

DOI: <https://doi.org/10.33216/1998-7927-2024-286-6-190-198>

УДК 662.7 (075.8)

ЗАСТОСУВАННЯ ФІЗИЧНО ОБҐРУНТОВАНИХ НЕЙРОННИХ МЕРЕЖ (PINN) У КОНТРОЛІ ЯКОСТІ ПРОДУКТУ ПРОЦЕСУ ГАБЕРА-БОША

Водяник Б.Р., Лорія М.Г., Кобзарев Є. В.

APPLICATION OF PHYSICS INFORMED NEURAL NETWORKS (PINN) IN QUALITY CONTROL OF THE HABER-BOSCH PROCESS PRODUCT

Vodianyuk B.R., Loria M.G., Kobzarev E.V.

У статті розглянуто можливості застосування фізично обґрунтованих нейронних мереж (Physics-Informed Neural Networks, PINNs) для контролю якості аміаку, що виробляється за процесом Габера-Боша. Процес синтезу аміаку є високонелінійним і важливим промисловим процесом, де стабільність і висока якість продукту мають критичне значення. Традиційні методи контролю якості стикаються з обмеженнями, такими як брак прямих онлайн-вимірювань ключових параметрів та потреба в значних обсягах даних для побудови моделей. PINNs пропонують гібридний підхід, що поєднує фізичні закони процесу з можливостями глибокого навчання, дозволяючи здійснювати точне прогнозування концентрації та чистоти аміаку в реальному часі на основі обмеженого набору датчиків. У роботі проаналізовано сучасні дослідження, присвячені застосуванню нейромереж у промислових процесах, та обґрунтовано архітектуру PINN-моделі для моніторингу якості продукту в синтезі аміаку. Показано переваги PINNs над традиційними методами – скорочення потреби у даних, забезпечення фізично узгоджених результатів та інтеграція в існуючі системи керування для підвищення ефективності виробництва. Обґрунтовано, що фізично обґрунтовані нейронні мережі пропонують новий рівень інтелектуального контролю для хімічних процесів. У випадку синтезу аміаку цей підхід дозволяє по-новому вирішити давні проблеми контролю якості, об'єднавши науку і дані. Реалізація PINN у виробництві аміаку потенційно забезпечить більш високу якість продукту, гнучкість операцій та стійкість процесу, сприяючи прогресу в напрямі «Industry 4.0» [20] в хімічній промисловості. Це крок до більш розумних і ефективних заводів, де кожен важливий процес знаходиться під надійним наглядом комбінованого інтелекту людини та машини. Очікується, що

впровадження такої технології сприятиме підвищенню виходу та стабільності процесу, зниженню енерговитрат (через оптимальні режими) та покращенню безпеки (завдяки ранньому виявленню відхилень і потенційних несправностей, що у масштабах глобальної індустрії може дати значний економічний ефект і зменшити споживання природного газу та викиди CO₂).

Ключові слова: фізично обґрунтовані нейронні мережі, PINNs, контроль якості, процес Габера-Боша, синтез аміаку, цифровий двійник.

Вступ. Процес Габера-Боша з синтезу аміаку є одним із найважливіших промислових процесів, від успішності якого залежить виробництво добрив та глобальна продовольча безпека. Аміак – другий за обсягами виробництва хімічний продукт у світі, і його виробництво споживає колосальні енергетичні ресурси – до 3–5% світового природного газу, що еквівалентно ~1–2% глобального енергоспоживання [1]. Будь-яке підвищення ефективності процесу або якості кінцевого продукту може мати значний економічний та екологічний ефект. Контроль якості в контурі синтезу аміаку відіграє ключову роль у забезпеченні максимальної конверсії та чистоти продукції, а також у запобіганні позаштатним ситуаціям.

Однак процес синтезу аміаку є вкрай складним для моделювання і керування: він проходить при високому тиску (15–25 МПа) і температурі (400–450 °С) у присутності твердого каталізатора, а одинична конверсія за

цикл невелика (~15%), тому газову суміш рециркулюють. Система має високонелінійну динаміку з декількома стадіями (риформінг метану, конверсія CO, очистка газу, власне синтез аміаку тощо) [2]. Часто трапляються коливання входних параметрів – зміни продуктивності, коливання складу сировини, старіння каталізатора – що призводить до відхилень параметрів процесу. Традиційні автоматичні системи керування (наприклад, зі зворотним зв'язком або внутрішньою моделлю) потребують точної математичної моделі процесу. Проте побудова адекватної першопринципної моделі для синтезу аміаку є складним і тривалим завданням, через наявність невизначеностей і нелінійностей, тож впровадження класичних методів високоякісного контролю утруднене [3, 4].

