

Бобух А. О., Дзевочко О. М., Подустов М. О., Переверзева А. М.

СИНТЕЗ КРИТЕРІЇВ ОЦІНЮВАННЯ ЯКОСТІ ВИБОРУ СТРУКТУРИ МАТЕМАТИЧНИХ МОДЕЛЕЙ ХІМІЧНИХ ТЕХНОЛОГІЙ

Вступ

До складу більшості хімічних виробництв входять основні та допоміжні технології зі складними технологічними процесами та апаратами і замкненими циклами за матеріальними потоками [1–2]. Наявність замкнених циклів значно ускладнює ідентифікацію таких технологій та синтез критеріїв оцінювання якості вибору структур їх математичних моделей.

Сучасний розвиток науково-технічного прогресу дозволяє розглядати основні принципи покращання ефективності комп'ютерно-інтегрованих технологій хімічних виробництв за рахунок визначення адекватних математичних моделей та вибору необхідних критеріїв оцінювання якості структури цих моделей.

Мета роботи

Виконати синтез критеріїв оцінювання якості вибору структури математичних моделей хімічних технологій, які повинні бути економічними з точки зору необхідної для їх реалізації кількості операцій, сприяли підвищенню енергозбереження і покращанню ефективності комп'ютерно-інтегрованих хімічних технологій.

Основна частина

Процес визначення математичної моделі реальних технологій хімічних виробництв включає як їх експериментальне дослідження, так і розробку алгоритмів, які передбачають визначення структури моделі (структурна ідентифікація), оцінку параметрів математичної моделі визначеної структури (параметрична ідентифікація) та оцінку адекватності цієї моделі реальній технології.

Значні труднощі отримання адекватних математичних моделей технологій хімічних виробництв завдають неконтрольовані зміни значень параметрів технологічних процесів, які викликані старінням обладнання, нестабільністю характеристик сировини тощо. Вибір структури математичної моделі можна сформулювати як визначення оптимізаційної задачі [3– 6]:

$$s^* = \arg \min_{s \in \Omega} CR(s), \quad (1)$$

де s^* – оптимальна структура математичної моделі;

s – структура математичної моделі;

Ω – численність усіх можливих структур, в яких перебувають деякі незалежні параметри із «повного» набору незалежних параметрів;

$CR(s)$ – критерій оцінювання якості структури математичної моделі.

Математична модель із структурою, яка надає критерію якості оцінювання мінімальне значення незалежних параметрів, називається моделлю оптимальної складності [4 – 6], тобто моделлю, яка вміщує мінімальну кількість незалежних параметрів.

Зазначемо, що не всі підходи до вибору структури математичної моделі можуть бути сформульовані у вигляді задачі (1). Наприклад, якщо при добавлянні незалежних параметрів до математичної моделі значення критерію якості оцінювання буде монотонно зменшуватися, то задача вибору структури цієї моделі може бути модифікована наступним чином: вибрати найбільш просту структуру s математичної моделі, критерій якості оцінювання якої задовольняє умові: $CR(s) \leq k$, де k – порогове значення [4]. Застосування комбінацій перевірки гіпотез і оптимізації представляють особливість підходу, який реалізований в методі покрокової регресії [6], де використовується критерій якості оцінювання вибору структури математичної моделі, заснований на F -критерії (Фішера) при порівнянні точності двох рядів вимірювань, при проверці стійкості технологічного процесу. Функція F – це відношення виборочних дисперсій:

$$F = \frac{\sigma_1^2}{\sigma_2^2} \quad (2)$$

Значення функції (2) для рівнів значимості 0,5 і 0,1 табулювані для відповідних ступеней свободи кожної із двох дисперсій. При порівнянні двох дисперсій в числельнику критерію (2) має бути значення більшої дисперсії. Описаний підхід використовується при визначенні структури математичних моделей. В цьому разі якість визначення структури математичної моделі оцінюється за допомогою параметричного статистичного F – критерію, який перевіряє гіпотезу про те, що дисперсії двох випадкових величин X і Y , які представлені виборками X_s і Y_s , співпадають. Для достовірності необхідно виконання двох умов: ці дві випадкові величини повині мати нормальне розподілення; виборки мають бути незалежними. Якщо ці умови виконуються, а визначені математичні моделі будуть лінійними, тоді застосування F –критерію дає добрі результати.

Взагалі критерії оцінювання, які розроблені для вибору структур математичних моделей, доцільно розділити на дві групи: критерії, які використовують екзаменаційну виборку, та критерії, які таку виборку не використовують.

