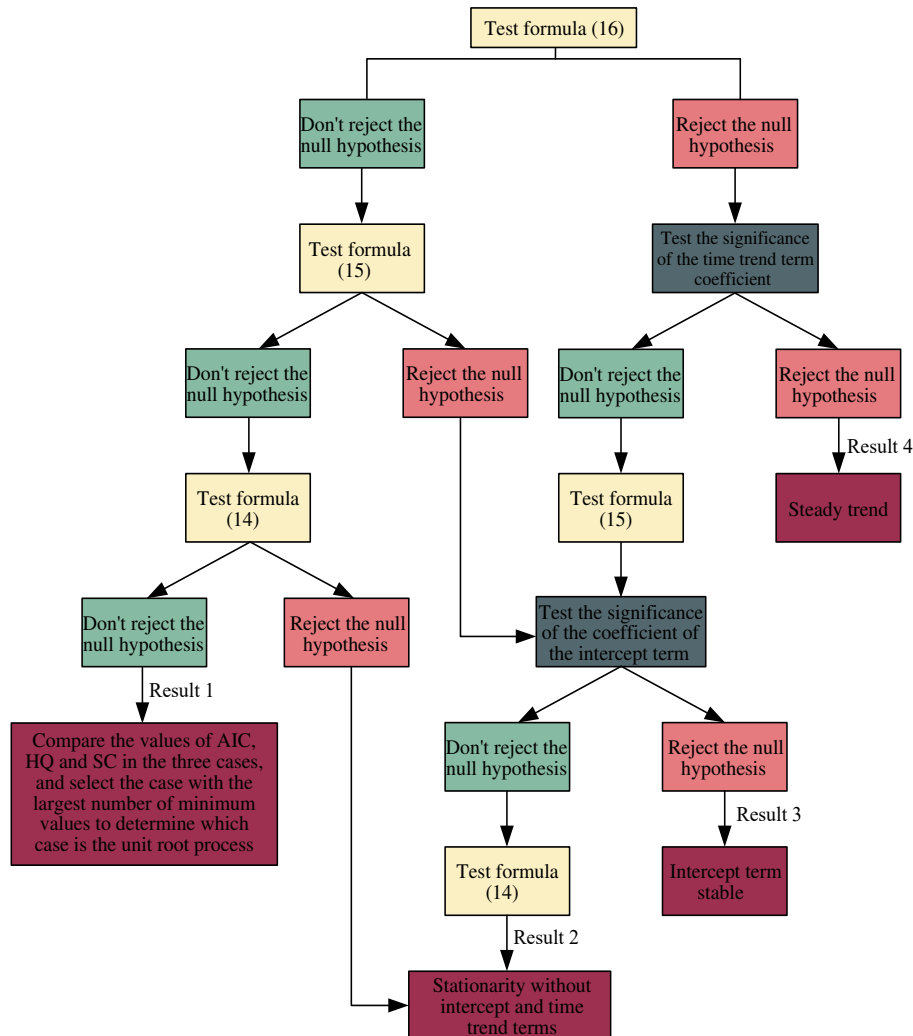


图4 ADF 检验趋势判断准则

Fig.4 ADF test trend judgment criterion

2.4 预警方法流程

化工过程预警模型由 CNN-LSTM 模型与 ADF 检验两部分构成。具体方法流程如图 5 所示。对化工过程数据进行归一化,随后构建 CNN-LSTM 模型,并将归一化的数据带入到 CNN-LSTM 模型中进行预测,检查最后结果是否超出报警线。同时对过程重要参数进行 ADF 检验,对检验结果进行分析,判断数据是否平稳。若趋势不稳定且预测结果也超过了报警线则发出预警信号。