Важливою метою контролю є підтримання стабільного складу газової суміші та кінцевої продукції. Наприклад, для максимізації виходу аміаку потрібно автоматично підтримувати стехіометричне співвідношення водню до азоту $N/N \approx 2,99$ у синтез-газі. Це непросте завдання, оскільки пряма онлайн-оцінка співвідношення N/N відсутня – відповідні концентрації доводиться побічно обчислювати або періодично перевіряти лабораторно [5]. Аналогічно, концентрація аміаку на виході реактора є визначальним показником якості продукту, але її важко вимірювати в режимі реального часу через високу вартість та ненадійність відповідних сенсорів. Замість цього на практиці застосовують непрямий контроль: відбирають проби, проводять аналіз складу, а оператори або автоматичні регулятори коригують умови процесу за результатами аналізів. Такий підхід має низку недоліків: по-перше, запізнення між відбором проби і отриманням результату може призвести до виробництва позаспецифікаційного продукції в цей час; по-друге, обмежена кількість сенсорів не дозволяє повністю спостерігати за внутрішнім станом процесу, зокрема розподілом температури і концентрацій уздовж каталізатора; по-третє, класичні емпіричні моделі або регулятори з фіксованими налаштуваннями можуть не впоратися з відхиленнями, коли змінюються умови або з'являються збурення [6, 7].

У зв'язку з цим актуальним є пошук нових методів контролю якості, що здатні об'єднати перевірені фізико-хімічні знання про процес та гнучкість сучасних методів штучного інтелекту. Один з перспективних підходів – використання

фізично обґрунтованих нейронних мереж (PINNs) для створення моделей процесу, здатних у реальному часі оцінювати якісні показники продукту (концентрацію, чистоту аміаку) та допомагати в оптимізації режимів. Нижче розглядаються мета і завдання такого підходу, сучасний стан досліджень та очікувані переваги від його реалізації.

Мета та завдання. Метою впровадження PINNs у контроль якості процесу Габера-Боша є підвищення точності і швидкодії оцінки ключових параметрів продукту (перш за все концентрації аміаку) за рахунок поєднання даних від датчиків з фундаментальними законами кінетики та термодинаміки процесу [2]. Такий підхід прагне забезпечити цифровий двійник реактора синтезу аміаку, який в режимі реального часу відтворює протікання реакції і прогнозує вихідний склад продукту. Це дозволить оперативно виявляти будь-які відхилення якості та вживати коригувальні дії раніше, ніж традиційні методи. Для досягнення зазначеної мети необхідно розв'язати такі завдання:

Розробка PINN-моделі, що описує процес синтезу аміаку. Це передбачає вибір архітектури нейронної мережі і включення до неї основних фізичних закономірностей процесу: рівнянь матеріального балансу реагентів (N_2 , H_2) і продукту (NH_3) вздовж реактора, кінетичного закону реакції синтезу, рівнянь теплообміну (баланс енергії) тощо [4, 8]. На відміну від звичайної нейромережі, PINN тренується з урахуванням цих рівнянь як додаткових обмежень у функції втрат. Таким чином, мережа під час навчання прагне мінімізувати не лише помилку між своїм прогнозом і наявними даними, але й нев'язку диференціальних рівнянь, що описують фізику процесу.

Інтеграція наявних даних та знань: визначення, які вимірювані параметри з існуючої системи контролю (тиски, температури на вході/виході, витрати газів, можливо, періодичні дані газового аналізу) будуть використовуватися для навчання та верифікації PINN. Модель може тренуватися у двох режимах: (1) на основі історичних даних роботи установки (що включають різні режими, зміни навантаження, випадки зміни якості продукту) – для підлаштування під реальні умови; (2) на основі синтетичних даних, згенерованих детальною першопринципною моделлю або з літературних кінетичних залежностей – для забезпечення фізично коректної початкової бази. Комбінація обох

підходів теж можлива: мережа може навчатися частково в самоконтрольованому режимі на основі фізичних рівнянь (генеруючи власні тренувальні точки), доповненому невеликою кількістю реальних даних для калібрування. Це відповідає стратегії напівконтрольованого навчання, де знання фізики допомагає компенсувати малий обсяг експериментальних даних.

Реалізація та обчислювальна оптимізація: впровадження алгоритмів навчання PINN, здатних збіжно і відносно швидко налаштувати модель на обрані завдання. Оскільки пряме навчання глибокої мережі з складеними рівняннями може бути обчислювально витратним і стикається з проблемами збіжності для жорстких (stiff) рівнянь хімічної кінетики, необхідно дослідити сучасні методи оптимізації PINN [1]. До таких належать методи декомпозиції області та розподіленого навчання, що дозволяють розбити складну задачу на підзадачі, пришвидшивши навчання, а також методики адаптації до змінних граничних умов. У контексті задачі контролю якості важливо, щоб модель могла адаптуватися до різних режимів роботи (різні витрати газу, зміни температури, поступове деактивування каталізатора) без переучування з нуля щоразу. Тому завданням є забезпечити здатність PINN узагальнювати знання про процес, щоб одноразово навчена модель коректно працювала при варіюванні параметрів в певних діапазонах.