Для критеріїв оцінювання першої групи використовується принцип [4 – 6], згідно яких параметри математичної моделі необхідно оцінювати за однією частиною виборки (навчальною), а якість її структури – за другою частиною виборки (екзаменаційною або перевірковою). До них відносяться критерії: регулярності, стабільності, несуперечності та варіативності. Для лінійних регресійних математичних моделей названі критерії отримують шляхом розбиття початкової виборки $W : \{Y, X\}$ на дві частини: $A : \{Y_A, X_A\}$ та $B : \{Y_B, X_B\}$. Введемо наступні позначення: $\hat{\theta}_W$, $\hat{\theta}_A$ та $\hat{\theta}_B$ – МНК-оцінки вектору параметрів θ , обчислені з використанням виборок W , A та B відповідно. Тоді ці критерії можна представити в наступному вигляді:

симетричний та несиметричний критерії регулярності – $Re g(A)$ та $Re g(B)$:

$$Re g(A) = (Y_A^* - X_A \hat{\theta}_B)^T (Y_A^* - X_A \hat{\theta}_B) + (Y_B^* - X_B \hat{\theta}_A)^T (Y_B^* - X_B \hat{\theta}_A), \quad (3)$$

$$Re g(B) = (Y_B - X_B \hat{\theta}_A)^T (Y_B - X_B \hat{\theta}_A) \quad (4)$$

симетричний та несиметричний критерії стабільності – $Stab(A)$ та $Stab(B)$:

$$Stab(A) = (Y - X\hat{\theta}_A)^T (Y - X_B\hat{\theta}_A) + (Y - X\hat{\theta}_B)^T (Y - X\hat{\theta}_B), \quad (5)$$

$$Stab(B) = (Y - X\hat{\theta}_A)^T (Y - X\hat{\theta}_A); \quad (6)$$

симетричний та несиметричний критерії несуперечності (мінімуму зміщення рішення) – $NC(A)$ та $NC(B)$:

$$NC(A) = (\hat{\theta}_A - \hat{\theta}_B)^T X^T X (\hat{\theta}_A - \hat{\theta}_B), \quad (7)$$

$$NC(B) = (\hat{\theta}_A - \hat{\theta}_B)^T X^T X_B (\hat{\theta}_A - \hat{\theta}_B); \quad (8)$$

симетричний та несиметричний критерії варіативності (абсолютної перешкодостійкості критерії) – $V(A)$ та $V(B)$:

$$V(A) = (\hat{\theta}_w - \hat{\theta}_A)^T X^T X (\hat{\theta}_B - \hat{\theta}_w), \quad (9)$$

$$V(B) = (\hat{\theta}_w - \hat{\theta}_A)^T X_B^T X_B (\hat{\theta}_B - \hat{\theta}_w). \quad (10)$$

Зауважимо, що любий симетричний критерій (CR) дорівнює сумі двох несиметричних: $CR = CR(A) + CR(B)$.

При обчисленні критеріїв, які відносяться до другої групи [4 – 6], використовуються критерій залишкової суми квадратів помилок моделі – RSS :

$$RSS = \frac{1}{K} \sum_{i=1}^K [y(i) - \hat{y}(i)]^2, \quad (11)$$

де $y(i)$, $\hat{y}(i)$ – вимір та оцінки відповідно.

Сама ця величина не може слугувати критерієм оцінювання для вибору структури математичної моделі, оскільки зі збільшенням складності моделі S відбувається все більш точне приближення її до оригіналу, що можливо та допустимо тільки при відсутності перешкод. Якщо відомо, що шум має нормальне розподілення, тоді застосовують скоректований критерій $RSS(S)$ (12) або статистику Фішера (13):

$$RSS(S) = \frac{RSS}{K - S}; \quad (12)$$

$$F(S) = \frac{K}{K - S} \frac{RSS(S)}{\|y - \hat{y}\|^2}. \quad (13)$$

Якщо ж при цьому можливо отримання оцінки дисперсії перешкоди, тоді застосовують критерій Меллоуса – C_S :

$$C_S = \frac{1}{\hat{\sigma}^2} RSS + 2S - K. \quad (14)$$

Величина RSS використовується також в критерії фінальної помиилки прогнозування – $FPE(S)$:

$$FPE(S) = \frac{K+S}{K-S} RSS(S). \quad (15)$$

Широке розповсюдження мають інформаційні критерії якості оцінювання структури математичної моделі, зокрема [4 – 6]: Акаїке (AIC – Akaike’s information criterion) (16); Шварца-Риссанена (BIC – Bayesian information criterion) (17); Кульбака (KIC – Bayesian information criterion) (18); Хеннана-Куїнна (HQ) (19):

$$AIC = K \ln \left[\frac{1}{K} \sum_{i=1}^K e^2(k) \right] + K \ln \frac{K+S}{K-S}; \quad (16)$$

$$BIC = K \ln \left[\frac{1}{K} \sum_{i=1}^K e^2(k) \right] + S \ln K; \quad (17)$$

$$KIC = K \ln \left[\frac{1}{K} \sum_{i=1}^K e^2(k) \right] + 3S \ln K; \quad (18)$$

$$HQ = K \ln \left[\frac{1}{K} \sum_{i=1}^K e^2(k) \right] + 2S \ln(\ln K). \quad (19)$$

