

УДК 66.021.4

## ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ЭФФЕКТИВНЫХ ХИМИЧЕСКИХ ТЕХНОЛОГИЙ ПЕРЕРАБОТКИ ОТХОДОВ АПАТИТ-НЕФЕЛИНОВЫХ РУД

© 2021 г. Академик РАН В. П. Мешалкин<sup>1,2</sup>, М. И. Дли<sup>3</sup>, А. Ю. Пучков<sup>3</sup>,  
В. И. Бобков<sup>3,\*</sup>, А. С. Казак<sup>4</sup>

Поступило 02.09.2020 г.  
После доработки 01.11.2020 г.  
Принято к публикации 17.12.2020 г.

Представлены аспекты методического обеспечения цифровых двойников на примере химико-энерготехнологического процесса производства фосфора из отходов апатит-нефелиновых руд. Разработано алгоритмическое обеспечение для одного из уровней иерархии информационной структуры самоутрачивающегося цифрового двойника, предназначенное для комплексной оптимизации работы установки по производству фосфора по критерию минимума ресурсоэнергопотребления. В основе алгоритма лежит ансамблевое применение глубоких нейронных сетей, обучение которых может продолжаться в процессе функционирования установки. Приведены результаты модельного эксперимента, выполненного с помощью созданной программы, реализующей разработанное алгоритмическое обеспечение самоутрачивающегося цифрового двойника.

*Ключевые слова:* цифровой двойник, переработка отходов апатит-нефелиновых руд, производство фосфора, энергоресурсоэффективность

DOI: 10.31857/S2686953521010064

### ВВЕДЕНИЕ

Обеспечение ресурсной и энергетической эффективности технологических систем является одной из важнейших задач при разработке новых и совершенствовании существующих производств. Ожидаемые эффекты особенно значимы для масштабных и энергоресурсозатратных производств, так как достижение даже относительно небольшого снижения затрат приводит к значительным экономическим эффектам в абсолютном выражении. Примерами таких производств являются комбинаты по переработке апатит-нефелиновых руд, отходы которых в больших объемах скапливаются в хвостохранилищах, занимая территории, загрязняя почву, воздушный и вод-

ный бассейны. С другой стороны, такие отходы можно рассматривать как ценные техногенные месторождения, ресурсы которых безвозвратно теряются при ветровой и водной эрозии. Поэтому проблема утилизации и вторичного использования таких отходов стоит достаточно остро, а разработка и модернизация предназначенных для этого технологических систем на основе принципа энергоресурсоэффективности представляет собой актуальную научно-исследовательскую задачу.

Создание условий для повышения энергоресурсоэффективности химико-энерготехнологической системы (ХЭТС) переработки отходов апатит-нефелиновых руд представляет собой сложную оптимизационную задачу. Разнообразие и сложность используемого при этом математического аппарата, присутствие множества ограничений, допущений, несогласованность погрешностей моделей отдельных агрегатов требуют поиска новых методологических подходов к минимизации потребления ресурсов и энергии всей ХЭТС.

Одним из таких перспективных методологических подходов в настоящее время может стать концепция “цифрового двойника” (ЦД), которую определяют как одну из основных компонент 4-й промышленной революции (Industry 4.0), характеризующейся широкомасштабным внедрением информационных технологий, в частности Ин-

<sup>1</sup> Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, 125047 Москва, Россия

<sup>2</sup> Институт общей и неорганической химии имени Н.С. Курнакова Российской академии наук, 119991 Москва, Россия

<sup>3</sup> Филиал “Национальный Исследовательский Университет “МЭИ” в г. Смоленске, 214013 Смоленск, Россия

<sup>4</sup> ООО “Научно-исследовательский институт экономики и организации управления в газовой промышленности”, 119311 Москва, Россия

\*E-mail: vovabobkoff@mail.ru

тернета вещей (IoT), в производственные процессы [1, 2].

В основе концепции ЦД лежит предположение, что для каждой физической системы можно создать виртуальное отображение (цифровой аватар), содержащее всю информацию об этой системе [3]. Важной особенностью, отличающей ЦД от привычных цифровых моделей, является постоянная связь между физической моделью и соответствующим виртуальным аналогом, устанавливаемая с помощью датчиков для получения данных в реальном масштабе времени.