Інтеграція з існуючою системою керування: після побудови та верифікації PINN-модель повинна бути впроваджена як модуль в систему керування виробництвом. Це може бути реалізовано як програмний модуль (наприклад, в рамках цифрового двійника установки), що отримує в реальному часі поточні показники датчиків, і обчислює додаткові оцінки – передбачувану концентрацію аміаку в продукції, ступінь конверсії, оптимальну точку роботи тощо. Завдання полягає в тому, щоб результати PINN легко зчитувалися оператором або автоматично використовувалися регуляторами (наприклад, у системі передиктивного керування чи сигналізації відхилень).

Аналіз досліджень і публікацій. Застосування методів штучного інтелекту, зокрема нейронних мереж, в хімічному технологічному секторі активно досліджується в останні десятиліття. Традиційні підходи до моделювання складних реакторних систем стикаються з труднощами, тому дослідники

звернулися до алгоритмів машинного навчання, які здатні апроксимувати нелінійні залежності на основі даних. Наприклад, для задачі контролю процесу синтезу аміаку раніше пропонувалося використовувати нейронні мережі як «soft sensor» (м'які датчики) – модельні сенсори, що на основі легко вимірюваних величин (тиск, температура, витрати) оцінюють важкодоступні параметри, такі як концентрація NH_3 . У роботі Xu та ін. (2011) [9] описано створення такого софт-сенсора: вихідна концентрація аміаку прогнозувалася за допомогою багатошарової нейронної мережі (BPNN), навченої на виробничих даних, а для оптимізації її ваг застосовано метод часток рою. Запропонована модель досягла високої точності і добре узагальнювала результати навіть за межами навчальної вибірки, доводячи ефективність підходу в допомозі операторам та системам керування. Цей приклад демонструє потенціал нейромереж у задачах контролю якості – з їх допомогою можна отримати оцінку ключового показника (вміст аміаку) без прямого вимірювання, що критично, коли онлайн-аналізatori ненадійні чи відсутні. Водночас, дані підходи мають обмеження: вони вимагають великого набору якісних даних для навчання і можуть втратити актуальність, якщо процес змінився поза межами накопичених даних (наприклад, інша сировина або деградація каталізатора). Останніми роками з'явився новий клас моделей – Physics-Informed Neural Networks (PINNs), покликаний об'єднати сильні сторони диференціальних рівнянь (фізичних моделей) та нейронних наближувачів. Піонерська робота Raissi, Perdikaris & Karniadakis (2019) [10] ввела концепцію PINN, де під час навчання мережі до функції втрат додаються члени, що відповідають нев'язкам рівнянь фізичної моделі. Це дозволяє нейронній мережі навчатися на основі законів збереження та рівнянь переносу навіть без великого масиву експериментальних даних, фактично розв'язуючи як прямі, так і зворотні задачі фізики. В огляді Cuomo та ін. (2022) [11] відзначено, що PINNs успішно застосовано вже в різних галузях: від моделювання аеродинаміки до задач теплообміну, а також в суміжних сферах, таких як гідродинаміка реагуючих потоків і системи очищення води. Наприклад, Li та ін. (2024) [12] використали PINN для типових апаратів водоочистки (перемішаного реактора, біореактора, адсорбера) і показали, що в умовах обмежених даних такі моделі суттєво

перевершують звичайні ML-моделі за точністю прогнозу та здатністю до узагальнення. Важливо, що PINN за рахунок вбудованих априорних знань про процес може досягти прийнятної точності, використовуючи на порядок менше експериментальних точок. Це критично для промислових процесів, де збирання великих датасетів є дорогим і часом неможливим (не можна зупинити установку для проведення експериментів). У сфері хімічного виробництва PINNs також почали знаходити застосування. Зокрема, дослідники зосереджені на подоланні проблеми жорстких хімічних кінетик та багатомасштабності моделей. Weng і Zhou (2022) [13] запропонували підхід Multiscale PINN для моделювання жорстких кінетичних схем, з метою адекватно відтворювати динаміку швидких та повільних реакцій без необхідності штучного сповільнення хімічних рівнянь. Це відкриває шлях до застосування PINN для реакторів з багатьма елементарними стадіями, подібних до синтезу аміаку, де кінетика містить швидкі адсорбційні рівноваги та повільні кроки реакції. Інші роботи фокусуються на тому, щоб навчити PINN моделі, котрі залишаються точними за різних граничних умов. Rao та ін. (2023) [14] представили методику «train once, use forever», яка поєднує генеративні мережі потоку (GFNet) та PINN для узагальнення на довільні профілі граничних умов. Це саме та властивість, яка потрібна для промислових застосувань зі змінними режимами. Безпосередньо стосовно процесу Габера-Боша, вже ведуться дослідження із застосування PINNs та суміжних методів. Зокрема, для модернізації процесу шляхом введення нестандартних умов (плазмове збудження реакції) дослідники випробували PINN як інструмент оптимізації. Нещодавня робота Cabral та ін. (2024) [15] показала, як можна використати глибоку рекурентну мережу (LSTM) для прискорення моделювання реактора аміаку в задачах Model Predictive Control. Автори створили детальну мультифізичну модель реактора (охоплюючи термодинаміку, кінетику, перенесення тепла і маси), але виявили, що її пряма реалізація занадто повільна для оптимізації в реальному часі. Тому було навчено LSTM-мережу, яка апроксимує динаміку реактора і використовується як сурогатна модель у контурі керування. Це дозволило значно знизити обчислювальне навантаження, однак за рахунок часткової втрати точності – мережа вимагала регулярної корекції від високоточної моделі при кожному