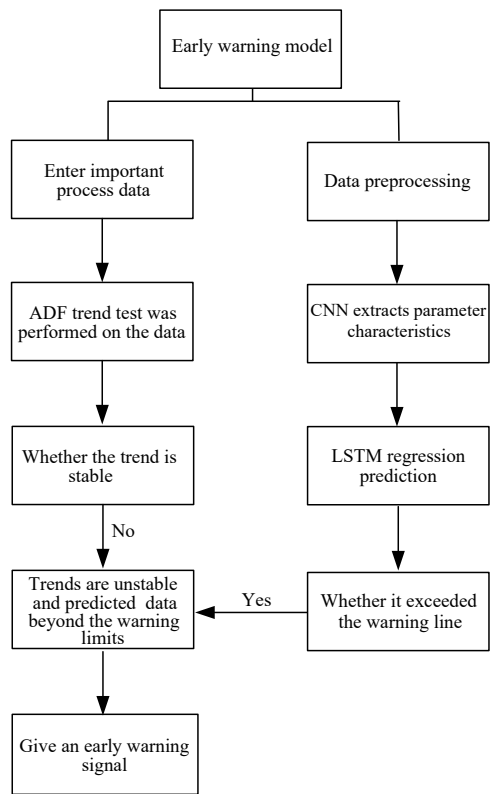


图5 预警方法流程图
Fig.5 Early warning model flow chart

3 结果与讨论

缩合反应在化工领域中应用非常广泛。本工作采用奥秘仿真 DynamicsV3.5 软件(该软件由杭州百子尖科技股份有限公司与浙江省应急管理科学研究院共同研发,软件设计器采用全图形化方式对现场过程进行建模,并提供支持化工过程各种单元操作库和热力学库。通过互联单元操作模型和对热力学模型进行必要的设置,仿真平台就可以精确地模拟现场流程在不同时刻的各种行为和状态)模拟在 400 s 内滴加速度分别为 700 和 800 kg/h 的 C6 格氏试剂与丙酮化合物的缩合反应的异常工况,并获得该过程参数样本数据。反应容器温度作为该过程的工艺指标,严重超温时,就会发生连锁反应,从而

发生爆炸事故。在该模拟过程中,影响反应器温度的因素有气相流量、压力、出气量 3 个参数。

3.1 过程数据趋势分析

对 400 s 内缩合反应在 700 和 800 kg/h 滴加速度下的温度参数进行 ADF 检验,滞后项选择为 7,分别选择“Intercept”,“Trendandintercept”与“None”三种模式,得到这三种模式下的 t -statistic, P -value, AIC, SC, HQ, 如表 1 和 2 所示。

表 1 700 kg/h 滴加速度下的 ADF 检验值
Table 1 ADF test value at 700 kg/h drop acceleration

Model	t -statistic	P -value	AIC	SC	HQ
Trendandintercept	-3.581202	0.9727	-13.97959	-13.84714	-13.82708
Intercept	-0.304017	0.9214	-13.95133	-13.82906	-13.90285
None	2.087455	0.9915	-13.95609	-13.84401	-13.91166

表 2 800 kg/h 滴加速度下的 ADF 检验值
Table 2 ADF test value at 800 kg/h drop acceleration

Model	t -statistic	P -value	AIC	SC	HQ
Trendandintercept	-3.206931	0.9745	-12.09188	-11.99057	-12.05173
Intercept	0.283638	0.9772	-12.06833	-11.97715	-12.03220
None	2.027381	0.9901	-12.07332	-11.99228	-12.04120

由表 1 和 2 可以得出,两种不同滴加速度下的 ADF 检验结果中 P -value 均大于显著性水平,即接受原假设,并且三种情况中 AIC, SC, HQ 值最小个数最多的情况为“Trendandintercept”,所以过程温度参数为趋势不平稳,对数据进行下一步预测。

3.2 数据预处理

将与反应容器温度相关度较高的 3 个关联参数作为模型预测的输入,反应容器温度在稳定情况下的变化区间为 51.9~53.0℃,将 53.0℃ 设置为报警值,55.0℃ 为温度阈值,本工作选取了两种不同滴加速度的异常工况发生时 4 个参数的 3200 组样本,其中 2800 组数据作为训练集,400 组数据作为测试样本,训练与测试的结果未发生过拟合现象。其中的一部分样本如表 3 和 4 所示。

对所有样本数据进行归一化处理,归一化区间为[1, 2],归一化后的数据如表 5 和 6 所示。

表 3 700 kg/h 滴加速度下的超温过程参数
Table 3 Parameters of overtemperature process at 700 kg/h drop acceleration

Gas phase flow rate/(kg/h)	Reactor exhaust/(kg/h)	Reactor pressure/kPa	Reactor temperature/℃
165.6121	62.7816	17.3181	51.9172
165.6157	62.7837	17.3181	51.9170
...	...	...	...
278.9600	112.5746	48.6895	55.1819