Симбиоз ЦД и физического близнеца позволяет рассматривать ХЭТС как киберфизическую систему (КФС), в которой вычислительная и интеллектуальная компоненты распределены по всей физической системе, позволяя решать задачи управления и комплексной оптимизации производства, в том числе с точки зрения снижения затрат ресурсов и энергии. Однако интеграция в КФС разнородных технологических подсистем в единую производственную единицу все еще требует больших инженерных усилий [4], поэтому задача разработки методического и алгоритмического обеспечения ЦД для повышения энергоэффективности ХЭТС представляет собой новое и наукоемкое направление исследований.

Целью работы являлось создание инструмента для комплексной оптимизации энергопотребления ХЭТС по переработке отходов апатит-нефелиновых руд. Задача исследования состояла в разработке алгоритмического и элементов программного обеспечения ЦД для оптимизации энергопотребления ХЭТС.

## ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

**Аспекты методического обеспечения цифровых двойников.** В основе методического обеспечения ЦД лежит системное исследование задачи его создания, опирающееся на принципы системного анализа. Во-первых, это принцип конечной цели, согласно которому формулируется цель исследования ХЭТС, конкретизируются критерии оптимизации. В данном случае критерием выступает энергопотребление ХЭТС по переработке отходов апатит-нефелиновых руд, а цель – его минимизация. Другой системный принцип – принцип модульного построения – требует абстрагирования от излишней детализации и вместо тщательного исследования частей системы – рассмотрения только их входных и выходных воздействий. Выполнение этого принципа в данном случае наиболее органично реализуется за счет существующего физического разделения ХЭТС на отдельные технологические агрегаты: гранулятор (Г), многокамерную обжиговую машину конвейерного типа (МОМКТ) и руднотермическую печь

(РТП). Гранулятор осуществляет формирование сырых окатышей из отходов апатит-нефелиновых руд, МОМКТ удаляет из них излишки влаги за счет прохождения горячего газа через многослойную массу окатышей, в РТП окатыши расплавляются с выделением газообразного фосфора.

Структуру концептуальной модели ЦД для ХЭТС (рис. 1) можно представить в виде трех составных частей [5]: физических процессов в реальном мире, виртуальных продуктов в кибернетическом мире и информационного соединения между виртуальными и реальными продуктами, осуществляемого с использованием IoT. В представленной на рис. 1 структуре производители уделяют большое внимание работе или с физическим продуктом, или с виртуальным, в то время как связь между этими двумя продуктами остается на заднем плане. Это тормозит проявление всех преимуществ и возможностей концепции ЦД при совершенствовании и оптимизации производственных процессов.

Принципы модульности, функциональности, развития, децентрализации и неопределенности характеризуют аспекты анализа ХЭТС, которые, в дополнение к вышеперечисленным, дают возможность выработать единый методический аппарат построения ЦД ХЭТС.

С методической точки зрения при проектировании ЦД ХЭТС необходимо обеспечить создание модели ХЭТС, эволюционирующего набора данных, относящихся к ХЭТС, и средства динамического обновления или корректировки модели в соответствии с данными. При выборе варианта модели надо учитывать существующий математический аппарат описания процессов в исследуемом объекте, уже созданное и применяемое программное обеспечение, предпочтения разработчика ЦД.

Важным методическим аспектом создания ЦД является обеспечение доверия к модели. Доверие к модели достигается выполнением процедур верификации (сравнение с эталонами) и валидации (сравнение с реальностью). Присутствие неопределенности в данных приводит к тому, что валидация должна рассматриваться как статистический процесс, анализ которого дает понимание того, насколько можно доверять результатам модели.