кроці, щоб помилки не накопичувалися. Даний приклад підкреслює, що чисто дата-керовані моделі (навіть глибокі, як LSTM) можуть дрейфувати від фізично правильного рішення, якщо їх не «прив'язувати» назад до фізики. Це і є ніша для PINNs: вони з самого початку будуються з урахуванням фізичних рівнянь, тож внутрішньо забезпечують узгодженість з законами збереження і термодинамікою процесу. Відтак, PINN-сурогат може потенційно забезпечити кращу довгострокову стабільність прогнозу без постійної ручної корекції.

Аналіз літератури свідчить про такі тенденції: (1) нейромереві моделі широко досліджуються для моніторингу і контролю хімічних процесів, зокрема для оцінювання важливих показників якості (як от концентрація аміаку) в реальному часі; (2) фізично-інформовані методи (PINNs) показали високу ефективність у різних галузях і починають застосовуватися для хімічних реакторів, долаючи обмеження традиційних нейромерев при нестачі даних; (3) триває удосконалення алгоритмів PINN, що дозволить адаптувати їх до складних промислових систем з динамічними режимами. Ці напрацювання створюють науково-технічне підґрунтя для впровадження PINNs у контроль якості синтезу аміаку.

Основна частина. *Архітектура PINN-моделі для реактора синтезу аміаку.*

В процесі Габера-Боша азот і водень реагують на поверхні твердого каталізатора, утворюючи аміак: $N_2 + 3H_2 \rightarrow 2NH_3$. Ця реакція екзотермічна і рівноважна, тому вздовж довгого шару каталізатора концентрація NH_3 зростає, але наближається до межі рівноваги, тоді як концентрації реагентів падають. Одночасно виділяється тепло, підвищуючи температуру, що може зміщувати рівновагу і впливати на швидкість реакції. Для опису цих явищ використовують систему диференціальних рівнянь: матеріальні баланси компонентів (наприклад, у формі рівнянь для змін парціального тиску або мольної частки аміаку по довжині реакційної зони) та енергетичний баланс (рівняння для температурного профілю з урахуванням теплоти реакції і теплообміну зі стінками) [7, 16]. В класичному підході ці рівняння розв'язують чисельно (методом скінченних різниць, методом Рунге-Кутти тощо) для прогнозу роботи реактора. Натомість у PINN ці ж рівняння використовуються як частина навчання мережі. Конкретно, PINN-модель може бути побудована так: обирається нейронна мережа, яка приймає на вхід

координату вздовж реактора (можливо, разом із часом, якщо розглядати динамічні перехідні процеси) та інші параметри процесу (наприклад, поточні значення температури та концентрацій на вході реактора, витрати газів, тиск), а на виході видає прогнозовані значення невідомих функцій [10, 11] – наприклад, концентрації аміаку $C_{NH_3}(z)$ та, за необхідності, температури $T(z)$ у будь-якій точці реактора. Мережа ініціалізується з довільними вагами і по суті являє собою універсальний наближувач для шуканих профілів величин. В процесі навчання визначається, які значення набувають ці функції, причому критерій оптимізації (функція втрат) складається з двох основних частин: (1) відхилення прогнозів мережі від наявних експериментальних даних (наприклад, мережа повинна відтворити відоме значення концентрації аміаку на виході реактора, яке вимірюється періодично, а також може повинна відповідати будь-яким іншим доступним даним – наприклад, температурі в певній точці, якщо там є датчик); (2) величини нев'язок диференціальних рівнянь фізичної моделі. Для обчислення останніх мережа диференціюється по входах (координаті z тощо) – оскільки PINN реалізується на базі т.зв. *автоматичного диференціювання*, отримати вирази $\frac{dC_{NH_3}}{dz}$, $\frac{dT}{dz}$ тощо не складає труднощів. Ці похідні підставляються в вихідні рівняння (наприклад, рівняння матеріального балансу може мати вигляд $\frac{dC_{NH_3}}{dz} = f(C_{NH_3}, C_{N_2}, C_{H_2}, T)$, де права частина – відома кінетична формула). Мережа прагне мінімізувати різницю між $\frac{dC_{NH_3}}{dz}$, що випливає з її власного прогнозу, та значенням $f(\cdot)$ згідно відомої фізики. Таким чином, якщо мережа початково давала невідповідний профіль концентрації, який не задовольняє кінетику, то великий штраф за порушення рівняння скоригує ваги мережі у напрямку фізично коректного розв'язку. Аналогічно забезпечується дотримання рівнянь для водню, азоту (баланси реагентів) та балансу енергії. Крім того, до функції втрат включаються умови на граничних точках: на вході реактора відомі концентрації (умова Діріхле) та температура, на виході – можна задати умову похідної (наприклад, градієнт концентрації відповідає досягненню рівноваги). Ці умови також входять до функції втрат, гарантуючи, що рішення мережі задовольняє повний набір фізичних вимог.