表 4 800 kg/h 滴加速度下的超温过程参数

Table 4 Parameters of overtemperature process at 800 kg/h drop acceleration

Gas phase flow rate/(kg/h)	Reactor exhaust/(kg/h)	Reactor pressure/kPa	Reactor temperature/℃
165.7078	62.8366	17.3445	51.9100
165.7111	62.8387	17.3455	51.9098
...	...	...	...
299.6566	122.2209	51.8343	55.8298

表 5 700 kg/h 滴加速度下超温过程参数归一化后的数据
Table 5 Normalized data of overtemperature process parameters at 700 kg/h drop acceleration

Gas phase flow rate/(kg/h)	Reactor exhaust/(kg/h)	Reactor pressure/kPa	Reactor temperature/℃
1.000	1.000	1.000	1.067
1.001	1.001	1.001	1.067
...	...	...	...
1.998	1.998	1.997	2.000

表 6 800 kg/h 滴加速度下超温过程参数归一化后的数据
Table 6 Normalized data of overtemperature process parameters at 800 kg/h drop acceleration

Gas phase flow rate/(kg/h)	Reactor exhaust/(kg/h)	Reactor pressure/kPa	Reactor temperature/℃
1.001	1.000	1.000	1.063
1.001	1.001	1.000	1.064
...	...	...	...
1.999	1.999	1.999	2.000

3.3 CNN-LSTM 预警

在 2.3.1 中,已经确定了 CNN-LSTM 模型的各项参数,随后利用 CNN-LSTM 模型预测两种不同滴加速度的 400 s 内的温度参数,预测结果如图 6 和 7 所示。在 3.1 节分析得出 400 s 内过程温度参数为趋势不平稳状态基础上,由图 6 中预测模型可得到该过程报警时刻为 174 s,模拟数据在 192 s 处超出警报值,该方法比普通报警方式提前 18 s;由图 7 中预测模型可得到该过程报警时刻为 172 s,模拟数据在 188 s 处超出警报值,该方法比普通报警方式提前 16 s。

模型预测结果的图片应该做到模拟数据与预测数据尽可能重合,本工作为了达到提前预警的目的,实际预测结果与真实数据会有一定误差,所以本工作在保证模型预测结果能够提前预测到报警点时间的同时,最大可能保证了模型预测结果的准确性。

3.4 LSTM 预警

本工作为了验证 CNN-LSTM 模型的精准性与实用性,同时使用 LSTM 模型对两种不同滴加速度下的 400 s 内的温度参数进行了回归预测,LSTM 模型对于样本数据的预测结果如图 8 和 9 所示。图 8 中预测模型的报警

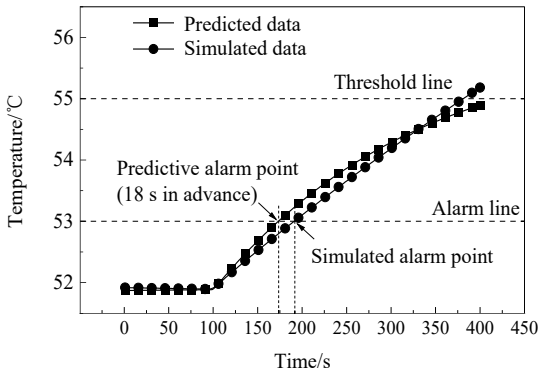


图 6 700 kg/h 滴加速度下的 CNN-LSTM 模型预测结果
Fig.6 Prediction results of CNN-LSTM model at 700 kg/h drop acceleration

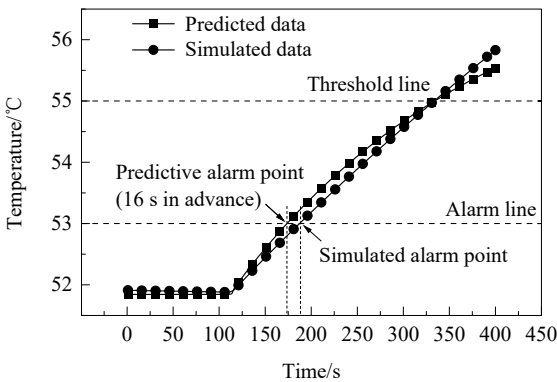


图 7 800 kg/h 滴加速度下的 CNN-LSTM 模型预测结果
Fig.7 Prediction results of CNN-LSTM model at 800 kg/h drop acceleration