**Алгоритмическое обеспечение цифровых двойников.** В ЦД присутствуют три важные части: модель объекта, обновляющийся набор данных, относящихся к объекту, и средство динамического обновления или корректировки модели в соответствии с данными. Их взаимодействие поддерживается комплексным подходом к разработке алгоритмического обеспечения ЦД [6, 7]. Различные инструменты, применяемые в структуре ал-

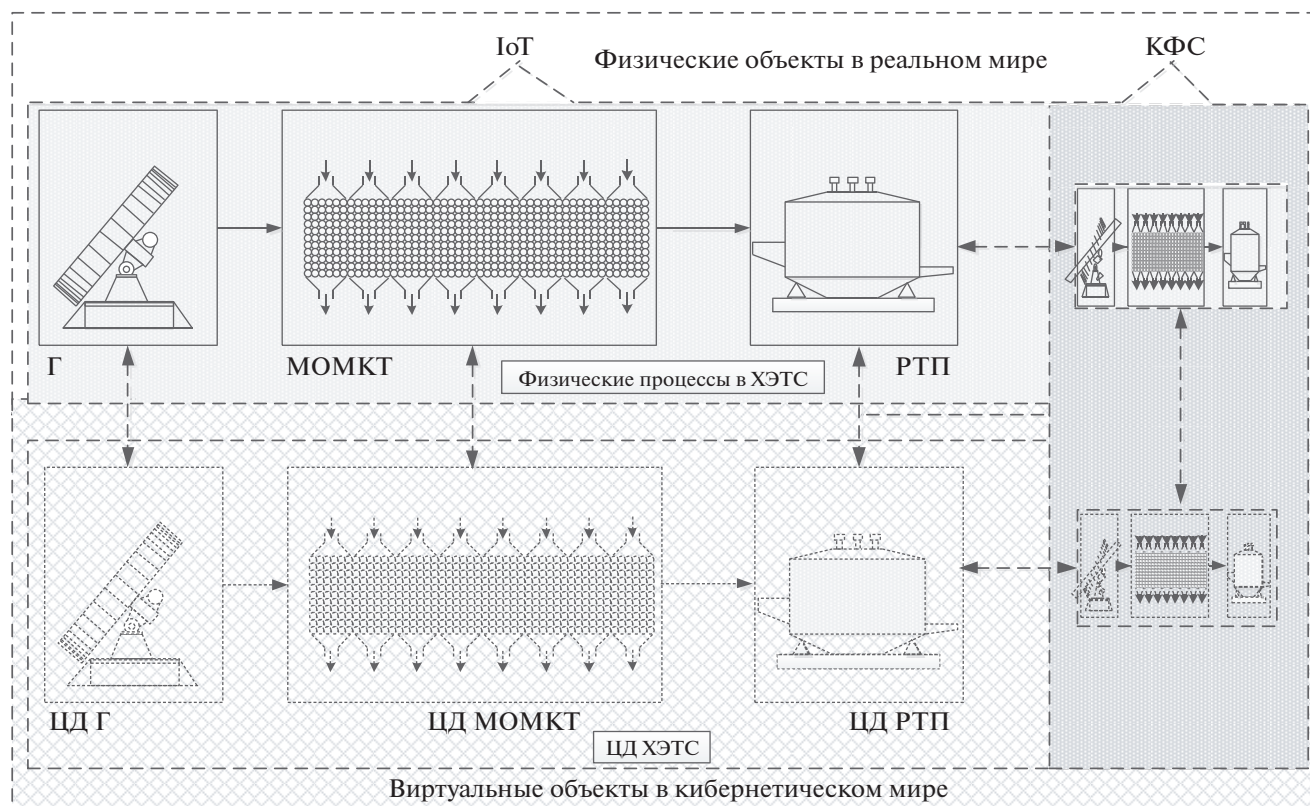


Рис. 1. Структура концептуальной модели ЦД для ХЭС производства фосфора из отходов апатит-нефелиновых руд.