Навчання та верифікація моделі.

Навчання PINN для аміачного реактора можна здійснювати офлайн (на історичних даних) чи онлайн (під час роботи процесу з поступовим вдосконаленням моделі). У промислових умовах більш практично спочатку провести навчання офлайн. Для цього використовуються доступні дані: наприклад, записи з DCS (системи розподіленого керування) за останні місяці роботи, що включають періоди стабільної роботи і, можливо, відомі випадки відхилення якості. Частина цих даних використовується для навчання, а частина – для перевірки моделі. Важливо пересвідчитися, що PINN правильно передбачає концентрацію аміаку на виході для різних режимів, представлених у даних, а також не суперечить відомим фізичним фактам (наприклад, не прогнозує перевищення рівноваги або від'ємні концентрації). Якщо реальні дані обмежені (що типово, адже завод зазвичай працює в близькому до стаціонарного режимі), то для розширення набору можна змоделювати ряд сценаріїв за допомогою перевіреної моделі (наприклад, наявної у інженерів моделі реактора на основі кінетики) і додати ці синтетичні дані до навчання. PINN буде прагнути одночасно узгодитись і з симульованими сценаріями, і з реальними точками – це підвищить її здатність до узагальнення. Одним зі специфічних викликів є жорсткість кінетичних рівнянь синтезу аміаку: при певних температурах швидкість реакції різко змінюється (скажімо, поблизу гарячих точок у шарі каталізатора), а рівняння теплопереносу та рівноваги газів можуть призводити до сильно нелінійної поведінки [8, 17]. Це може ускладнювати навчання, оскільки мережі важко одночасно мінімізувати нев'язки дуже різних масштабів. У сучасних дослідженнях запропоновано кілька методів, як от зважування членів функції втрат (adaptive loss balancing), коли штраф за порушення різних рівнянь автоматично масштабуються, щоб жодне з рівнянь не було проігнороване. Інший підхід – розщеплення домену: замість однієї мережі на весь реактор можна використовувати кілька PINN, кожна відповідає за свій сегмент (наприклад, ділять шар каталізатора на зони). На межах зон вводяться умови стику (континуальності), як це реалізовано, наприклад, Patel та ін. (2024) для моделі підігрівача повітря. Вони успішно застосували PINN до кожного піддомена теплообмінника і наклали умови узгодження на межах,

досягнувши тим самим стабільного навчання і можливості паралельного розв'язання. Подібний принцип може бути застосований і до аміачного реактора, особливо якщо він складається з кількох послідовних шарів каталізатора з проміжним охолодженням (як часто реалізовано в промислових установках). Кожен шар може мати свою модель, з'єднану з наступною через граничні умови (температура і склад на виході одного шару = на вході наступного). Це спростить навчання і зробить модель модульною. Після отримання задовільної точності моделі її слід верифікувати на фактичному процесі [9-12]. На цьому етапі PINN інтегрують в інфраструктуру автоматизації, і протягом певного часу вона працює в пасивному режимі – тобто розраховує прогноз якості, паралельно з реальним виробництвом, але не впливає на нього. В цей період збираються дані: прогноз PINN порівнюють з результатами реальних вимірювань якості. Якщо виникають розбіжності, модель донавчають, вводючи нові дані або підлаштовуючись гіперпараметри. В кінцевому підсумку, мета – досягти, щоб PINN надала впевнений високоточний софт-сенсор концентрації аміаку та інших показників процесу. В літературі повідомляється, що подібні модельні сенсори на основі нейромереж здатні досягати високої точності і гарної узагальненості, тому очікується, що PINN не лише відтворить ці результати, а й перевершить їх за рахунок використання фізичної інформації.

Інтеграція PINN в систему контролю якості.

Успішно навчена PINN-модель реактора аміаку може бути інтегрована декількома способами:

- *Моніторинг якості в реальному часі:* PINN працює паралельно з реактором, отримуючи з DCS поточні вимірювання (тиск на вході, температура на вході, температура охолоджуючого середовища, витрати H_2 і N_2 , тощо). На основі цих даних модель розраховує поточну концентрацію NH_3 на виході та, за бажання, прогнозує профіль концентрацій і температури всередині реактора. Ці значення оновлюються практично безперервно (наприклад, щосекунди). Таким чином, навіть якщо немає онлайн-газоаналізатора на виході, оператор отримує віртуальний датчик концентрації аміаку з мінімальною затримкою [6]. Якщо PINN вказує на відхилення концентрації від нормативної, можна негайно вжити заходів (змінити температуру,

співвідношення H_2/N_2 або зменшити навантаження), не чекаючи аналізу проб. Крім того, модель може попереджати про наближення до небезпечних режимів – наприклад, якщо прогнозується перегрів (гаряча точка) вище безпечного рівня, що загрожує пошкодженням каталізатора.