Треба зазначити, що використання будь-якого приведеного критерію оцінювання вибору структури математичної моделі не гарантує визначення її в якості оптимальної. Пошук найкращої за любим критерієм оцінювання якості структури математичної моделі відноситься до задачі цілечисленого нелінійного програмування.

Гарантоване вирішення задачі можливо отримати тільки в результаті перебору всіх визначених структур математичних моделей. При цьому кількість структур (N) визначається за формулдою $N = 2^m$, де m – кількість незалежних параметрів в «повному» наборі незалежних параметрів, із яких вибирається оптимальний їх набір. За цією причиною реально наведеним алгоритмом можливо скористуватися тільки при відносно невеликих значеннях m ($m \leq 5$) [5].

Другий спосіб заключається в перегляді тільки найбільше перспективних варіантів. При цьому використовують алгоритми направленного перебору [4], які виконують пошук мінімуму критерію оцінювання структури математичної моделі з суттєво меншими витратами, але в загальному випадку не завжди забезпечують знаходження її оптимальної структури. При цьому алгоритм «виключення» розпочинається з оцінки якості структури математичної моделі, в якій представлені всі незалежні параметри, та складається з кроків виділення з неї незалежних параметрів до тої пори, доки значення величини критерію якості моделі не перестане зменшуватися. Алгоритм «включення» діє в зворотньому напрямку. Розпочинається алгоритм із математичної моделі, яка містить в собі адитивну постійну (незалежний параметр «1»), та послідовно доповнює до неї незалежні параметри. Отже незалежний параметр, який доповнюється (виділяється) на кожному кроці, вибирається з умови найбільшого зменшення значення критерію

оцінювання якості вибору оптимальної структури математичної моделі, при цьому пошук оптимальної структури закінчується.

Вельми важливими при синтезі критеріїв оцінювання якості виникають питання стійкості в задачах вибору структур математичних моделей, а тому необхідно виділити три аспекти стійкості [4].

Перший аспект пов'язаний зі стійкістю результатів моделювання до варіативності виборки. Якщо визначаються дві моделі з однаковою структурою за двома різними частинами виборки та результати моделювання виходять різними, тоді вибрана структура моделі не забезпечує стійкість результатів та, в цілому, приводе до суперечної моделі. Одним із засобів забезпечення стійкості в цьому випадку слугує застосування критеріїв, які використовують екзаменаційну виборку.

Другий аспект пов'язаний зі завадостійкістю критеріїв якості, тобто з їх спроможністю вибирати структури, які забезпечують задовільні в будь-яком сенсі результати моделювання, в умовах збільшення дисперсії похибок.

Третій аспект стійкості пов'язаний зі стійкістю процедур вибору моделі до відхилення від класичний припущень про властивості похибок наглядання. Традиційно процедури вибору структури спираються на МНК-оцінки та самі критерії визначаються на основі залишкових сум квадратів.

Розглянуті теоретичні підстави та виконаний синтез критеріїв оцінювання якості вибору структури математичних моделей можуть бути реалізовані при розробці комп'ютерно-інтегрованих технологій виробництв хімічної промисловості на базі сучасних багатофункціональних мікропроцесорних контролерів.

Висновок В результаті досліджень розглянуті теоретичні підстави та виконаний синтез критеріїв оцінювання якості вибору структури математичних моделей хімічних технологій, які повинні бути економічними з точки зору необхідної для їх реалізації кількості операцій, сприяли підвищенню енергозбереження і покращанню ефективності комп'ютерно-інтегрованих технологій виробництв хімічної промисловості на базі сучасних багатофункціональних мікропроцесорних контролерів.