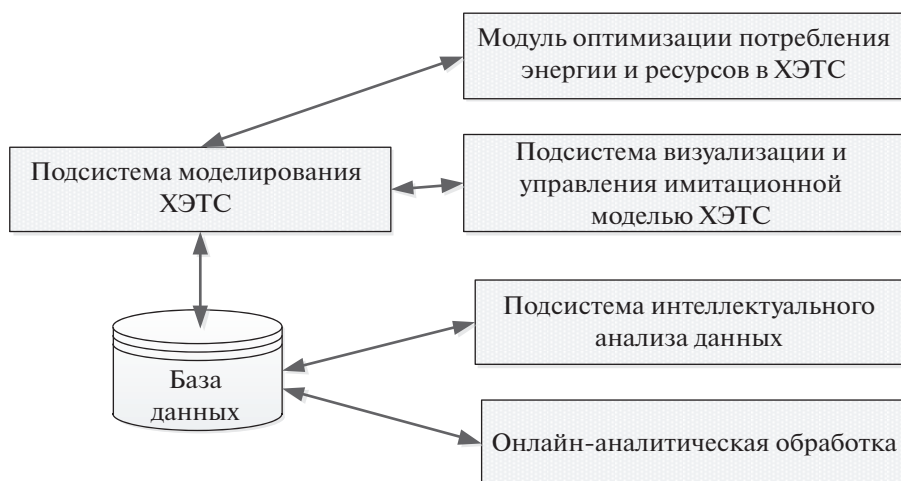


Рис. 2. Структура алгоритмического обеспечения ЦД.

горитмического обеспечения ЦД, отражены на рис. 2.

Остановимся подробнее на алгоритмическом обеспечении модуля оптимизации потребления энергии и ресурсов ХЭС, так как он предназначен для определения оптимальных параметров функционирования ХЭС с точки зрения минимизации энергопотребления. В этом случае критерий оптимизации рассматриваемой

ХЭС (в дальнейшем под энергопотреблением будем понимать удельное энергопотребление, измеряемое в  $\text{МДж т}^{-1}$ ) можно записать в формализованном виде:

$$E_{\Sigma} = C_{\text{эл}} Q_{\text{эл}, \Sigma} + C_{\text{т}} Q_{\text{т}, \Sigma}, \quad (1)$$

где  $E_{\Sigma}$  – суммарные затраты энергии ( $\text{МДж т}^{-1}$ );  $C_{\text{эл}}$  – стоимость единицы электроэнергии;  $C_{\text{т}}$  – стоимость единицы тепловой энергии;  $Q_{\text{эл}, \Sigma}$  –

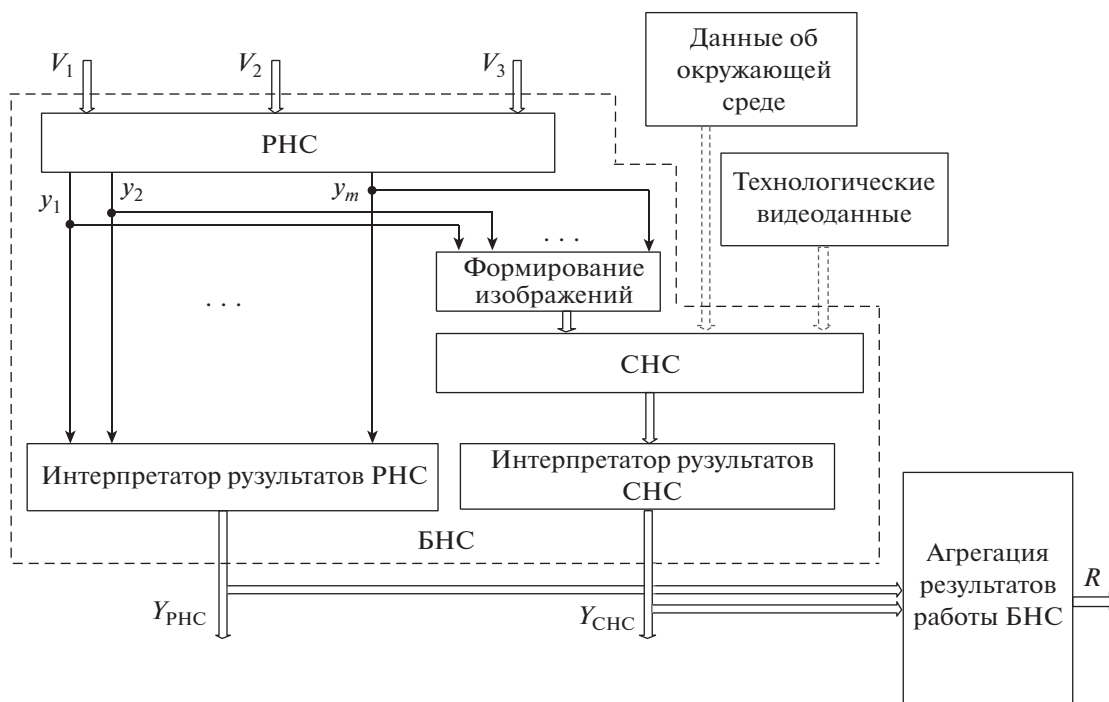


Рис. 3. Структура обработки технологической информации в ЦД.