- *Передиктивне керування та оптимізація:* інтегрувавши PINN в контур керування, можна реалізувати Model Predictive Control (MPC) [18] або подібні стратегії. В цьому випадку PINN використовується як швидкодіючий заміник громіздкої першопринципної моделі при розрахунку оптимальних дій. Наприклад, контролер MPC може за допомогою PINN прогнозувати, як зміна подачі газу або температури вплине на концентрацію аміаку через деякий час, і підбирати оптимальні зміни, щоб підтримувати якість на цільовому рівні. Завдяки тому, що PINN вже враховує фізику, вона забезпечує надійність таких прогнозів. На практиці схожий підхід з LSTM-моделлю вже був продемонстрований, але PINN може підвищити точність і стабільність прогнозу, особливо при виході за межі початкових режимів [17].

- *Система підтримки рішень і діагностика:* дані, які видає PINN, можуть бути корисні не лише для автоматичного регулятора, але й для інженерно-технічного персоналу. Маючи детальну картину процесу «всередині» реактора (розподіл T і концентрацій, який не можна виміряти датчиками напряму), фахівці можуть краще розуміти, наскільки ефективно працює установка. Наприклад, PINN може показати, що в останній частині шару каталізатора реакція практично припинилася (досягнуто рівноваги) – це сигнал, що можна оптимізувати процес, знизивши температуру чи збільшивши рециркуляцію, аби зберегти енергію без втрати виходу. Або якщо модель вказує на аномалії (скажімо, раптово гірше узгоджує дані, сигналізуючи про потенційну зміну кінетики) – це може служити раннім попередженням про проблеми, такі як отруєння каталізатора домішками чи негерметичність (підсмоктування інертних газів). В літературі відзначено, що PINN-прогнози можуть суттєво підвищити прозорість процесу для оператора, надаючи інформацію, яка раніше була недоступною в реальному часі. Така модель легко вбудовується в цифровий двійник установки і стає основою для системи предиктивної діагностики та обслуговування.

Порівняння з традиційними методами контролю якості.

PINN-підхід володіє рядом переваг над стандартними методами, які сьогодні застосовуються в процесі синтезу аміаку:

- *Оперативність та безперервність контролю:* Замість дискретного контролю якості (наприклад, щогодинний аналіз проб) PINN забезпечує безперервний потік даних про якість продукту. Це дозволяє практично миттєво реагувати на відхилення, зменшуючи кількість браку або позапланових зупинок.

- *Менша залежність від вимірювального обладнання:* Деякі дорогі або повільні аналізатори можна замінити на софт-сенсори. Як зазначалось, вимірювання концентрації NH_3 онлайн складне, тому модельний датчик на основі PINN вирішує цю проблему. Крім того, PINN може працювати навіть за відсутності частини датчиків – вона здатна “домалювати” картину на основі фізичних закономірностей. Наприклад, модель Patel та ін. (2024) для теплообмінника могла прогнозувати внутрішні температури без жодного датчика всередині апарату, лише за зовнішніми даними, залишаючись при цьому фізично коректною. Це особливо цінно, коли встановлення додаткових сенсорів неможливе через конструктивні чи фінансові обмеження.

- *Врахування фізичних меж і законів:* На відміну від суто емпіричних моделей, PINN не буде пророкувати неможливого. Вона знає, що концентрація аміаку не може перевищити рівноважної межі при заданій температурі і тиску, або що збільшення температури понад певний рівень зменшить вихід (через зміщення рівноваги). Такі закономірності закладені в її навчання, тому моделі можна більше довіряти при екстраполяції або в ситуаціях, де дані відсутні. Це підвищує надійність контролю – система не прийме рішень на основі хибних прогнозів.

Зменшення потреби в великих даних і можливість роботи в нових умовах: Традиційні підходи на основі нейронних мереж або регресій вимагають повторного навчання при значній зміні умов (наприклад, новий каталізатор або інша сировина). PINN же, завдяки включенню фундаментальних рівнянь, має ширші можливості до узагальнення. Дослідження показали, що PINN, навчені на одному наборі умов, можуть правильно працювати і при іншому навантаженні чи режимі. Отже, модель є більш гнучкою. До того ж, якщо потрібно адаптувати її, це можна зробити шляхом

невеликого донавчання, а не повної перебудови – база знань (фізика) залишається актуальною.

Покращення оптимізації процесу: Маючи валідовану PINN-модель, інженери можуть проводити віртуальні експерименти – наприклад, перевірити, як вплине на якість продукту зниження тиску або інша схема охолодження між шарами каталізатора. Це своєрідний «симулятор процесу», швидкий і точний, яким можна користуватися для оптимізації без ризику для реального виробництва. Традиційні моделі теж це дозволяють, але PINN поєднує швидкість (виконання за частки секунди) з достатньою точністю, наближеною до першопринципних моделей.