时刻为 182 s,模拟数据在 192 s 处超出警报值,该方法比普通报警方式提前 10 s。图 9 中预测模型的报警时刻为 180 s,模拟数据在 188 s 处超出警报值,该方法比普通报警方式提前 8 s。

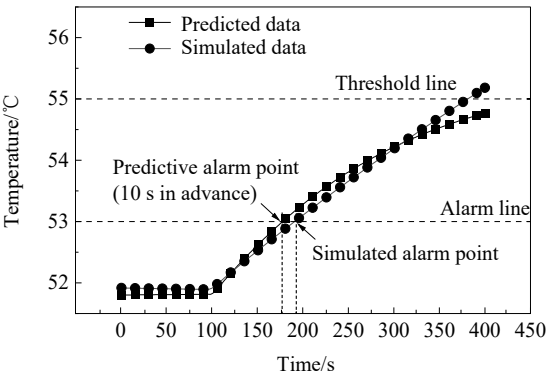


图 8 700 kg/h 滴加速度下的 LSTM 模型预测结果
Fig.8 Prediction results of LSTM model at 700 kg/h drop acceleration

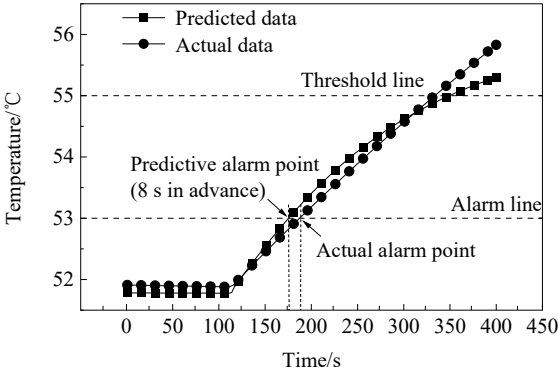


图9 800 kg/h 滴加速度下的 LSTM 模型预测结果
Fig.9 Prediction results of LSTM model at 800 kg/h drop acceleration

3.5 实验结果与分析

奥秘仿真 DynamicsV3.5 软件中使用的报警方式如下:当温度参数超过报警值上限时,向对应的安全人员发出相关警告。当化工过程中出现滴加速度过快等其他一系列严重干扰反应现象时,事故就容易出现。所以,预测化工过程中重要参数的变化,以此来达到提前预警的目的,让操作人员有充足的时间作出判断与操作显得尤为重要。本工作用 CNN-LSTM 模型与 ADF 检验相耦合的方法对缩合反应过程中的温度参数进行预测与趋势分析,温度参数预测结果如图 6 和 7 所示,ADF 检验结果均为不稳定,故发出预警。本工作将 CNN-LSTM 与 LSTM 的预测结果进行了对比,这两种模型的预测误差分析对比如表 7 和 8 所示。由表 7 和 8 可以得知,CNN-LSTM 模型的 R^2 分别为 0.9827 和 0.9882,相比 LSTM 模型的 R^2 值增加了 0.0110 与 0.0083;RMSE 值分别降低了 0.0068 与 0.0437;MAE 值分别降低了 0.0077 与 0.0355,前者两种不同滴加速度下的 R^2 值更接近 1, RMSE 值和 MAE 值也更低,所以 CNN-LSTM 模型的预测精度优于 LSTM 模型,并且 CNN-LSTM 模型也更适用于化工过程预警领域。

表 7 700 kg/h 滴加速度下的两种方法预测误差对比

Table 7 Comparison of prediction errors of the two methods at 700 kg/h drop acceleration

Method	RMSE	MAE	R^2
CNN-LSTM	0.1425	0.1184	0.9827
LSTM	0.1493	0.1261	0.9717

4 结 论

本工作提出了一种 CNN-LSTM 深度学习回归预测与 ADF 检验相耦合的新型化工过程参数预警模型,得出如下结论:

表 8 800 kg/h 滴加速度下的两种方法预测误差对比

Table 8 Comparison of prediction errors of the two methods at 800 kg/h drop acceleration