суммарное потребление электроэнергии;  $Q_{т, \Sigma}$  – суммарное потребление тепловой энергии.

Под энергоресурсоэффективностью технологии переработки отходов апатит-нефелиновых руд будем понимать состояние ХЭТС, при котором минимизируется уравнение (1).

Потребление тепловой энергии  $Q_{т, \Sigma}$  сосредоточено в МОМКТ. Суммарное потребление электроэнергии складывается из потреблений отдельных агрегатов ХЭТС:

$$Q_{эл, \Sigma} = Q_{эл}^{\Gamma} + Q_{эл}^{\text{МОМКТ}} + Q_{эл}^{\text{РТП}},$$

где  $Q_{эл}^{\Gamma} + Q_{эл}^{\text{МОМКТ}} + Q_{эл}^{\text{РТП}}$  – потребление электроэнергии в грануляторе, МОМКТ и РТП соответственно.

Обозначим типы управления:  $U^y$  – управление, включающее решения по разработке и реализации алгоритмов оптимального управления протекающими в ХЭТС процессами;  $U^k$  – управление, связанное с определением конструктивных параметров элементов данной системы, обеспечивающих оптимальное потребление энергии и ресурсов. С учетом введенных обозначений критерий (1) принимает вид:

$$E_{\Sigma} = F_1(U_{\Gamma}^k, U_{\text{МОМКТ}}^k, U_{\text{РТП}}^k, U_{\Gamma}^y, U_{\text{МОМКТ}}^y, U_{\text{РТП}}^y, V_1, V_2, V_3) + F_2(U_{\Gamma}^k, U_{\text{МОМКТ}}^k, U_{\text{РТП}}^k), \quad (2)$$

где  $V_1, V_2, V_3$  – векторы параметров технологических агрегатов ХЭТС – гранулятора, МОМКТ и

РТП соответственно;  $F_2$  – функционал, отражающий конструктивные оптимизационные решения, выполняемые на основе эксергетического анализа ХЭТС.

Задача оптимизации состоит в минимизации уравнения (2) при условии обеспечения требуемого качества продукции, характеризуемого параметром  $\gamma_p$  – степенью чистоты фосфора на выходе РТП.

Оптимизация энергоресурсопотребления отдельных агрегатов ХЭТС рассматривалась в ряде работ, например, [8, 9], но комплексная оптимизация всей ХЭТС, допускающая отклонение от оптимального режима отдельного агрегата в целях общего выигрыша по критерию (2) всей ХЭТС, является математически сложной задачей и не решена до сих пор. Однако использование принципиально нового подхода на основе технологии ЦД позволяет получить практически значимые решения за счет использования возросших вычислительных мощностей современных информационно-телекоммуникационных систем. На рис. 3 показана предлагаемая структура обработки технологической информации в ЦД.

В основу структуры ЦД для оптимизации энергоресурсопотребления ХЭТС положено применение ансамбля глубоких рекуррентных (РНС) и сверточных нейронных сетей (СНС) [10]. Такое построение дает возможность реализации самоупоучняющегося ЦД для прогнозирования и оптимизации энергоресурсопотребления ХЭТС.