Звичайно, впровадження PINN не скасовує повністю класичні методи контролю – швидше, воно доповнює їх. Первинна калібровка моделі все одно потребує деяких експериментальних даних та експертних знань про процес. Але після цього PINN стає потужним інструментом, що працює поряд з існуючими системами контролю, підвищуючи їх ефективність.

Висновки. Контроль якості аміаку в процесі Габера-Боша може значно виграти від застосування Physics-Informed Neural Networks. Проведений аналіз показує, що PINNs здатні об'єднати точність і обґрунтованість фізичних моделей з адаптивністю та швидкістю сучасних нейронних мереж. Вони дозволяють здійснювати безперервний моніторинг ключових показників якості – таких як концентрація та чистота аміаку – навіть за відсутності прямих сенсорів, спираючись на дані доступних датчиків і фундаментальні закони кінетики й термодинаміки процесу. PINN-моделі можуть бути інтегровані в цифровий двійник аміачної установки, надаючи операторам і інженерам прозорий інструмент для оцінки стану реактора в реальному часі та підтримки прийняття рішень. Очікується, що впровадження такої технології сприятиме підвищенню виходу та стабільності процесу, зниженню енерговитрат (через оптимальні режими) та покращенню безпеки (завдяки ранньому виявленню відхилень і потенційних несправностей). У масштабах глобальної індустрії навіть невелике збільшення ефективності синтезу аміаку може дати значний економічний ефект і зменшити споживання природного газу та викиди CO_2 .

Для повномасштабного промислового впровадження PINNs необхідно врахувати кілька моментів. По-перше, навчання таких

мереж на складних багатофізичних процесах все ще потребує значних обчислювальних ресурсів і часу, а іноді стикається з проблемами збіжності. Це вимагає продовження досліджень у напрямку прискорення алгоритмів (розпаралелення, використання спеціалізованого апаратного забезпечення, удосконалення оптимізаційних методів) та спрощення архітектур без втрати точності. По-друге, варто провести більше експериментальних випробувань PINN-моделей на реальних виробництвах, аби підтвердити їхню надійність в довготривалій експлуатації, оцінити економічний ефект і виявити можливі підводні камені (наприклад, несподівані відхилення моделі при виході за рамки навчання).

Перспективними напрямками подальших досліджень є створення гібридних систем контролю, де PINN поєднано з класичними алгоритмами керування або з методами підсиленого навчання для автоматичного підстроювання режимів. Також цікавим є розширення підходу на інші частини технологічного ланцюга виробництва аміаку – наприклад, на секцію підготовки синтез-газу (риформінг, очистка) – щоб створити єдину PINN-модель всього процесу. Це б дало змогу оптимізувати всю систему комплексно. Крім того, досвід, накопичений у застосуванні PINNs до процесу Габера-Боша, може бути перенесений на інші важливі процеси хімічної промисловості (виробництво метанолу, етилену, нафтохімія тощо), де контроль якості і ефективності так само критично важливий і де присутні подібні виклики (нелінійність, багатостадійність, обмежені вимірювання).

Фізично обґрунтовані нейронні мережі пропонують новий рівень інтелектуального контролю для хімічних процесів. У випадку синтезу аміаку цей підхід дозволяє по-новому вирішити давні проблеми контролю якості, об'єднавши науку і дані. Реалізація PINN у виробництві аміаку потенційно забезпечить більш високу якість продукту, гнучкість операцій та стійкість процесу, сприяючи прогресу в напрямі «Industry 4.0» [20] в хімічній промисловості. Це крок до більш розумних і ефективних заводів, де кожен важливий процес знаходиться під надійним наглядом комбінованого інтелекту людини та машини.