Література

1. Процессы и аппараты химической технологии : учебник для вузов в 2 ч. Ч. 1 [Текст] / Л. Л. ТОВАЖНЯНСКИЙ, А. П. ГОТЛИНСКАЯ, В. А. ЛЕЩЕНКО и др.; под общей ред. Л. Л. ТОВАЖНЯНСКОГО. Х.: НТУ «ХПИ». – 2004. – 632 с.
2. Процессы и аппараты химической технологии : учебник для вузов в 2 ч. Ч. 2 [Текст] / Л. Л. ТОВАЖНЯНСКИЙ, А. П. ГОТЛИНСКАЯ, В. А. ЛЕЩЕНКО и др.; под общей ред. Л. Л. ТОВАЖНЯНСКОГО. – Х.: НТУ «ХПИ». – 2005. – 523 с.
3. Ивахненко А. Г. Долгосрочное прогнозирование и управление сложными объектами [Текст] / А. Г. Ивахненко. – К. : Техніка. – 1975. – 311 с.
4. Степашко В. С. Методы и критерии решения задач структурной идентификации [Текст] / В. С. Степашко, Ю. В. Кочерга. / Автоматика.–1985.–№5.–С.29–37.
5. Бобух А. А. Компьютерно–интегрированная система автоматизации технологических объектов управления централизованным теплоснабжением: монография [Текст] / А. А. Бобух, Д. А. Ковалев; под ред. А. А. Бобуха. – Х.: ХНУГХ им. А. Н. Бекетова. – 2013. – 226 с.
6. Трегуб В. Г. Основы компьютерно–интегрированного керування [Текст] / В. Г. Трегуб. – К. : НУХТ. – 2005.– 191 с.

Bibliography (transliterated)

1. Protsessyi i apparaty himicheskoy tehnologii : uchebnik dlya vuzov v 2 ch. Ch. 1 [Tekst] / L. L. Tovazhnyanskiy, A. P. Gotlinskaya, V. A. Leschenko i dr.; pod obschey red. L. L. Tovazhnyanskogo. H.: NTU «HPI». – 2004. – 632 s.
2. Protsessyi i apparaty himicheskoy tehnologii : uchebnik dlya vuzov v 2 ch. Ch. 2 [Tekst] / L. L. Tovazhnyanskiy, A. P. Gotlinskaya, V. A. Leschenko i dr.; pod obschey red. L. L. Tovazhnyanskogo. – H.: NTU «HPI». – 2005. – 523 s.
3. Ivahnenko A. G. Dolgosrochnoe prognozirovaniye i upravleniye slozhnyimi ob'ektami [Tekst] / A. G. Ivahnenko. – K. : Tehnika. – 1975. – 311 s.
4. Stepashko V. S. Metody i kriterii resheniya zadach strukturnoy identifikatsii [Tekst] / V. S. Stepashko, Yu. V. Kocherga. / Avtomatizatsiya. – 1985. – 5. – S. 29–37.
5. Bobuh A. A. Kompyuterno–integrirovannaya sistema avtomatizatsii tehnologicheskikh ob'ektov upravleniya tsentralizovannym teplosnabzheniem: monografiya [Tekst] / A. A. Bobuh, D. A. Kovalev; pod red. A. A. Bobuha. – H.: HNUGH im. A. N. Beketova. – 2013. – 226 s.
6. Tregub V. G. Osnovy komp'yuterno–Integrovanogo keruvannya [Tekst] / V. G. Tregub. – K. : NUHT. – 2005. – 191 s.

УДК 66 : 519.7

Бобух А. А., Дзевочко А. М., Подустов М. А., Переверзева А. Н.

СИНТЕЗ КРИТЕРИЕВ ОЦЕНИВАНИЯ КАЧЕСТВА ВЫБОРА СТРУКТУРЫ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ХИМИЧЕСКИХ ТЕХНОЛОГИЙ

В результате исследований рассмотрены теоретические основы и выполненный синтез критериев оценивания качества выбора структуры математических моделей химических технологий, которые должны быть экономичными с точки зрения необходимого для их реализации количества операций, способствовали повышению энергосбережения и улучшению эффективности компьютерно–интегрированных технологий производств химической промышленности на базе современных многофункциональных микропроцессорных контроллеров.

UDC 66: 519.7

Bobukh A. O., Dzevochko O. M., Podustov M. O., Pereverzieva A. M.

SYNTHESIS CRITERIA FOR EVALUATING THE QUALITY OF THE CHOICE OF THE STRUCTURE OF MATHEMATICAL MODELS OF CHEMICAL TECHNOLOGIES

The studies theoretical framework and synthesis of criteria of quality assessment of the choice of the structure of mathematical models of chemical technologies that must be economical from the point of view of the necessary number of operations, contributed to improving energy efficiency and improving the effectiveness of computer–integrated technologies of the production of the chemical industry on the basis of modern multifunctional microprocessor-based controllers.