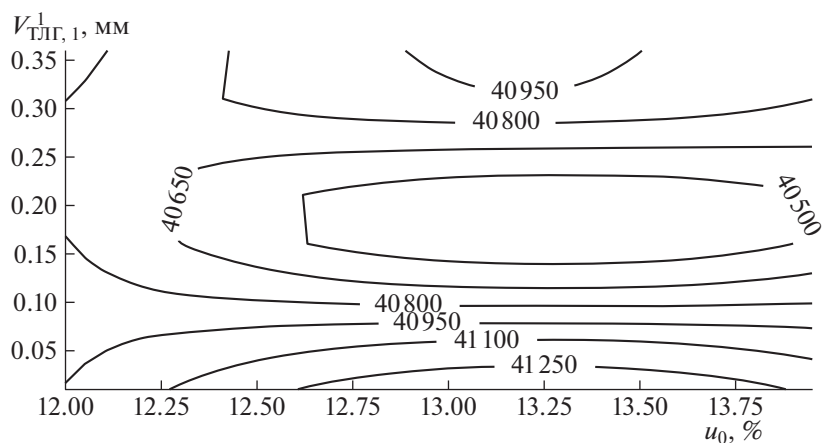


Рис. 4. Линии уровня  $E_{\Sigma}$  в срезе параметров  $V_{ТЛГ,1}^1$  и  $u_0$ .

Программная реализация одного каскада блока нейронных сетей (БНС) на рис. 3 построена на основе рекуррентных сетей долгой краткосрочной памяти (СДКП), обладающих высокой репрезентативной мощностью при обработке последовательностей данных и их прогнозе [11]. На вход СДКП поступает многоканальный поток (что определяет учет взаимовлияния этих технологических параметров), состоящий из компонентов векторов  $V_1, V_2, V_3$ , взятых через интервалы  $\Delta t$  за время  $T_{\text{look}}$  от текущего момента  $t$ . Величина  $T_{\text{look}} = k_{\text{look}} \Delta t$  определяет глубину исторического анализа, выполняемого СДКП в данный момент,  $k_{\text{look}}$  – количество отсчетов исторического анализа.

СДКП обучается на наборах данных, структура которых для момента времени  $t$  имеет вид:  $[input = \{V_1(t), V_2(t), V_3(t)\}; output = E_{\Sigma}(t + T)]$ , где  $T$  – интервал прогноза. С выхода СДКП для каждого момента времени  $t$  снимается последовательность  $y_i = y(t - i\Delta t)$ ,  $i = 0, 1, \dots, m$ . Совокупность из строк  $y_i$  для нескольких дискретных моментов времени собирается в матрицу  $Y$ , “тепловой” портрет которой, создаваемый в блоке формирования изображений, поступает на вход СНС, где производится оценка состояния ХЭТС.

Блоки интерпретации результатов рекуррентных и сверточных сетей осуществляют перевод нормированных значений выходов СДКП и СНС в абсолютные, а также, с учетом дополнительных данных из окружающей среды (поступают из блока “Данные окружающей среды”), формируют векторы  $Y_{\text{СДКП}}$  и  $Y_{\text{СНС}}$ . Их компоненты содержат оценки состояния ХЭТС, энергопотребления и других характеристик в зависимости от заложенных в интерпретаторы алгоритмов. В блоке агрегации результатов нейронных сетей выходы “Интерпретация результатов РНС” и “Интерпретация результатов СНС” используют-

ся для проведения обобщенной аналитики состояния ХЭТС, а выход блока  $R$  поступает в систему принятия решений более высокого уровня иерархии управления.

Тренировка сетей в БНС проводится отдельно для СДКП и СНС, но в обоих случаях требует большого количества примеров, поэтому она была разбита на два этапа:

– грубая настройка – “предобучение” нейронных сетей с использованием существующих программно-математических моделей гранулятора, МОМКТ и РТП;

– точная настройка – “дообучение” сетей БНС в процессе эксплуатации ХЭТС.

После тренировки нейронные сети готовы к проведению оптимизации энергопотребления ХЭТС по следующему алгоритму:

1. Конкретизация параметров оптимизации из компонент векторов  $V_1, V_2, V_3$ .
2. Задание границ рабочих диапазонов изменения параметров оптимизации и количества значений параметров, взятых из этих диапазонов.
3. Нормализация значений параметров оптимизации и формирование многомерной координатной сетки, каждая точка которой отражает определенную комбинацию значений нормированных параметров оптимизации.
4. Расчет величины энергопотребления ХЭТС во всех точках многомерной координатной сетки.
5. Выбор точки (или группы точек) многомерной координатной сетки, в которой достигается минимальное энергопотребление; ее координаты являются результатом оптимизации.