Література

1. Ahmed, Hafiz Sharjeel, et al. "Sustainable pathways to ammonia: a comprehensive review of green production approaches." *Clean Energy* 8.2, 2024: 60-72.
2. Erfani, Navid, Luqmanulhakim Baharudin, and Matthew Watson. "Recent advances and intensifications in Haber-Bosch ammonia synthesis process." *Chemical Engineering and Processing-Process Intensification*, 2024: 109962.
3. Humphreys, John, Rong Lan, and Shanwen Tao. "Development and recent progress on ammonia synthesis catalysts for Haber-Bosch process." *Advanced Energy and Sustainability Research* 2.1 (2021): 2000043.
4. Capdevila-Cortada, Marçal. "Electrifying the haber-bosch." *Nature Catalysis* 2.12, 2019: 1055-1055.
5. Chai, Wai Siong, et al. "A review on ammonia, ammonia-hydrogen and ammonia-methane fuels." *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 147, 2021: 111254.
6. Awad, Omar I., et al. "Characteristics of NH₃/H₂ blend as carbon-free fuels: A review." *International Journal of Hydrogen Energy* 48.96, 2023: 38077-38100.
7. Wang, Du, et al. "Numerical study of the premixed ammonia-hydrogen combustion under engine-relevant conditions." *International Journal of Hydrogen Energy* 46.2, 2021: 2667-2683.
8. Zhu, Baoyu, et al. "A physics-informed neural network that considers monotonic relationships for predicting NO_x emissions from coal-fired boilers." *Fuel* 364, 2024: 131026.
9. Xu, Tao, et al. "Synthesis, characterization, and antibacterial activity of N, O-quaternary ammonium chitosan." *Carbohydrate research* 346.15, 2011: 2445-2450.
10. Raissi, Maziar, Paris Perdikaris, and George E. Karniadakis. "Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations." *Journal of Computational physics* 378, 2019: 686-707.
11. Cuomo, Salvatore, et al. "Scientific machine learning through physics-informed neural networks: Where we are and what's next." *Journal of Scientific Computing* 92.3, 2022: 88.
12. Li, Kai-Qi, et al. "A PINN-based modelling approach for hydromechanical behaviour of unsaturated expansive soils." *Computers and Geotechnics* 169, 2024: 106174.
13. Weng, Yuting, and Dezhi Zhou. "Multiscale physics-informed neural networks for stiff chemical kineti
14. Rao, Yongming, et al. "GFNet: Global filter networks for visual recognition." *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence* 45.9, 2023: 10960-10973.cs." *The*

- Journal of Physical Chemistry A 126.45, 2022: 8534-8543.
15. Cabral, Thales W., et al. "Load Recognition in Home Energy Management Systems Based on Neighborhood Components Analysis and Regularized Extreme Learning Machine." *Sensors* 24.7, 2024: 2274.
 16. Smith, Collin, Alfred K. Hill, and Laura Torrente-Murciano. "Current and future role of Haber–Bosch ammonia in a carbon-free energy landscape." *Energy & Environmental Science* 13.2, 2020: 331-344.
 17. Genedy, Rana A., et al. "A physics-informed long short-term memory (LSTM) model for estimating ammonia emissions from dairy manure during storage." *Science of The Total Environment* 912, 2024: 168885.
 18. Kouvaritakis, Basil, and Mark Cannon. "Model predictive control." Switzerland: Springer International Publishing 38.13-56, 2016: 7.
 19. Patel, Janak M., et al. "Parameter Tuning and Modeling of a Rotary Kiln using Physics-Informed Neural Networks." ICML, 2024. AI for Science Workshop.
 20. Ghobakhloo, Morteza. "Industry 4.0, digitization, and opportunities for sustainability." *Journal of cleaner production* 252, 2020: 119869.

Vodianyuk B.R., Loria M.G., Kobzarev E.V.
Application of physics informed neural networks (pinn) in quality control of the haber-bosch process product

The article considers the possibilities of using Physics-Informed Neural Networks (PINNs) for quality control of ammonia produced by the Haber-Bosch process. The ammonia synthesis process is a highly nonlinear and important industrial process where product stability and high quality are critical. Traditional quality control methods face limitations, such as the lack of direct online measurements of key parameters and the need for large amounts of data to build models. PINNs offer a hybrid approach that combines physical laws of the process with deep learning capabilities, allowing for accurate real-time prediction of ammonia concentration and purity based on a limited set of sensors. The paper analyses current research on the use of neural networks in industrial processes and

justifies the architecture of a PINN model for monitoring product quality in ammonia synthesis. The advantages of PINNs over traditional methods are shown, such as reducing the need for data, providing physically consistent results, and integrating into existing control systems to improve production efficiency. It is proved that physically based neural networks offer a new level of intelligent control for chemical processes. In the case of ammonia synthesis, this approach allows solving long-standing quality control problems in a new way by combining science and data. The implementation of PINN in ammonia production will potentially provide higher product quality, operational flexibility and process sustainability, contributing to the progress towards Industry 4.0 [20] in the chemical industry. This is a step towards smarter and more efficient plants, where every critical process is under the reliable supervision of combined human and machine intelligence. The technology is expected to increase process yield and stability, reduce energy consumption (through optimal operating conditions) and improve safety (through early detection of deviations and potential malfunctions, which can have a significant economic impact on a global industry scale and reduce natural gas consumption and CO₂ emissions.

Keywords: *Physics-Informed Neural Networks, PINNs, quality control, Haber-Bosch process, ammonia synthesis, digital twin.*

Водяник Богдан Романович – аспірант, асистент кафедри комп'ютерно-інтегрованих систем управління, Східноукраїнський національний університет імені Володимира Даля, vodianyuk@snu.edu.ua

Лорія Марина Геннадіївна – д.т.н., професор, завідувач кафедри комп'ютерно-інтегрованих систем управління, Східноукраїнський національний університет імені Володимира Даля, m_loria@snu.edu.ua

Кобзарев Євген Володимирович – аспірант, асистент кафедри комп'ютерно-інтегрованих систем управління, Східноукраїнський національний університет імені Володимира Даля, kobzarev@snu.edu.ua

Стаття подана 12.11.2024.