Method	RMSE	MAE	R^2
CNN-LSTM	0.1453	0.1234	0.9882
LSTM	0.1890	0.1589	0.9799

(1) 针对化工过程参数的实时性、多维性、非线性等问题,提出了基于深度学习的 CNN-LSTM 回归预测模型对化工过程参数进行预测,实现了对化工过程参数的特征提取及重要参数的提前预测。

(2) 针对化工过程预警方法单一的问题,对化工过程重要参数进行 ADF 检验,同时使用 CNN-LSTM 模型对重要参数进行回归预测。当 ADF 检验结果为趋势不稳定,并且 CNN-LSTM 模型预测到某时刻的重要参数超过警戒线,再发出警报。

(3) 将 CNN-LSTM 模型与 ADF 检验应用于 400 s 内滴加速度分别为 700 和 800 kg/h 的缩合反应超温的异常工况过程中,相比模拟报警点分别提前了 18 和 16 s 监测出温度超过报警点并发出警报,相比于 LSTM 模型能够更好地预测温度的变化情况,其中 R^2 值分别增加了 0.0110 与 0.0083, RMSE 值分别降低了 0.0068 与 0.0437, MAE 值分别降低了 0.0077 与 0.0355。

(4) 在监测到化工过程参数趋势不稳定和 CNN-LSTM 模型预测值超过报警线后,再对相关人员发出警报,在保证较高的参数预测准确率和双重判断异常的同时,还可以达到提前预警的目的。但本工作所提出的方法也仍然存在一些不足:ADF 检验结果可以更简化,以 0, 1 的形式表示该时间是否趋势稳定;提前预测数据超过报警线会存在一定误差,应尽可能做到使模型预测结果的评价指标 R^2 的值接近 1。

(5) 随着机器学习的不断更新,其在化工领域中有许多潜在的应用,但也存在一些局限性:机器学习的性能很大程度上依赖于所使用的数据质量且需要大量数据进行训练,而化工过程在数据收集集中会面临如数据缺失、不准确或不完整等问题。数据质量问题会对模型的准确率和鲁棒性产生负面影响;机器学习模型对新数据的泛化能力也是一个问题。在化工过程中,模型训练可能基于一组特定的条件和环境,但实际部署时可能面临不同的操作条件和环境。

参考文献

[1] Shu Y, Zhao J. Fault diagnosis of chemical processes using artificial immune system with vaccine transplant [J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2016, 55(12): 3360-3371.
[2] 杨哲. 化工过程本质安全技术研究进展 [J]. 石油炼制与化工, 2021, 52(10): 31-37.