Процедура выбора в простейшем случае осуществляется простым перебором всех значений энергопотребления; применение более сложных

методов оптимизации не целесообразно при наличии достаточных вычислительных мощностей.

Представленный выше алгоритм реализован на языке Python с применением нейросетевой библиотеки Keras и фреймворка машинного обучения TensorFlow.

Проведение натурных испытаний ЦД сейчас не представляется возможным в связи с отсутствием действующего образца ХЭТС по производству фосфора из отходов апатит-нефелиновых руд на территории России. Для наполнения базы обучающей выборки были использованы результаты имитационных экспериментов на моделях отдельных агрегатов ХЭТС [12, 13]. Модельный эксперимент для апробации предложенной структуры ЦД проводится при изменении трех параметров: гранулометрического состава входного рудного сырья  $V_{\text{ТЛГ},1}^1$  (как компонента вектора  $V_{\text{ТЛГ}}^1$ ; ТЛГ – теплофизические, литографические и гранулометрические параметры), влагосодержания в окатыше на выходе из МОМКТ и среднего диаметра окатыша. Такая низкая размерность пространства изменяемых параметров применена для возможности визуализации результатов эксперимента, пример которых показан на рис. 4. На нем отражены линии уровня двумерного среза поверхности критерия (2) по параметрам  $V_{\text{ТЛГ},1}^1$  и  $u_0$ . Вид представленных на рис. 4 линий уровня свидетельствует о полиэкстремальности поверхности отклика  $E_{\Sigma}$ , поэтому применяемый метод простого перебора значений критерия энергоэффективности при глобальной оптимизации в данном случае оправдан.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Поставленная задача исследования, заключающаяся в разработке алгоритмического и элементов программного обеспечения самоочищающегося ЦД, была успешно решена, что позволило создать инструмент для повышения энергетической и ресурсной эффективности ХЭТС. Преимущество предложенного инструмента перед ранее используемыми подходами заключается в возможности комплексной оптимизации режимов функционирования всей ХЭТС по критерию энергоэффективности, а не отдельных технологических агрегатов, локальные оптимальные режимы которых могут отличаться от режимов, обеспечивающих оптимальность всей ХЭТС.

## ИСТОЧНИКИ ФИНАНСИРОВАНИЯ

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ (проект № 18-29-24094 МК) и по государственному заданию (проект № FSWF-2020-0019).