- Yang Z. Progress of inherently safer technology in chemical process [J]. *Petroleum Refining and Chemical Industry*, 2021, 52(10): 31-37.
- [3] 陈樑, 朱君烨, 金龙, 等. 时序数据驱动的化工过程风险动态预警研究 [J]. *安全与环境学报*, 2023, 23(10): 3491-3501.
- Chen L, Zhu J Y, Jin L, et al. Chemical process risk warning based on CNN-LSTM and fuzzy mathematics [J]. *Journal of Safety and Environment*, 2023, 23(10): 3491-3501.
- [4] 胡瑾秋, 郭放, 张来斌. 基于趋势分析的间歇过程异常工况超早期报警研究 [J]. *石油学报(石油加工)*, 2018, 34(1): 101-107.
- Hu J Q, Guo F, Zhang L B. Study on abnormal situation ultra-early warning of batch process based on trend analysis [J]. *Acta Petrolei Sinica (Petroleum Processing)*, 2018, 34(1): 101-107.
- [5] 肖飞扬, 顾幸生. 基于并行 LSTM-CNN 的化工过程故障检测 [J]. *华东理工大学学报(自然科学版)*, 2023, 49(3): 382-390.
- Xiao F Y, Gu X S. Fault detection of chemical process based on parallel connection PLSTM-CNN [J]. *Journal of East China University of Technology (Natural Science Edition)*, 2023, 49(3): 382-390.
- [6] 兰海平, 张志刚, 徐再刚, 等. 基于 LSTM 的瓦斯浓度预测与防灾预警系统设计 [J]. *矿业安全与环保*, 2023, 50(2): 64-70.
- Lan H P, Zhang Z G, Xu Z G, et al. Design of gas concentration prediction and early warning system for outburst accident based on LSTM [J]. *Mining Safety and Environmental Protection*, 2023, 50(2): 64-70.
- [7] 陈建平, 王春雷, 王雪冬. 基于 CNN 神经网络的煤层底板突水预测 [J]. *中国地质灾害与防治学报*, 2021, 32(1): 50-57.
- Chen J P, Wang C L, Wang X D. Coal mine floor water inrush prediction based on CNN neural network [J]. *Chinese Journal of Geological Hazards and Control*, 2021, 32(1): 50-57.
- [8] 吕超, 朱雪阳, 丁忠林, 等. 基于 5G 与 CNN 的智能电网稳定性预测 [J]. *计算机系统应用*, 2021, 30(7): 158-164.
- Lü C, Zhu X Y, Ding Z L, et al. Stability prediction of smart grid based on 5G and CNN [J]. *Applications of Computer Systems*, 2021, 30(7): 158-164.
- [9] Ruan D W, Wang J, Yan J P, et al. CNN parameter design based on fault signal analysis and its application in bearing fault diagnosis [J]. *Advanced Engineering Informatics*, 2023, 55: 101877.
- [10] Zhao J, Cheng P Y, Hou J Z, et al. Short-term load forecasting of multi-scale recurrent neural networks based on residual structure [J]. *Concurrency and Computation: Practice and Experience*, 2023, 35(5): e7551.1-e7551.8.
- [11] Guo J M, Zhang Q, Zhao Y, et al. RNN-test: towards adversarial testing for recurrent neural network systems [J]. *IEEE Transactions on Software Engineering*, 2022, 48(10): 4167-4180.
- [12] 徐虎博, 史东辉. 基于 ARIMA 和 LSTM 模型的建筑安全事故预测 [J]. *软件工程*, 2023, 26(3): 9-14.
- Xu H B, Shi D H. Prediction of construction safety accidents based on ARIMA and LSTM models [J]. *Software Engineering*, 2023, 26(3): 9-14.
- [13] Bashir T, Chen H Y, Tahir M F, et al. Short term electricity load forecasting using hybrid prophet-LSTM model optimized by BPNN [J]. *Energy Reports*, 2022, 8: 1678-1686.
- [14] Fang Z C, Wang Y, Peng L, et al. Predicting flood susceptibility using LSTM neural networks [J]. *Journal of Hydrology*, 2021, 594: 125734.
- [15] 廖雪超, 陈才圣, 伍杰平. 基于 CNN-LSTM 及深度学习的风电场时空组合预测模型 [J]. *信息与控制*, 2022, 51(4): 498-512.
- Liao X C, Chen C S, Wu J P. Combined spatiotemporal wind farm prediction model based on CNN-LSTM and deep learning [J]. *Information and Control*, 2022, 51(4): 498-512.
- [16] 刘仲民, 赵丹阳. 基于 STFT-CNN-LSTM 的非侵入式负荷监测方法研究 [J]. *华中科技大学学报(自然科学版)*, 2023, 51(8): 128-134.
- Liu Z M, Zhao D Y. Research on non-invasive load monitoring method based on STFT-CNN-LSTM [J]. *Journal of Huazhong University of Science and Technology (Natural Science Edition)*, 2023, 51(8): 128-134.
- [17] Azhar I F, Putranto L M, Imawan R. Development of PMU-based transient stability detection methods using CNN-LSTM considering time series data measurement [J]. *Energies*, 2022, 15(21): 8241.
- [18] 陈丽江. 基于 ADF 检验的中国出口集装箱班轮运价随机特性研究 [J]. *武汉理工大学学报(社会科学版)*, 2013, 26(1): 15-20.
- Chen L J. Stochastic characteristics of CCFI based on ADF test [J]. *Journal of Wuhan University of Technology (Social Science Edition)*, 2013, 26(1): 15-20.
- [19] 邓伟, 唐齐鸣. 基于指数平滑转移模型的价格泡沫检验方法 [J]. *数量经济技术经济研究*, 2013, (4): 124-137.
- Deng W, Tang Q M. Testing for price bubbles in ESTAR framework [J]. *Research of Quantitative and Technical Economics*, 2013, (4): 124-137.
- [20] Sadiq M, Ou J P, Duong K D, et al. The influence of economic factors on the sustainable energy consumption: evidence from China [J]. *Economic Research-Ekonomika Istrazivanja*, 2023, 36(1): 1751-1773.