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Mueller E., Chen X., Riedel R.* Challenges and requirements for the application of Industry 4.0: a special insight with the usage of cyber-physical system // *Chin. J. Mech. Eng.* 2017. V. 30. P. 1050–1057. <https://doi.org/10.1007/s10033-017-0164-7>
2. *Trunzer E., Calà A., Leitão P., Gepp M., Kinghorst J., Lüder A., Schauerte H., Reifferscheid M., Vogel-Heuser B.* System architectures for Industrie 4.0 applications // *Prod. Eng. Res. Devel.* 2019. V. 13. P. 247–257. <https://doi.org/10.1007/s11740-019-00902-6>
3. *He B., Bai K.* Digital twin-based sustainable intelligent manufacturing: a review // *Adv. Manuf.* 2020. <https://doi.org/10.1007/s40436-020-00302-5>
4. *Cruz Salazar L.A., Ryashentseva D., Lüder A., Vogel-Heuser B.* Cyber-physical production systems architecture based on multi-agent's design pattern—comparison of selected approaches mapping four agent patterns // *The Int. J. Adv. Manuf. Technol.* 2019. V. 105. P. 4005–4034. <https://doi.org/10.1007/s00170-019-03800-4>
5. *Redelinghuys A., Basson A., Kruger K.* A six-layer digital twin architecture for a manufacturing cell / In: Boranjiu T., Trentesaux D., Thomas A., Cavalieri S. (editors). *Service orientation in holonic and multi-agent manufacturing. SOHOMA 2018. Studies in Computational Intelligence.* 2019. V. 803. P. 412–423. [https://doi.org/10.1007/978-3-030-03003-2\\_32](https://doi.org/10.1007/978-3-030-03003-2_32)
6. *Ramachandran R.P., Akbarzadeh M., Paliwal J., Cenkowski S.* Computational fluid dynamics in drying process modelling // *Food Bioprocess Technol.* 2018. V. 11. P. 271–292. <https://doi.org/10.1007/s11947-017-2040-y>
7. *Makarov V.L., Bakhtizin A.R., Beklaryan G.L.* Developing digital twins for production enterprises // *Business Informatics.* 2019. V. 13. № 4. P. 7–16. <https://doi.org/10.17323/1998-0663.2019.4.7.16>
8. *Li Z., Fan X., Chen G., Yang G., Sun Y.* Optimization of iron ore sintering process based on ELM model and multi-criteria evaluation // *Neural Comput & Applic.* 2017. V. 28. P. 2247–2253. <https://doi.org/10.1007/s00521-016-2195-x>
9. *Panchenko S.V., Dli M.I., Bobkov V.I., Panchenko D.S.* Problems of analysis of thermalphysic processes in a reaction zone of electrothermal reactor // *Non-ferrous Metals.* 2017. V. 42. P. 36–42. <https://doi.org/10.17580/nfm.2017.01.08>
10. *Cheng J., Wang P., Li G., Hu Q., Lu H.* Recent advances in efficient computation of deep convolutional neural networks // *Frontiers Inf. Technol. Electronic Eng.* 2018. V. 19. P. 64–77. <https://doi.org/10.1631/FITEE.1700789>
11. *Abdel-Nasser M., Mahmoud K.* Accurate photovoltaic power forecasting models using deep LSTM-RNN // *Neural Comput. & Appl.* 2019. V. 17. P. 2727–2740. <https://doi.org/10.1007/s00521-017-3225-z>

12. Bobkov V.I., Borisov V.V., Dli M.I., Meshalkin V.P. Modeling the calcination of phosphorite pellets in a dense bed // *Theor. Found. Chem. Eng.* 2015. V. 49. P. 176–182.  
<https://doi.org/10.1134/S0040579515020025>
13. Panchenko S.V., Meshalkin V.P., Dli M.I., Borisov V.V. Computer-visual model of thermophysical processes in electrothermal reactor // *Tsvetn. Met.* 2015. V. 4. P. 55–60 (in Russ.).  
<https://doi.org/10.17580/tsm.2015.04.10>

## SOFTWARE FOR EFFECTIVE CHEMICAL TECHNOLOGIES FOR PROCESSING APATITE-NEPHELINE ORE WASTE

Academician of the RAS V. P. Meshalkin<sup>a,b</sup>, M. I. Dli<sup>c</sup>, A. Yu. Puchkov<sup>c</sup>, V. I. Bobkov<sup>c,#</sup>, and A. S. Kazak<sup>d</sup>

<sup>a</sup> Russian University of Chemical Technology DI. Mendeleev, 125047 Moscow, Russian Federation

<sup>b</sup> Institute of General and Inorganic Chemistry, N.S. Kurnakov Russian Academy of Sciences, Moscow, Russian Federation

<sup>c</sup> The Branch of National Research University “Moscow Power Engineering Institute” in Smolensk, 214013 Smolensk, Russian Federation

<sup>d</sup> LLC “Research Institute of Economics and Management Organization in the Gas Industry”, 119311 Moscow, Russian Federation

#E-mail: vovabobkoff@mail.ru

Aspects of the methodological support of digital twins are presented on the example of the chemical-energetic process of phosphorus production from the wastes of apatite-nepheline ores. Algorithmic support has been developed for one of the levels of the hierarchy of the information structure of a self-refining digital twin, intended for the complex optimization of the operation of the phosphorus production plant according to the criterion of the minimum resource consumption. The algorithm is based on the ensemble application of deep neural networks, the training of which can continue during the operation of the installation. The results of a model experiment carried out using the created program that implements the developed algorithmic support of a self-refining digital twin are presented.

**Keywords:** digital twin, processing of apatite-nepheline ore waste, phosphorus production, energy and resource efficiency